

Memoria 2019 - 2020

INSTITUTO DE QUÍMICA ORGÁNICA GENERAL (IQOG)



**Instituto de
Química
Orgánica
General
(IQOG-CSIC)**

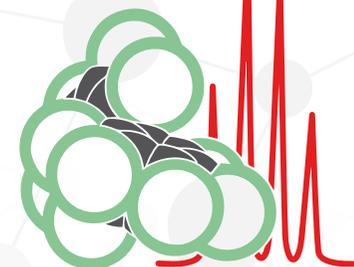
Sede:
C/ Juan de la Cierva 3. 28006, Madrid

Diseño y maquetación:
Daniel Gómez Torrico (IQOG - CSIC)

Fotografías:
Personal del IQOG y de la Unidad de Cultura Científica del
Centro de Química Orgánica Lora Tamayo (CENQUIOR - CSIC)

Correo electrónico:
info@iqog.csic.es

iqog-csic



Índice de contenidos

1. Presentación

2. Organización

- Estructura
- Recursos humanos
- Recursos económicos

3. Actividad Científica

- Departamento de Análisis Instrumental y Química Ambiental (**AIQA**)
 - Grupo de Análisis instrumental en Medio Ambiente, Alimentos y Salud (**AIMAS**)
- Departamento de Química Bio-Orgánica (**QBO**)
 - Grupo de Glicomiméticos y Nanomateriales Híbridos
 - Grupo de Glicoquímica Biológica
 - Grupo de Glicoquímica y Reconocimiento Molecular
 - Grupo de Metodologías Sintéticas Basadas en Sistemas Insaturados
 - Grupo de Oligosacáridos y Glicosistemas
- Departamento de Síntesis, Estructura y Propiedades de Compuestos Orgánicos (**SEPCO**)
 - Grupo de Investigación del Dr. Pedro Noheda (**PNRG**)
 - Grupo de Péptidos y Compuestos Aromáticos (**PEPARO**)
 - Grupo de Química Bio-Organometálica

4

6

7

8

10

12

13

13

32

32

36

44

47

52

56

56

60

64

- Grupo de Química Farmacéutica de los Compuestos de Azufre y Selenio 66
- Grupo de Reconocimiento Molecular: Interacción Carbohidrato-ADN 72
- Grupo de Síntesis Asimétrica con Sulfóxidos 74
- Laboratorio de Química Médica 77

4. Unidades de Apoyo

- Servicios Científico-Técnicos 81
 - Catálogo de Prestaciones del CSIC 82
 - Servicio de Espectrometría de Masas 83
 - Unidad de Apoyo a la Investigación 84
- Servicio de Informática 88
- Cultura Científica 88

5. Comunicación y Difusión de la Ciencia

- Ciclo de Conferencias del IQOG 89
- Jornadas Científicas 93
- Semana de la Ciencia 94
- Programa 4º ESO+Empresa 96
- Día Internacional de la Mujer y la Niña en la Ciencia 96
- Otras Actividades de Divulgación 97

6. Anexo. Publicaciones

- Producción Científica 99
- Listado de Publicaciones 100



1. PRESENTACIÓN

En esta Memoria bianual presentamos las actividades llevadas a cabo en el Instituto de Química Orgánica General (IQOG) del CSIC de los años 2019-2020.

El IQOG realiza investigación básica y orientada en distintos aspectos de la química que con frecuencia interacciona con otros campos como biología, medicina, medioambiente, tecnología de alimentos y materiales. Dentro de las áreas globales con las que se estructura la investigación del CSIC (Sociedad, Vida y Materia), las líneas fundamentales de investigación del IQOG se sitúan dentro del área global Materia y el inter-área Materia-Vida.

Actualmente nuestras líneas de investigación se enmarcan en diferentes temáticas que incluyen el desarrollo de herramientas de síntesis, catalizadores y nuevos materiales; el diseño y síntesis de moléculas con aplicaciones potenciales en el área de la salud; estudios de reconocimiento molecular; y el desarrollo de metodologías analíticas innovadoras con aplicaciones en salud, alimentos y medioambiente. El IQOG desarrolla una actividad científica de calidad, avalada con trabajos publicados mayoritariamente en revistas de impacto situado en el primer cuartil. La actividad científica de los distintos Grupos de Investigación del IQOG durante el bienio 2019-2020 se recoge en esta Memoria agrupada por los Departamentos de Investigación configurados en el Instituto: Análisis Instrumental y Química Ambiental (AIQA), Química Bio-Orgánica (QBO) y Síntesis, Estructura y Propiedades de los Compuestos Orgánicos (SEPCO).

El IQOG cuenta además con los Servicios Científico-Técnicos que proporcionan apoyo a la investigación de los diferentes Grupos y Departamentos del Instituto, así como a otros Institutos del CSIC, a Organismos Públicos de Investigación y a empresas privadas.

Realizamos además numerosas actividades de divulgación y difusión. En 2019 el Instituto ha participado muy activamente en labores divulgativas como en la Semana de la Ciencia, en la que además de las visitas guiadas a laboratorios, organizamos distintos talleres. Asimismo, participamos en el programa de la Comunidad de Madrid “4º de la ESO+empresa”. Cabe destacar también el curso de divulgación “Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad”, que viene celebrándose ininterrumpidamente desde el año 2009. Sin embargo, muchas de estas actividades tuvieron que suspenderse en el año 2020 debido a la pandemia global de coronavirus (Covid-19).

En otro orden de cosas, en este período hemos avanzado en el proyecto de traslado de la sede actual en Juan de la Cierva al campus de la Universidad de Alcalá, que ha de considerarse como una extraordinaria oportunidad para superar las deficiencias actuales y fortalecer la calidad de nuestra investigación. Durante el año 2019 hemos elaborado una Memoria Científica que recoge las líneas de investigación que realizaremos en la nueva sede. En febrero de 2020 se firmó el Protocolo de Intenciones entre el CSIC y la Universidad de Alcalá para la creación de un instituto mixto de investigación en química.

Finalmente, quiero agradecer el apoyo del personal técnico y administrativo, así como del personal contratado y en formación para ayudar en las tareas de laboratorio. Sin todos ellos, no sería posible la realización de nuestros proyectos.

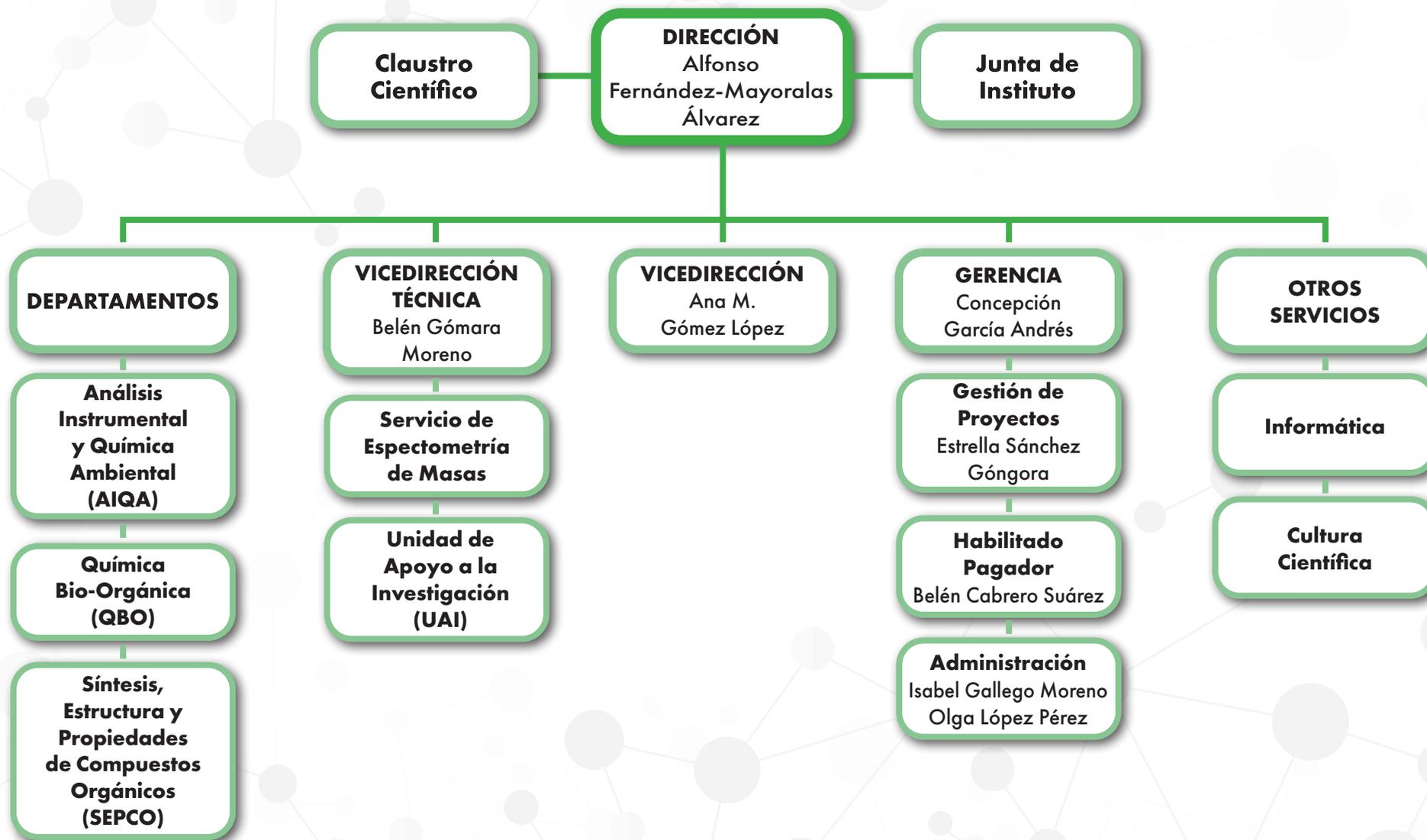
Alfonso Fernández-Mayoralas
Madrid, mayo de 2021

IQOG

2. ORGANIZACIÓN



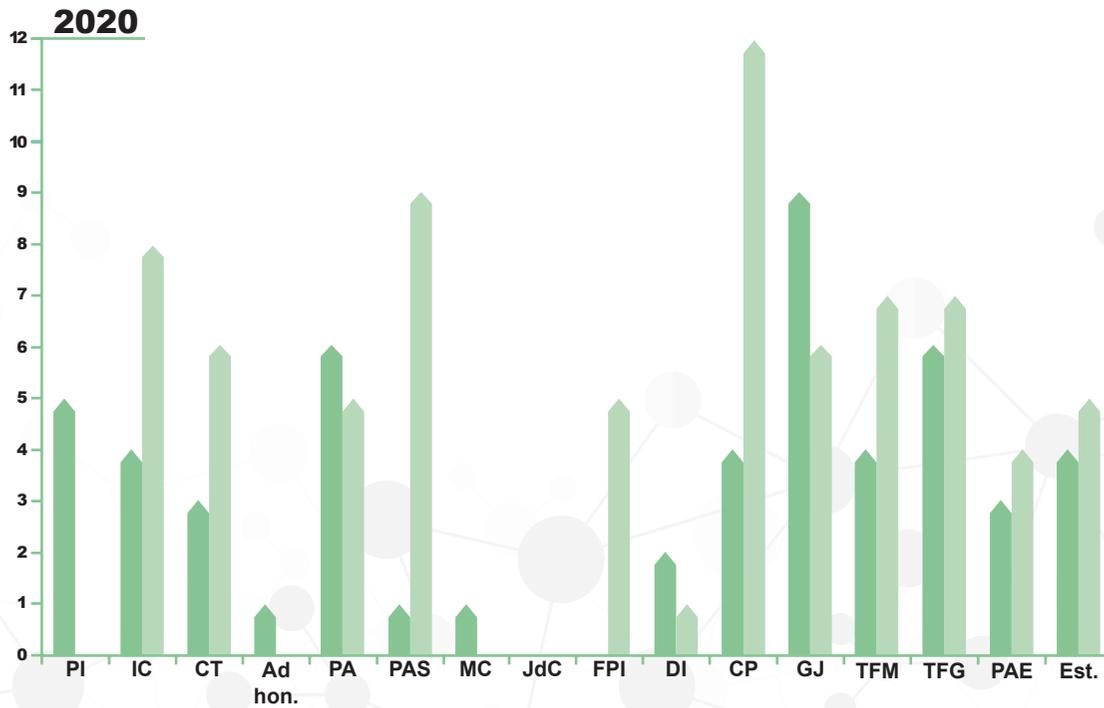
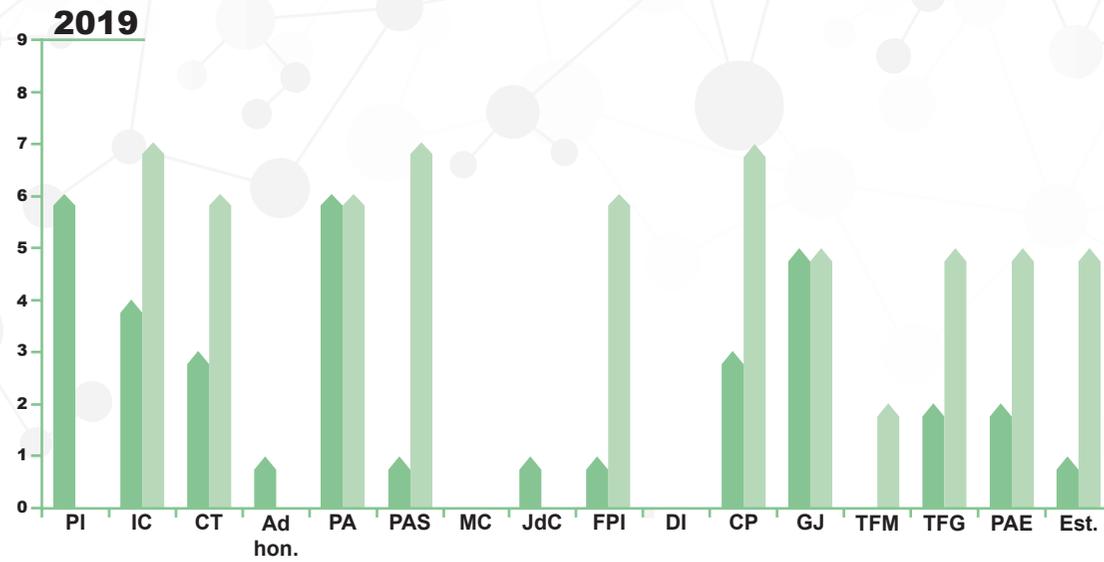
Estructura



Recursos Humanos

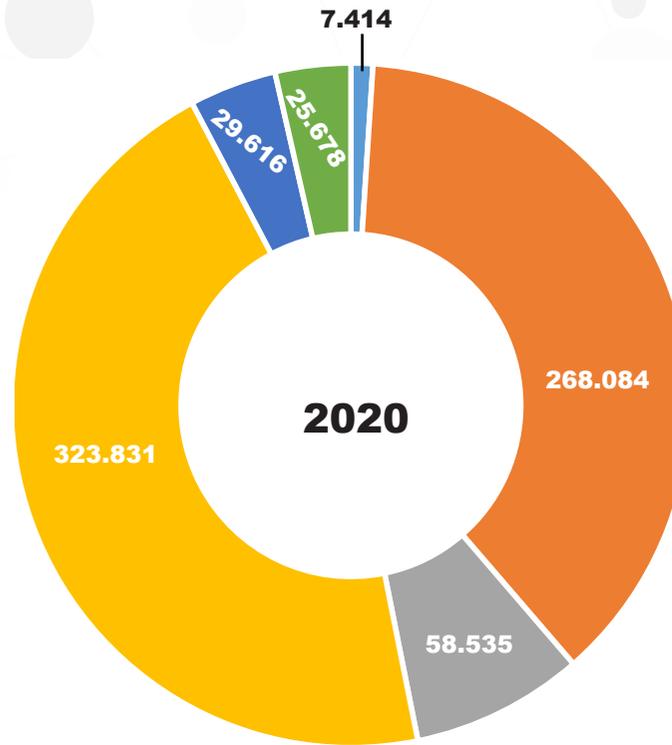
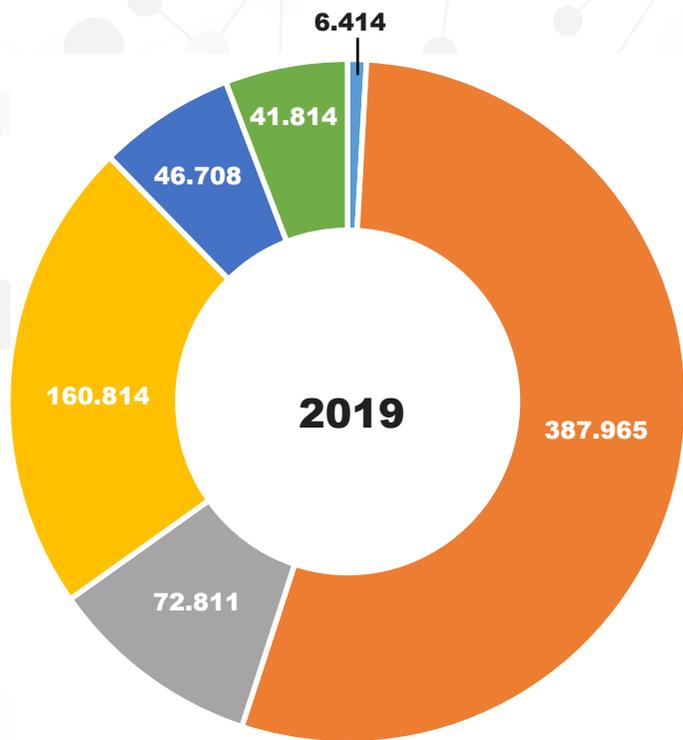
PERSONAL	2019		2020	
	Hombres	Mujeres	Hombres	Mujeres
Profesores de Investigación (PI)	6	—	5	—
Investigadores Científicos (IC)	4	7	4	8
Científicos Titulares (CT)	3	6	3	6
Doctor Vinculado <i>Ad honorem</i> (Ad hon.)	1	—	1	—
Personal de Apoyo (PA)	6	6	6	5
Personal Administración y Servicios (PAS)	1	7	1	9
Contratos Marie Curie (MC)	—	—	1	—
Cont. Postdoct Juan de la Cierva (JdC)	1	—	—	—
FPI	1	6	—	5
Doctorado Industrial (DI)	—	—	2	1
Contratados Proyectos (CP)	3	7	4	12
Garantía Juvenil (GJ)	5	5	9	6
TFM	—	2	4	7
TFG	2	5	6	7
Prácticas Académicas Externas (PAE)	2	5	3	4
Estancias	1	5	4	5
Total	36	61	53	75

■ Hombres
■ Mujeres



Recursos Económicos

CONCEPTO	2019	2020
Presupuesto ordinario	6.414€	7.414€
Proyectos	387.965€	268.084€
Contratos y convenios	72.811€	58.535€
Contratos de personal	160.814€	323.831€
Costes indirectos IQOG	46.708€	29.616€
Costes indirectos CENQUIOR	41.814€	25.678€
TOTAL	716.529€	713.160€



- Presupuesto ordinario
- Contratos y convenios
- Costes indirectos IQOG
- Proyectos
- Contratos de personal
- Costes indirectos CENQUIOR





3. ACTIVIDAD CIENTÍFICA

Dpto. de Análisis Instrumental y Química ambiental (AIQA)

Grupo de Análisis Instrumental en Medio Ambiente, Alimentos y Salud (AIMAS)



El grupo desarrolla técnicas y metodologías analíticas innovadoras, fundamentalmente de separación (cromatografía de gases y líquidos de alta resolución y electroforesis capilar), para su aplicación en estudios dentro de los campos medioambiental, alimentario y de salud.

Su investigación comprende los siguientes aspectos:

- Extracción y análisis de compuestos bioactivos y volátiles en alimentos, plantas y suelos.
- Cromatografía de líquidos, electroforesis en capilares y en microchips, e inmuno-reconocimiento para el estudio de proteínas de interés farmacéutico, clínico y alimentario.
- Determinación de contaminantes orgánicos persistentes, bioacumulables y tóxicos y estudio de su comportamiento en el medio ambiente y el hombre.

Personal investigador

José Carlos Díez Masa
Mario A. Fernández Martín
Mercedes de Frutos Gómez
Belén Gómara Moreno
Begoña Jiménez Luque
Lourdes Ramos Rivero
María Luz Sanz Murias
Ana Cristina Soria Monzón

Postdoctorales

Juan Muñoz Arnanz
José Luis Roscales García
Ana Isabel Sánchez Blanco

Personal de apoyo

Laura Herrero Collantes
Ángel de la Puerta García-Barroso
Ana Isabel Ruiz Matute

Personal en formación

Alice Bartalini
Jorge Bintanel Cenis
Carlos Fernández Ramos
Samuel Garrido Vidales
Laura Gómez Ruiz
Ignacio Jiménez Amezcua
Inmaculada Luque Jurado

Andrea Martín Ortiz
Adal Mena García
Estela Nogales Valenciano
Sergio Rivas Blas
María Begoña Ros Rodríguez
Belen Ruiz Suarez de Puga
Raquel Saez Brox

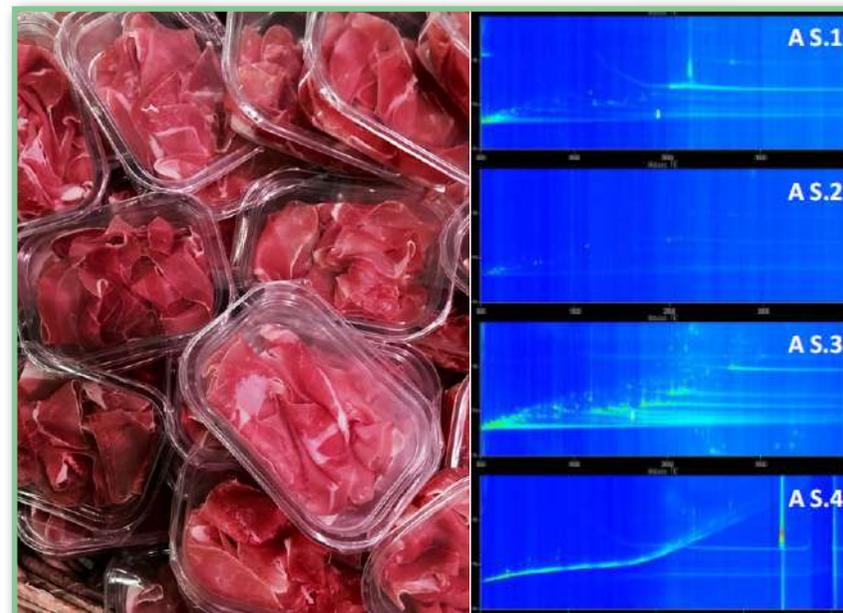
HITOS DESTACADOS

Caracterización de los compuestos volátiles y semi-volátiles con capacidad para migrar desde recipientes de polipropileno empleados para la conservación de alimentos

Los recipientes de plástico destinados a contener alimentos (comúnmente conocidos como táperes) tienen como objetivo protegerlos frente a posibles contaminantes externos. Sin embargo, esos materiales no son completamente inertes. Durante su síntesis, aparte de los correspondientes monómeros, suelen añadirse distintos reactivos, como aditivos, estabilizadores, plastificantes o agentes entrecruzantes, con el fin de mejorar las propiedades y durabilidad del material final. La Unión Europea (EU) establece más de 150 sustancias que pueden ser empleadas para este fin (EU/No10/2011), así como las cantidades máximas que de las mismas pueden migrar a los alimentos desde el envase. Existen, no obstante, otras sustancias, como impurezas añadidas de manera no intencionada (NIAS), productos o intermedios de reacción del proceso de síntesis, u otras sustancias formadas durante los tratamientos posteriores de esterilización del plástico, que también pueden estar presentes en los recipientes comercializados. En general, estas sustancias no están reguladas, pero dada la toxicidad de muchas de ellas, su identificación y regulación es primordial.

En este estudio, en el que se simuló condiciones de uso prolongado de táperes de distintos proveedores, se identificaron un total de 109 compuestos volátiles y semi-volátiles con capacidad para migrar desde los recipientes hacia los simulantes alimentarios evaluados. El proceso y volumen de la migración de estos compuestos dependía no sólo del proveedor (es decir, de los procesos de producción y esterilización empleados), sino de las características del alimento conservado en el recipiente, como su contenido acuoso, lipídico o acidez. Para el desarrollo del estudio se empleó una estrategia no-orientada y una técnica analítica tridimensional, la cromatografía de gases completa en dos dimensiones acoplada a espectrometría de

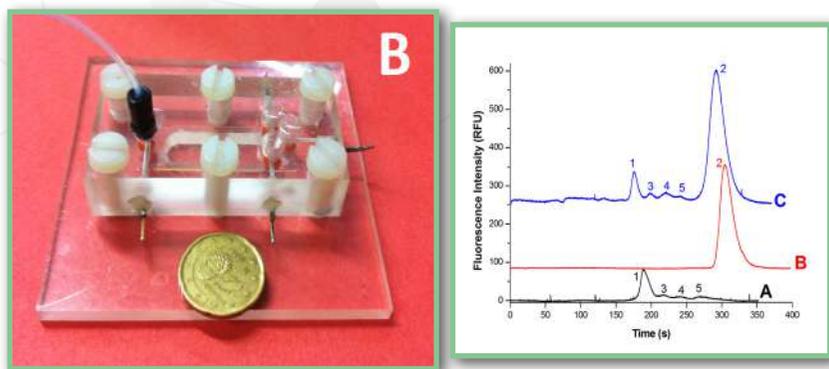
masas de tiempo de vuelo (GC×GC-ToF MS). Los datos obtenidos, que incluían diferentes compuestos no descritos con anterioridad, se organizaron en una base de datos cuyo objetivo era facilitar el trabajo de identificación de todas estas sustancias químicas a otros investigadores involucrados en este tipo de estudios.



Separación electroforética en microchips con detección por fluorescencia inducida por láser (LIF) de glicoproteínas glicosiladas y desglicosiladas

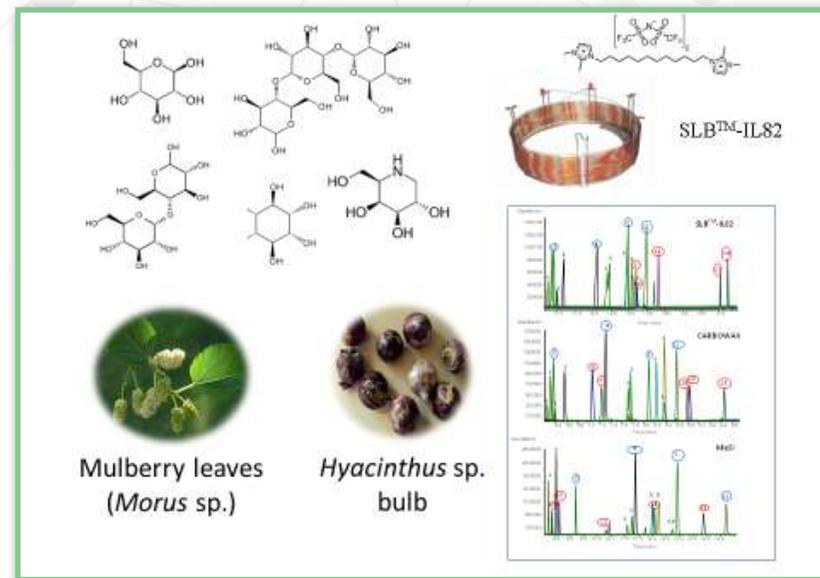
Se ha logrado separar en menos de 6 minutos una proteína glicosilada (pico en la figura), de la proteína sin glicosilar (pico 1) y de las formas parcialmente glicosiladas de la proteína (picos 3, 4 y 5). Este análisis ha sido posible al realizar la separación electroforética en un microchip empleando para ello el dispositivo (holder) diseñado y construido en el laboratorio. El marcado fluorescente de la proteína posibilita la detección mediante fluorescencia inducida por láser (LIF).

La glicosilación es una de las principales modificaciones postraduccionales (PTMs) de las proteínas. Esta PTM está relacionada con diferentes enfermedades, especialmente diversos cánceres. Por otra parte, en las glicoproteínas terapéuticas producidas mediante técnicas de ingeniería genética, la glicosilación está reconocida como un Atributo Crítico de la Calidad (CQA), que debe ser rigurosamente controlado. Por tanto, este hito es relevante para proteínas biomarcadoras de enfermedades (como la AGP mostrada en la figura), así como para biofármacos.



Nueva aplicación de las columnas capilares para Cromatografía de Gases basadas en líquidos iónicos

En este estudio, realizado en colaboración con investigadores del Instituto de Química Física Rocasolano, se evaluó la utilidad de cinco columnas con fases estacionarias basadas en líquidos iónicos (IL), proporcionadas por la empresa Sigma-Aldrich (grupo Merck), para el análisis de carbohidratos de bajo peso molecular (mono-, di- y trisacáridos, inositoles e iminoazúcares). Entre las columnas IL empleadas, la SLB™-IL82 permitió la elución de todos los carbohidratos estudiados, ofreciendo una selectividad distinta a la proporcionada por las columnas de fases estacionarias convencionales. Esta columna fue utilizada con éxito para separar mezclas complejas de carbohidratos en extractos de jacinto y morera, resultando una interesante alternativa a las columnas utilizadas habitualmente para el análisis de estos compuestos.

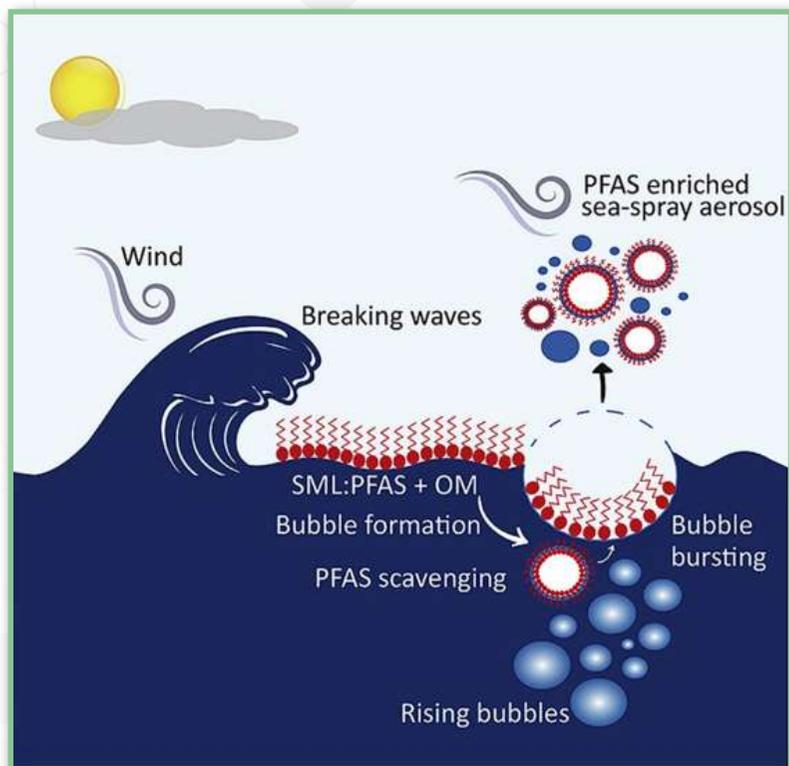


Presencia de sustancias poly- y perfluoroalquiladas (PFAS) en agua, microcapa y aerosoles del océano Antártico

Las sustancias perfluoroalquiladas son un grupo muy diverso de sustancias con aplicaciones industriales y comúnmente empleadas en productos de consumo debido a su alta estabilidad química y propiedades tensoactivas. Son usados, por ejemplo, en componentes electrónicos o, debido a su capacidad para repeler el agua y la grasa, en la industria textil o envasado de alimentos. Sin embargo, muchos de estos compuestos han sido declarados como tóxicos en las redes alimentarias terrestres y acuáticas e incluidos recientemente en el Convenio de Estocolmo en la lista de Contaminantes Orgánicos Persistentes a eliminar o cuyo uso y producción ha de minimizarse.

La publicación de este estudio (Enrichment of perfluoroalkyl substances in the sea-surface microlayer and sea-spray aerosols in the Southern Ocean) supone el primer trabajo que mide la presencia de estas sustancias simultáneamente en agua de mar, la microcapa de la superficie del mar y los aerosoles marinos. De esta forma,

se ha podido estudiar la dinámica de estos contaminantes entre distintos compartimentos del ecosistema marino y así avanzar en nuestro conocimiento sobre su dinámica y transporte hasta regiones remotas como la Antártida. Se concluye que la transferencia de sustancias perfluoroalquiladas desde el océano a la atmósfera mediante la formación de aerosoles marinos (pequeñas burbujas que se forman cuando el viento incide sobre el océano produciendo olas e incorporándose a las masas de aire), puede ser relevante para el transporte atmosférico a larga distancia de estas sustancias en la Antártida y el océano global.



PUBLICACIONES DESTACADAS

Barrios-Romero, M.M., Crevillén, A.G., Puerta, A., de Frutos, M., Diez-Masa, J.C. Monitorization of α 1-Acid Glycoprotein Deglycosylation using SU-8 Microchips Electrophoresis with LIF Detection (2019) *Methods in Molecular Biology*, 1972, pp 25-39.

DOI: 10.1007/978-1-4939-9213-3_3

Bartalini, A., Muñoz-Arnanz, J., Marsili, L., Fossi, C., Jiménez, B. Evaluation of PCDD/Fs, dioxin-like PCBs and PBDEs in sperm whales from the Mediterranean Sea. (2019) *Science of the Total Environment*, 653, pp 1417-1425.

DOI: 10.1016/j.scitotenv.2018.10.436

Carrero-Carralero, C., Escobar-Arnanz, J., Ros, M., Jimenez-Falcao, S., Sanz, M.L., Ramos L. An untargeted evaluation of the volatile and semi-volatile compounds migrating into food simulants from polypropylene food containers by comprehensive two-dimensional gas chromatography–time-off light mass spectrometry. (2019) *Talanta*, 195, pp. 800–806.

DOI: 10.1016/j.talanta.2018.12.011

Casal, P., Casas, G., Vila-Costa, M., Cabrerizo, A., Pizarro, M., Jiménez, B., Dachs, J. Snow Amplification of Persistent Organic Pollutants at Coastal Antarctica. (2019) *Environmental Science and Technology*, 53 (15), pp. 8872-8882.

DOI: 10.1021/acs.est.9b03006

Farina-Gomez, N., Navarro-Calderon, D., Puerta, A., Gonzalez, M., Diez-Masa, J.C., de Frutos, M. Capillary electrophoresis analysis of prostate specific antigen (PSA) (2019) *Methods in Molecular Biology*, 1972, pp 221-234.

DOI: 10.1007/978-1-4939-9213-3_16.3

Fernández-Cervantes, M., Pérez-Alonso, M.J., Blanco-Salas, J., Soria, A.C., Ruiz-Téllez, T. Analysis of the essential oils of *Chamaemelum fuscatum* (Brot.) Vasc. from Spain as a contribution

to reinforce its ethnobotanical use. (2019) *Forests*, 10, pp. 539.

DOI: 10.3390/f10070539

González-Gaya, B., Fernández-Castro, B., Mouriño-Carballido, B., Casal, P., Jurado, E., Dachs, J., Jiménez, B. Vertical transport and sinks of perfluoroalkyl substances in the global open ocean. (2019) *Environ. Sci.: Processes Impacts*, 21, pp. 1957-1969.

DOI: 10.1039/C9EM00266A

González-Gaya, B., Martínez, A., Vila-Costa, M., Casal, P., Lundin, D., Cerro, E., Vidal, M., Mompean, C., Bode, A., Jiménez, B., Dachs, J. Biodegradation as an important sink of aromatic hydrocarbons in the oceans. (2019) *Nature Geoscience*, 12, pp. 119-125.

DOI: 10.1038/s41561-018-0285-3

Hernáiz-Izquierdo, M., Galindo-Iranzo, P., García-Armada, M.P., Saiz-López, A., Gómara, B., Quintanilla-López, J.E., Lebrón-Aguilar, R. Direct quantification of inorganic iodine in seawater by mixed-mode liquid chromatography-electrospray ionization-mass spectrometry. (2019) *Journal of Chromatography A*, 1588, pp. 99-107.

DOI: 10.1016/j.chroma.2018.12.046

Martín-Ortíz, A., Moreno, F.J., Ruiz-Matute, A.I., Sanz, M.L. Selective biotechnological fractionation of goat milk carbohydrates. (2019) *International Dairy Journal*, 94, pp. 38-45.

DOI: 10.1016/j.idairyj.2019.02.012

Martín-Ortíz, A., Ruiz-Matute, A.I., Sanz, M.L., Moreno, F.J., Herrero, M. Separation of di- and trisaccharide mixtures by comprehensive two-dimensional liquid chromatography. Application to prebiotic oligosaccharides. (2019) *Analytica Chimica Acta*, 1060, pp. 125-132.

DOI: 10.1016/j.aca.2019.01.040

Megías-Pérez, R., Ruiz-Matute, A.I., Corno, M., Kuhner, N. Analysis of minor low molecular weight carbohydrates of cocoa beans by

chromatographic techniques coupled to mass spectrometry. (2019) *Journal of Chromatography A*, 1584, pp. 135-143.

DOI: 10.1016/j.chroma.2018.11.033

Mena-García, A., Ruiz-Matute, A.I., Soria, A.C., Sanz, M.L. Green techniques for extraction of bioactive carbohydrates. (2019) *Trends in Analytical Chemistry*, 119, pp. 115612-115622.

DOI: doi.org/10.1016/j.trac.2019.07.023

Muñoz-Arnanz, J., Chirife, A.D., Vernazzani, B.G., Cabrera, E., Sironi, M., Millán, J. Jiménez, B. First assessment of persistent organic pollutant contamination in blubber of Chilean blue whales from Isla de Chiloé, Southern Chile. (2019) *Science of the Total Environment*, 650, pp 1521-1528.

DOI: 10.1016/j.scitotenv.2018.09.070

Ramos, L. The use of new tailored and engineered materials for matrix solid phase dispersion. (2019) *TRAC Trends in Analytical Chemistry*, 118, pp. 751-758.

DOI: 10.1016/j.trac.2019.07.006

Rodríguez-Sánchez, S., Soria, A.C., Lebrón-Aguilar, R., Sanz, M.L., Ruiz-Matute, A.I. Evaluation of different ionic liquid stationary phases for the analysis of carbohydrates by gas chromatography-mass spectrometry. (2019) *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 411, pp. 7461-7472.

DOI: 10.1007/s00216-019-02118-0

Roscales J.L., Vicente A., Ryan P.G., González-Solís J., Jiménez B. Spatial and Interspecies Heterogeneity in Concentrations of Perfluoroalkyl Substances (PFASs) in Seabirds of the Southern Ocean. (2019) *Environmental Science and Technology*, 53 (16), pp. 9855-9865.

DOI: 10.1021/acs.est.9b02677

Baini, M., Panti, C., Fossi, M.C., Tepsich, P., Jiménez, B., Coomber, F., Moulins, A., Bartalini, A., Muñoz-Arnanz, J., Rosso, M. (2020) First assessment of POPs and cytochrome P450 expression in

Cuvier's beaked whales (*Ziphius cavirostris*) skin biopsies from the Mediterranean Sea. *Scientific Reports* 10(1), pp. 21891.

DOI: 10.1038/s41598-020-78962-3

Bartalini, A., Muñoz-Arnanz, J., Bains, M., Panti, C., Galli, M., Giani, D., Fossi, M.C., Jiménez, B. (2020). Relevance of current PCB concentrations in edible fish species from the Mediterranean Sea. *STOTEN* 737, pp 139520.

DOI: 10.1016/j.scitotenv.2020.139520

Capanni, F., Muñoz-Arnanz, J., Marsili, L., Fossi, M.C., Jiménez, B. (2020) Assessment of PCDD/Fs, dioxin-like PCBs and PBDEs in Mediterranean striped dolphins. *Marine Pollution Bulletin* 156, pp. 111207.

DOI: 10.1016/j.marpolbul.2020.111207

Casas, G., Martínez-Varela, A., Roscales, J.L., Pizarro, M., Vila-Costa, M., Dachs, J., Jiménez, B. (2020) Enrichment of Perfluoroalkyl Substances in the Surface Microlayer and Sea-Spray Aerosols in the Southern Ocean. *Environmental Pollution*. 267, pp 115512.

DOI: 10.1016/j.envpol.2020.115512

Cerro-Gálvez, E., Roscales, J.L., Jiménez, B., Sala, M.M., Dachs, J., Vila, M. Microbial responses to perfluoroalkyl substances and perfluorooctanesulfonate (PFOS) desulfurization in the Antarctic marine environment. (2020) *Water Research*, 171, pp 115434.

DOI: 10.1016/j.watres.2019.115434

Corsolini, S., Metzdorff, A., Baroni, D., Roscales, J.L., Jiménez, B., Cerro-Gálvez, E., Dachs, J., Galbán-Malagón, C., Audy, O., Kohoutek, J., Příbylova, P., Poblete-Morales, M., Avendaño-Herrera, R., Bergami, E., Pozo, K. (2020) Legacy and novel flame retardants from indoor dust in Antarctica: sources and human exposure. *Environmental Research*.

DOI: 10.1016/j.envres.2020.110344

Escobar-Arnanz, J., Sanz, M.L., Ros, M., Sanz, J., Ramos, L.

Potential of topological descriptors to model the retention of polychlorinated biphenyls in different gas chromatography stationary phases, including ionic liquid-based columns. (2020) *Journal of Chromatography A*, 1616, pp. 460844.

DOI: 10.1016/j.chroma.2019.460844

Martín-Ortiz, A., Carrero-Carralero, C., Hernández-Hernández, O., Lebrón-Aguilar, R., Moreno, F.J., Sanz, M.L., Ruiz-Matute A.I. Advances in structure elucidation of low molecular weight carbohydrates by liquid chromatography-multiple-stage mass spectrometry analysis. (2020) *Journal of Chromatography A*, 1612, pp. 460664-460673.

DOI: 10.1016/j.chroma.2019.460664

Megías-Pérez, R., Hahn, C., Ruiz-Matute, A.I., Behrends, B., Albach, D.C., Kuhnert, N. Changes in low molecular weight carbohydrates in kale during development and acclimation to cold temperatures determined by chromatographic techniques coupled to mass spectrometry. (2020) *Food Research International*, 127, pp. 108727-108735.

DOI: doi.org/10.1016/j.foodres.2019.108727

Mena-García, A., Rodríguez-Sánchez, S., Ruiz-Matute, A.I., Sanz, M.L. Exploitation of artichoke byproducts to obtain bioactive extracts enriched in inositols and caffeoylquinic acids by Microwave Assisted Extraction. (2020) *Journal of Chromatography A*, 1613, pp. 460703-460710.

DOI: 10.1016/j.chroma.2019.460703

Mukhopadhyay, M., Sampath, S., Muñoz-Arnanz, J., Jiménez, B., Chakraborty, P. (2020) Plasticizers and bisphenol A in Adyar and Cooum riverine sediments, India: Occurrences, sources and risk assessment. *Environmental Geochemistry and Health*, 42, pp 2789–2802.

DOI: 10.1007/s10653-020-00516-3

Quintanilla-López, J.E., Galindo-Iranzo, P., Lebrón-Aguilar, R.,

Gómara, B. Congener-specific determination of hydroxylated polychlorinated biphenyls by polar-embedded reversed-phase liquid chromatography-tandem mass spectrometry. (2020) *Journal of Chromatography A*, 1626, pp. 461353.

DOI: 10.1016/j.chroma.2020.461353

Saini, A., Harner, T., Chinnadhurai, T., Schuster, J., Yates, A., Sweetman, A.J., Aristizabal Zuluaga, B.H., Jiménez, B., Manzano, C.A., Gaga, E.O., Stevenson, G., Falandysz, J., Ma, J., Miglioranza, K., Kannan, K., Tominaga, M.Y., Jariyasopit, N., Rojas Roa, N.Y., Amador, O., Sinha, R., Alani, R., Suresh, R., Nishino, T., Shoeib, T. (2020) GAPS-Megacities: A new global platform for investigating persistent organic pollutants and chemicals of emerging concern in urban air. *Environmental Pollution*, 267, pp. 115416.

DOI: 10.1016/j.envpol.2020.115416

Zuluaga, A.M., Mena-García, A., Chito, D.M., Rada-Mendoza, M., Sanz, M.L., Ruiz-Matute, A.I. Development of a Microwave-Assisted Extraction method for the recovery of bioactive inositols from lettuce (*Lactuca sativa*) byproducts. (2020) *Electrophoresis*, 41, pp. 1804-1811.

DOI: 10.1002/elps.202000201

Zuluaga, A.M., Mena-García, A., Soria, A.C., Rada-Mendoza, M.P., Chito, D.M., Ruiz-Matute, A.I., Sanz, M.L. Microwave-assisted extraction of inositols for the valorization of legume by-products. (2020) *LWT - Food Science and Technology*, 133, pp. 109971.

DOI: 10.1016/j.lwt.2020.109971

PARTICIPACIONES DESTACADAS EN CONGRESOS

Conferencias invitadas

Non-targeted characterization of the aromatic fraction in pyrogenic samples by GCxGC-ToF MS. L. Ramos. Conferencia invitada en el

“GCxGC Symposium and Workshop”. Berlín. Alemania, 16-18 de septiembre de 2019.

Relevant glycoproteins in health and food: cooperation of liquid chromatography and capillary electrophoresis for analysis of their isoforms. M. de Frutos, A. Puerta, S. Lopez-Duque, L. Gomez-Ruiz, R. Saez-Brox. Conferencia invitada en el “7th Workshop CSIC-CNRS”. Madrid. España. 22-23 de julio de 2019.

La Antártida como centinela de la contaminación global. B. Jiménez. Conferencia invitada en el “Primer seminario científico del Trineo de Viento”. MNCN, CSIC. Madrid. 12 de junio de 2019.

Contaminantes Orgánicos Persistentes en la Antártida: situación actual y futura. B. Jiménez. Conferencia invitada en la “Jornada Científica: Impactos emergentes de la presencia humana en la Antártida”. Universidad Rey Juan Carlos, Campus de Móstoles, Madrid. 7 de octubre de 2019.

Vigilancia de contaminantes orgánicos persistentes y otras sustancias en algunas matrices y zonas de interés. B. Jiménez. Conferencia invitada en las “XV Jornadas de Investigación en la Red de Parques Nacionales. La investigación en el Parque Nacional de Doñana en su 50 aniversario. OAPN”. Matalascañas, Huelva. 29-30 de noviembre de 2019.

Showcasing the suitability of the Agilent 7010B GC-MS/MS for Environmental Pollutant Analysis. J. Muñoz-Arnanz. Conferencia invitada en “International Food & Environmental Analysis Summit”. Toledo, España. 4 de abril de 2019.

Electroforesis capilar de biofármacos. M. de Frutos, A. Puerta, J.C. Díez-Masa. Conferencia invitada en las “II Jornadas de Bioanálisis Instrumental de Medicamentos Biológicos”. Formato virtual. 15-17 de diciembre de 2020.

Espectrometría de Masas. Fundamentos. A. Puerta. Conferencia invitada en las II Jornadas de Bioanálisis Instrumental de Medicamentos Biológicos. Formato virtual. 15-17 de diciembre de 2020.

Análisis de medicamentos biológicos por CE-MS. A. Puerta. Conferencia invitada en las II Jornadas de Bioanálisis Instrumental de Medicamentos Biológicos. Formato virtual. 15-17 de diciembre de 2020.

Otras participaciones destacadas en congresos, seminarios y jornadas científicas

Organizadores:

- 7th Workshop CSIC-CNRS. 2019.
- II Jornadas de Bioanálisis Instrumental de Medicamentos Biológicos. 2020.

Miembros de Comités Científicos:

- 7th Workshop CSIC-CNRS. 2019.
- 25th Latin-American Symposium on Biotechnology, Biomedical, Biopharmaceutical, and Industrial Applications of Capillary Electrophoresis and Microchip Technology LACE 2019. 2019.
- 39th International Symposium on Halogenated Persistent Organic Pollutants (POPs), Dioxin 2019. 2019.
- 1st Iberian Meeting in Separation Sciences & Mass Spectrometry. Santiago de Compostela (España). 8-11 de octubre de 2019.
- II Jornadas de Bioanálisis Instrumental de Medicamentos Biológicos. Formato virtual. 15-17 de diciembre de 2020.

Miembros de Comités Organizadores:

- 7th Workshop CSIC-CNRS. Madrid (España). 2019.
- II Jornadas de Bioanálisis Instrumental de Medicamentos Biológicos. 2020.

Miembros de jurado de concesión de premios:

- 25th Latin-American Symposium on Biotechnology, Biomedical, Biopharmaceutical, and Industrial Applications of Capillary Electrophoresis and Microchip Technology LACE 2019. 2019.

Moderadores de sesiones (chairperson):

- 7th Workshop CSIC-CNRS. 2019.
- 39th International Symposium on Halogenated Persistent Organic Pollutants (POPs), Dioxin 2019. 2019.
- 1st Iberian Meeting in Separation Sciences & Mass Spectrometry. 2019.
- II Jornadas de Bioanálisis Instrumental de Medicamentos Biológicos. 2020.
- SETAC Europe 30th Annual Meeting. 2020.

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

Desarrollo de una estrategia analítica integradora para la detección rápida de fraudes de calidad y seguridad en complementos alimenticios derivados de plantas para el control del sobrepeso

Referencia: AGL2016-80475-R.

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad.

Entidades participantes: IQOG-CSIC.

Duración: diciembre 2016 – diciembre 2019 (prorrogado hasta diciembre 2020).

Investigador/es principal/es: Ana Cristina Soria y M^ª Luz Sanz.

Obtención de compuestos bioactivos mediante técnicas avanzadas de extracción a partir de legumbres, soja verde y alfalfa

Referencia: 4806.

Entidad financiadora: Universidad del Cauca (Colombia). X convocatoria programa de apoyo a proyectos de investigación, desarrollo e innovación en el marco de maestrías, doctorados y especialidades médico quirúrgicas.

Duración: 2018-2019.

Investigador/es principal/es: Maite.P. Rada Mendoza.

BLUESHARKER – BLUE. SHark as biomonitor of Atlantic waters through an integrated biomarker Assessment

Referencia: 02/SAICT/2017.

Entidad financiadora: Fundação para a Ciência e Tecnologia. Projetos de Desenvolvimento e Implementação de Infraestruturas de Investigação inseridas no RNIE. Programa Operacional Regional do Centro.

Entidades participantes: Instituto Politécnico De Leiria (Peniche – Portugal); CSIC (IQOG).

Duración: 2018-2020.

Investigador Principal del Proyecto: Sara Calçada Novais.

Transporte y biogeoquímica de contaminantes emergentes y materia orgánica antropogénica en el océano austral. AN TOM

Referencia: PGC2018-096612-B-I00.

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades.

Entidades participantes: CSIC (IDAEA e IQOG).

Duración: 2019-2021.

Investigador Principal del Proyecto: Jordi Dachs Marginet.

Co-IP: Begoña Jiménez.

Estrategias integradas para la mejora de la calidad, la seguridad y la funcionalidad de los alimentos: hacia una alimentación saludable (AVANSECAL-II-CM)

Referencia: S2018/BAA-4393

Entidad financiadora: Programas de Actividades de I+D entre grupos de investigación de la CM en Tecnologías 2018.

Entidades participantes: IQOG-CSIC, ICTAN-CSIC, UAH, UCM, URJC.

Duración: enero 2019 – diciembre 2022.

Investigador/es principal/es: María Luisa Marina (UAH, coordinadora). Belén Gómara (IP del Grupo CSIC-AI).

Procesos analíticos más sostenibles mediante el uso de disolventes modulables (Greening the Analytical Process with tunable SOLVENTs, GAPSOLVE)

Referencia: PID2019-106405GB-I00/AEI/10.13039/501100011033.

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades.

Entidades participantes: IQOG e IQFR.

Duración: junio 2020 – mayo 2022.

Investigador/es principal/es: Lourdes Ramos y Belén Gómara.

INVESTIGACIÓN CONTRATADA PÚBLICA

Análisis de Dioxinas en muestras de aire

Empresa/administración financiadora: Biodonostia.

Centro de ejecución: IQOG (CSIC).

Duración 2017-2019.

Investigador responsable (CSIC): Begoña Jiménez.

Acuerdo de encomienda de gestión entre la dirección general de calidad ambiental y medio natural y el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) para el desarrollo de actividades sobre compuestos bromados, PFOS y otras nuevas sustancias consideradas en el convenio de Estocolmo, el Reglamento (CE) N° 850/2004 y el Plan Nacional sobre Contaminantes Orgánicos Persistentes (COP)

Ref. 17CAES004.

Empresa/administración financiadora: MITERD.

Centro de ejecución: IQOG (CSIC).

Duración: 2017-2020.

Investigador responsable (CSIC): Begoña Jiménez.

Análisis de Dioxinas, Furanos y DI-PCB en Muestras de Aire en el Área de Exposición de la Planta de Valorización Energética que forma parte del Complejo Medioambiental de Guipúzcoa (PVECMG)

Empresa/administración financiadora: Biodonostia.

Centro de ejecución: IQOG (CSIC).

Duración DESDE: 2020-2023.

Investigador responsable (CSIC): Begoña Jiménez.

CONVENIO CON EMPRESAS

Análisis de enantiómeros por electroforesis capilar en muestras de fármacos

Entidad financiadora: Farmasierra Manufacturing S.L.

Duración: Prórroga anual.

Investigador/es principal/es: José Carlos Díez-Masa (2019) y Ángel de la Puerta (2020).

LIBROS Y CAPÍTULOS

Libros

“*Advances in the determination of xenobiotics in foods*”, en Belén Gómara and María Luisa Marina (eds.), Bentham Science Publishers, 2019. ISBN: 9789811421570. ISBN: 9789811421587.

Capítulos de libro

Sanz, M.L., Ramos, L. “Sample preparation for the gas chromatography analysis of semi-volatiles and non-volatile compounds in food samples” en P.Q. Tranchida (ed.), *Advanced Gas Chromatography in Food Analysis, Cap. 2*. Royal Society of Chemistry, UK. 2019, pp. 38-80. ISBN: 978-1-78801-127-3.

Ramos, L. “Basics and advances in sampling and sample preparation” en Y. Picó (ed.), *Chemical Analysis of Food. Techniques and Applications (2nd edition), Cap. 1*. Elsevier, The Netherlands. 2020, pp 3-32. ISBN: 978-0-12-813266-1.

Ramos, L. “Greening sample preparation: new solvents, new sorbents” en S. Garrigues and M. de la Guardia (eds), *Challenges in Green Analytical Chemistry. Green Chemistry Series, Vol 13 (2nd edition)*. Royal Society of Chemistry, UK. 2020, p. 114-153. ISBN: 978-1-78801-537-0.

VISITANTES NACIONALES Y EXTRANJEROS

Angie J. Bellaizac Riascos.

Período de la estancia: noviembre 2018-abril 2019.

Institución origen: Universidad del Cauca (Dpto. Química).

País: Colombia.

Daniela Alejandra Solarte Sarasati.

Período de la estancia: septiembre 2018-marzo 2019.

Institución origen: Universidad del Cauca (Dpto. Química).

País: Colombia.

Héctor Alonso Miguel.

Período de la estancia: 17 junio-31 julio de 2019.

Institución origen: Universidad Complutense de Madrid (Fac. Biología).

País: España.

David Varela Sánchez.

Período de la estancia: 17 junio-31 julio de 2019.

Institución origen: Universidad Complutense de Madrid (Fac. Biología).

País: España.

Naima Belguedj.

Período de la estancia: diciembre de 2019.

Institución origen: Center for Scientific and Technical Research on Arid and Semi-arid Regions (CRSTRA) of Biskra.

País: Argelia.

Gemma Casas Papell.

Período de la estancia: enero-febrero 2020.

Institución origen: IDAEA-CSIC.

País: España.

Raquel Ruiz Lozano.
Período de la estancia: octubre-diciembre 2020.
Institución origen: Universidad de las Palmas de Gran Canaria.
País: España.

TESIS DOCTORALES

Desarrollo de nuevas metodologías en GC y GCxGC para el análisis de microcontaminantes orgánicos persistentes en muestras biológicas

Juan Escobar Aranz.
Universidad Complutense de Madrid. Departamento de Química Analítica. Facultad de Ciencias Químicas. 2019.
Dirección: Lourdes Ramos.

Estrategias analíticas avanzadas de obtención y análisis de compuestos bioactivos en muestras de origen vegetal

María Jesús García Sarrió.
Universidad Complutense de Madrid. Departamento de Química Analítica. Facultad de Químicas. 2019.
Dirección: M^a Luz Sanz y Ana Cristina Soria.

Desarrollo de nuevas metodologías avanzadas para el análisis de oligosacáridos bioactivos

Andrea Martin Ortiz.
Universidad Complutense de Madrid. Departamento de Química Analítica. Facultad de Químicas. 2019.
Dirección: M^a Luz Sanz, Javier Moreno y Ana Isabel Ruiz-Matute.

Nuevas metodologías analíticas para la determinación de contaminantes organohalogenados legislados y emergentes en alimentos

Ángel García-Bermejo Pérez.
Universidad de Alcalá. Departamento de Química Analítica, Química-Física e Ingeniería Química. Facultad de Ciencias. 2020.
Dirección: Belén Gómara.

TRABAJOS FIN DE MÁSTER

Acoplamiento de columnas de HPLC de afinidad para purificar antígeno específico de próstata (PSA) como etapa previa a su análisis por electroforesis capilar

Sergio López-Duque García-Alcalá.
Universidad Autónoma de Madrid. Departamento de Química Analítica y Análisis Instrumental. Facultad de Ciencias. 2019.
Dirección: Mercedes de Frutos y Ángel de la Puerta.

Prime evidenze sul bioaccumulo di POP in esemplari di poriferi antartici e confronti tra Mare di Ross e Penisola Antartica

Nicolas Pala.
Universita degli Studi di Siena, Dipartimento di Scienze fisiche, della Terra e dell'ambiente, 2019.
Simonetta Corsolini.
Dirección: Begoña Jiménez y José Luis Roscales.

Presencia de Contaminantes Orgánicos Persistentes (COP) en dos especies de pingüino de la Antártida

Patricia Morales Rioja.
Universidad Complutense de Madrid, Facultad de Ciencias Biológicas, 2019.
Dirección: Begoña Jiménez y José Luis Roscales.

Evaluación no orientada de la presencia de contaminantes organohalogenados en muestras bióticas

Jorge Bintanel Cenis.
Universidad Autónoma de Madrid. Departamento de Química Analítica y Análisis Instrumental. Facultad de Ciencias. 2020.
Dirección: Lourdes Ramos y Belén Gómara.

Evaluación del potencial de la cromatografía de gases completa en dos dimensiones para la caracterización de contaminantes organohalogenados en sangre de aves

Lucía Aguilera Núñez.
Universidad Autónoma de Madrid. Departamento de Química Analítica y Análisis Instrumental. Facultad de Ciencias. 2020.
Dirección: Belén Gómara y Lourdes Ramos.

Revisión de técnicas analíticas para la caracterización del aroma del té

Fernando García Moreno.

Universidad Autónoma de Madrid. Facultad de Ciencias. 2020.

Dirección: Jesús E. Quintanilla y Ana Cristina Soria.

Desarrollo de nuevos métodos por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas para la detección de fraudes en complementos alimenticios para el control del sobrepeso (*G. cambogia* y *C. forskohlii*)

Ane Tellería Lezcano.

Universidad Autónoma de Madrid. Facultad de Ciencias. 2020.

Dirección: M^a Luz Sanz y Ana Isabel Ruiz-Matute.

Optimización del proceso de extracción de inositoles asistido por microondas (EAM) a partir de alfalfa (*Medicago sativa L.*)

Alejandra Daniela Solarte Sarasty.

Universidad del Cauca (Colombia). Departamento de Química. 2020.

Directores: Maite P. Rada Mendoza, Ana Cristina Soria, Ana Isabel Ruiz-Matute y M^a Luz Sanz.

TRABAJOS FIN DE GRADO

Determinación de (-)ácido hidroxycítrico (HCA) en complementos alimenticios para el control de sobrepeso basados en tamarindo malabar (*Garcinia cambogia*)

Angie J. Bellaizac Riascos.

Universidad del Cauca (Colombia). Departamento de Química. 2019.

Dirección: Maite P. Rada-Mendoza, Diana M^a Chito, Adal Mena, Ana Cristina Soria, Ana Isabel Ruiz-Matute y M^a Luz Sanz.

Desarrollo de un método por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas para la detección de fraudes en complementos de *Garcinia cambogia* para el control del sobrepeso

Francisco de Borja Ramírez González.

Universidad Rey Juan Carlos, Escuela Superior de Ciencias Experimentales y Tecnología, Ciencia y Tecnología de los Alimentos, 2020.

Dirección: Adal Mena y M^a Luz Sanz.

OTROS TRABAJOS DIRIGIDOS (prácticas externas en empresa, prácticas de formación profesional, etc.)

Estancia de formación sobre técnicas de preparación de muestra y cromatográficas de uso en laboratorios ambientales. Dirección a Samuel Garrido Vidales (Técnico Superior de Laboratorio) en el marco del Programa de Garantía Juvenil de la CM. Consejería de Educación, Juventud y Deporte de la Comunidad de Madrid. 2017-2019. Directora: Lourdes Ramos.

Estancia de formación sobre técnicas de preparación de muestra y cromatográficas de uso en laboratorios ambientales. Dirección a Estela Nogales Valenciano (Técnico Superior de Laboratorio) en el marco del Programa de Garantía Juvenil de la CM. Consejería de Educación, Juventud y Deporte de la Comunidad de Madrid. 2017-2019. Director: Mario Fernández.

Estancia de formación sobre análisis mediante electroforesis capilar de moléculas de alto peso molecular. Dirección a Raquel Saez Brox (Técnico Superior de Laboratorio) en el marco del Programa de Garantía Juvenil de la CM. Consejería de Educación, Juventud y Deporte de la Comunidad de Madrid. 2018-2020. Directores: José Carlos Díez-Masa y Mercedes de Frutos.

Estancia de formación sobre análisis de contaminantes orgánicos persistentes en muestras ambientales. Dirección a Belén Ruiz Suarez de Puga (Ayudante de Investigación) en el marco del

Programa de Garantía Juvenil de la CM. Consejería de Educación, Juventud y Deporte de la Comunidad de Madrid. 2018-2020. Directora: Begoña Jiménez.

Estancia de formación sobre análisis de proteínas relevantes en salud y alimentación. Dirección a Laura Gómez Ruiz (Ayudante de Investigación) en el marco del Programa de Garantía Juvenil de la CM. Consejería de Educación, Juventud y Deporte de la Comunidad de Madrid. 2019-2021. Directora: Mercedes de Frutos.

Estancia de formación sobre técnicas de preparación de muestra y cromatográficas de uso en laboratorios ambientales. Dirección a Carlos Fernández Ramos (Ayudante de Investigación) en el marco del Programa de Garantía Juvenil de la CM. Consejería de Educación e Investigación de la Comunidad de Madrid. 2020-2021. Directora: Lourdes Ramos.

Estancia de formación sobre el desarrollo de estrategias multianalíticas para la autenticación de complementos alimenticios basados en té verde. Dirección a Inmaculada Luque Jurado (Ayudante de Investigación) en el marco del Programa de Garantía Juvenil de la CM. Consejería de Educación e Investigación de la Comunidad de Madrid. 2020-2021. Directora: Ana Cristina Soria.

Estancia de formación sobre análisis de compuestos bioactivos mediante técnicas cromatográficas y espectrométricas para la evaluación de la calidad de complementos alimenticios. Dirección a Ignacio Jiménez Amezcua (Ayudante de Investigación) en el marco del Programa de Garantía Juvenil de la CM. Consejería de Educación e Investigación de la Comunidad de Madrid. 2020-2021. Directora: Ana Isabel Ruiz Matute.

Estancia de formación sobre análisis por SPME GC-MS de muestras de té (*Camellia sinensis*). Dirección a Marcos Fernández Cervantes (Graduado) en el marco del Programa JAE-Intro del CSIC. 2019-2020. Directora: M^a Luz Sanz.

Estancia de formación sobre extracción de compuestos bioactivos a partir de residuos agroalimentarios. Dirección a Adal Mena García / Manuel Ignacio López Martínez (ambos Ayudantes de Investigación) en el marco del Programa de Garantía Juvenil de la CM. Consejería de Educación e Investigación de la Comunidad de Madrid. 2020-2021. Directora: M^a Luz Sanz.

Estancia de formación sobre desarrollo de un método de HPLC-DAD-MS para la evaluación de la calidad de complementos de guaraná (*Paullinia cupana*). Dirección a Belén Gonzalo Martínez correspondiente a las prácticas externas en empresa. Universidad Autónoma de Madrid, Facultad de Ciencias, 2019. Directora: M^a Luz Sanz.

Estancia de formación sobre análisis del ácido hidroxicítrico (HCA) en complementos alimenticios de *G. cambogia* por cromatografía de líquidos con detector de ultravioleta acoplada a espectrometría de masas. Dirección a Francisco de Borja Ramírez González correspondiente a las prácticas externas en empresa. Universidad Rey Juan Carlos, Escuela Superior de Ciencias Experimentales y Tecnología, Ciencia y Tecnología de los Alimentos, 2020. Directora: M^a Luz Sanz.

Estancia de formación sobre química ambiental. Dirección a José Luis Sanjurjo correspondiente al Ciclo formativo de Química Ambiental. IES Virgen de la Paloma. Directora: Begoña Jiménez.

BECA CSIC - JAE INTRO. Patricia Morales Rioja. Septiembre 2019 a febrero 2020.

PREMIOS Y RECONOCIMIENTOS

Desde el curso académico 2013/14 hasta la actualidad, la Dra. Ana Cristina Soria ha sido nombrada "Colaboradora Honorífica de la Univ. Complutense de Madrid (Fac. CC. Biológicas, Dpto. Biología Vegetal I)", por su colaboración en la actividad docente e investigadora de la

Dra. M^a José Pérez Alonso, profesora de este departamento, en el Máster en Biología Vegetal Aplicada.

DIVULGACIÓN CIENTÍFICA

Artículos

Contribución a la revista *Cromatografía y Técnicas Afines (CTA)* de la SECyTA. Estadísticas de funcionamiento de la web de la SECyTA (2019) CTA 40(2) 76-77.

Post “¿Qué son las alertas RASFF?” en la web del programa AVANSECAL-II de la CM (http://www3.uah.es/avansecal_II/que-son-las-alertas-rafss/). 21 de diciembre de 2020.

Ponencias

Participación en dos conferencias del Catálogo de Actividades (Conferencias /Visitas) para Centros de Bachillerato de Excelencia en Madrid impartidas por el personal del CSIC de los cursos académicos 2018-2019. Título de la conferencia (IQOG-1): **“Contaminación química: contaminantes persistentes y emergentes”**. Conferencias impartidas en el IES San Fernando de Madrid (15 de noviembre de 2019) y el IES Lope de Vega de Madrid (28 de noviembre de 2019).

Participación en la COP 25.
Conferencia **“Investigando áreas polares como escenario de cambio climático: PTI POLARCSIC”**.
Ponencia: La Antártida como centinela de la contaminación global.
Ponentes: Begoña Jiménez y Jose Luis Roscales (IQOG-CSIC).
10 diciembre 2019.

Debate sobre los efectos del Cambio Global en las zonas polares, con la participación de B. Jiménez (IQOG-CSIC), J.L. Roscales (IQOG-CSIC), C. Pedrós-Alió (CNB-CSIC), A. de los Ríos (MNCN-CSIC) y A. Pintado (UCM). MNCN, Madrid.

Programa: **IX SCIENCE FAIR**. IES La Senda.
Ponencia: Ciencia polar: exploración antártica y contaminación global.
Ponentes: Begoña Jiménez y José Luis Roscales (IQOG-CSIC).
Centro educativo: IES La Senda, Getafe, Madrid.
3 febrero 2020.

Programa: **Conferencias científicas del CSIC dirigidas al sistema educativo de la Comunidad de Madrid**.
Ponencia: La Contaminación también viaja.
Ponentes: Begoña Jiménez y José Luis Roscales (IQOG-CSIC).
Centro educativo: Centro de Formación Ambiental GE La Chimenea Real Cortijo de San Isidro, Aranjuez, Madrid.
10 febrero 2020.

Sitios en internet

Webmaster de la web secyta.es de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (SECyTA).

<https://www.lavanguardia.com/vida/20201215/6122635/cientificos-espanoles-estudian-llegan-contaminantes-antartida.html>

<https://www.dicat.csic.es/es/noticias-2020/1088-una-expedicion-estudiara-el-transporte-de-contaminantes-de-origen-humano-hacia-el-oceano-austral>

Radio/TV

Intervención de Begoña Jiménez en RNE, en el Programa *A hombros de gigantes*. Y en TVE, en *Informe Semanal* de TVE1.

Intervención de Begoña Jiménez en 30 medios de comunicación (siendo 4 medios televisivos, 6 de radio y 20 en periódico). También en la rueda de prensa ofrecida por el Departamento de Salud del Gobierno Vasco, y participación en la mesa técnica que gestionó la crisis generada por el derrumbe producido en un vertedero en el

pueblo vizcaíno de Zaldibar, en el cual llevó a cabo la investigación sobre la contaminación del aire, su toxicidad y los problemas de salud para la población afectada.

Enlaces a vídeos, audios y fotos de periódicos:

- Cadena Cope - HERRERA EN COPE (TERTULIA).

Entrevista a Begoña Jiménez Luque, investigadora del CSIC, sobre los datos que arrojan las muestras obtenidas en la zona del vertedero de Zaldibar.

<https://s3-eu-west-1.amazonaws.com/kmplus-account-files/1001083/2020/2/19/tAA1or37EOhAR84tRpZjg.mp4>

- Cadena Ser - HOY POR HOY EUSKADI.

Hoy los vecinos de Zaldibar, Ermua o Eibar esperan los resultados del CSIC de las últimas muestras recogidas hace cinco días.

<https://s3-eu-west-1.amazonaws.com/kmplus-account-files/1001083/2020/2/20/n4eB7vBR8kODvTe4d96qRQ.mp4>

- RNE-1 - BESAIDE.

Una investigadora del Consejo Superior de Investigaciones Científicas se va a sumar a la mesa técnica que gestiona la crisis generada por el derrumbe del vertedero de Zaldibar.

<https://s3-eu-west-1.amazonaws.com/kmplus-account-files/1001083/2020/2/17/5ooAGgCkdEG9gVPgREZOxA.mp4>

- ANTENA 3 - ESPEJO PUBLICO.

Entrevista a Begoña Jiménez, investigadora del CSIC, en cuyo laboratorio se detectaron dioxinas que han causado la alarma en la zona del vertedero de Zaldibar.

<https://s3-eu-west-1.amazonaws.com/kmplus-account-files/1001083/2020/2/18/HMQOQ9vJ0KrSxEeEC9MSQ.mp4>

- TVE1 - TELENORTE.

En Zaldibar avanzan los trabajos.

<https://s3-eu-west-1.amazonaws.com/kmplus-account-files/1001083/2020/2/18/QLuRPv9YUKIWJLGTtEMTZA.mp4>

- Noticias de Bizkaia - Deia.



- El Diario Vasco.



- Noticias de Guipuzkoa.



- Imagen de la rueda de prensa del Departamento de Salud.



- Otros enlaces:

- <https://www.irekia.euskadi.eus/es/news/60331>
- https://bideoak2.euskadi.eus/2020/02/18/news_60331/jimenez_medidas_garantistas_es.mp3
- https://bideoak2.euskadi.eus/2020/02/18/news_60331/jimenez_niveles_bajos_es.mp3
- https://bideoak2.euskadi.eus/2020/02/18/news_60331/jimenez_resultados_es.mp3
- <https://www.deia.eus/bizkaia/2020/02/18/interpretacion-corridorio-riesgo-grave/1018717.html>
- <https://maldita.es/maldita-te-explica/2020/02/19/dioxinas-furanos-efectos-salud-que-son-2/>
- <http://atres.red/ajle2>
- <https://www.eitb.eus/es/television/programas/en-jake/videos/detalle/7042239/video-begona-jimenez-csic-mediciones-furanos-dioxinas-aire/>
- <https://www.eitb.eus/es/noticias/sociedad/videos/detalle/7038470/begona-jimenez-csic-efectos-negativos-vecinos-zaldibar/>
- <https://www.irekia.euskadi.eus/es/news/60331>
- <https://www.newtral.es/un-incendio-contaminantes-en-el-aire-y-dos-personas-desaparecidas-que-ha-sucedido-en-el-vertedero-de-zaldibar/20200218/>
- <https://www.naiz.eus/es/actualidad/noticia/20200220/nuevas-mediciones-de-furanos-y-dioxinas>
- <https://www.rtve.es/noticias/20200220/gobierno-vasco-levanta-medidas-preventivas-entorno-del-vertedero-zaldibar/2003174.shtml>
- <http://www.carlosherrera.com/web/noticias1.asp?Id=10002>
- <https://www.elindependiente.com/espana/2020/02/20/levantan-las-recomendaciones-por-dioxinas-en-zaldibar-tras-descender-su-presencia/>
- <https://www.rtve.es/alcanta/videos/informe-semanal/informe-semanal-22-02-20/5520830/>
- <https://www.rtve.es/noticias/20200220/gobierno-vasco-levanta-medidas-preventivas-entorno-del-vertedero-zaldibar/2003174.shtml>
- <https://www.elmundo.es/pais-vasco/2020/02/19/5e4d104b21efa042428b465d.html>
- https://elpais.com/politica/2020/02/18/actualidad/1582049572_023872.html
- <https://www.lavanguardia.com/vida/20200218/473649836286/investigadora-del-csic-ve-exagerada-e-innecesaria-la-alarma-en-zaldibar.html>
- <https://www.europapress.es/euskadi/noticia-levantan-medidas-preventivas-entorno-vertedero-zaldibar-descenso-dioxinas-furanos-20200220175549.html>

- https://www.eldiario.es/politica/Investigadora-CSIC-exagerada-innecesaria-Zaldibar_0_997050762.html
- <https://dotb.eus/dotb-eus-salud-levanta-la-alerta-medioambiental-tras-mejorar-la-calidad-del-aire-en-zaldibar/>
- <https://www.publico.es/sociedad/contaminacion-gobierno-vasco-levanta-medidas-preventivas-vertedero-zaldibar.html>
- <http://www.durangon.com/el-gobierno-vasco-levanta-las-medidas-preventivas-en-el-entorno-del-vertedero-de-zaldibar/>
- <https://www.noticiasdegipuzkoa.eus/actualidad/sociedad/2020/02/19/extinguidos-fuegos-seguiran-vigilancia-seguridad/1014270.html>
- <https://eiberri.eus/eiberri-eus-los-focos-de-los-incendio-se-han-extinguido-pero-hay-un-reten-por-precaucion/>
- https://www.antena3.com/noticias/sociedad/los-tecnicos-no-ven-peligro-para-los-vecinos-proximos-al-vertedero-de-zaldibar_202002185e4c201f0cf224f238c7056e.html

Actividades

Miembro de la Comisión de Selección del Concurso “Elige un Elemento” organizado por la RSEQ-Madrid en colaboración con la Delegación Institucional del CSIC en la Comunidad de Madrid. Noviembre-diciembre de 2019.

Miembro del jurado del Concurso “Tesis en 3 minutos”, organizado por el Programa de Investigación AVANSECAL-II Estrategias integradas para la mejora de la calidad, la seguridad y la funcionalidad de los alimentos: hacia una alimentación saludable, financiado por la Comunidad de Madrid y el Fondo Social Europeo. 1 de diciembre de 2020 (vía telemática).

Comité Editorial de la revista Cromatografía y Técnicas Afines (CTA) de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (SECyTA).

OTROS

Docencia Universitaria

Profesores en:

- Máster en Técnicas Cromatográficas en el sector Químico Farmacéutico de la Universidad de Alcalá (2019 y 2020).
- Curso de Verano “Controlando y mejorando la calidad y la seguridad de los alimentos” de la Universidad de Alcalá (2019).
- Máster en Química Aplicada de la Universidad Autónoma de Madrid (2019 y 2020).
- Máster Universitario en Biología Vegetal Aplicada (Facultad de Biológicas, UCM) (2019 y 2020).
- Máster en Toxicología Ambiental y Evaluación de Riesgos de la Universidad Rey Juan Carlos de Madrid. (2019).
- Curso “Observando los polos: pasado, presente y futuro” de la Universidad Internacional Menéndez Pelayo. (2019).
- Máster en Ciencias Agroambientales y Agroalimentarias de UAM UNED. (2020).

Calidad y certificación de laboratorios

Mantenimiento de la certificación del laboratorio de HPLC-CE bajo la norma ISO9001 para la actividad “Identificación de enantiómeros por electroforesis capilar en fármacos” (2019-2020).

Cursos de especialización

Título: Avances en Cromatografía de Gases acoplada a Espectrometría de Masas. Aplicaciones prácticas.

Dos ediciones: abril y mayo de 2019.

Entidades organizadoras: IQOG (CSIC)-Gabinete de Formación del CSIC. Enmarcado en el programa de Formación Interna del CSIC y

en el Programa AVANSECAL-II S2018/BAA-4393 de la CM.
Número de investigadores del centro involucrados: 6 (coordinación del curso: 3).
Número de alumnos: 12 en abril y 17 en mayo.

Título: Cromatografía de Líquidos acoplada a la Espectrometría de Masas.
Octubre de 2019.
Entidades organizadoras: IQFR (CSIC)-Gabinete de Formación del CSIC. Enmarcado en el programa de Formación Interna del CSIC y en el Programa AVANSECAL-II S2018/BAA-4393 de la CM.
Número de investigadores del centro involucrados: 3.
Número de alumnos: 12.

Título: Prebióticos. Últimos avances en su obtención, análisis y evaluación de la bioactividad.
Septiembre de 2019.
Entidades organizadoras: CIAL (CSIC)-Departamento de Postgrado del CSIC.
Número de investigadores del centro involucrados: 3.
Número de alumnos: 10.

Título: Análisis de compuestos volátiles en alimentos.
Octubre de 2019.
Entidades organizadoras: ICTAN e IQOG (CSIC)-Gabinete de Formación del CSIC.
Número de investigadores del centro involucrados: 3.
Número de alumnos: 12.

Título: Investigación de frontera en biomedicina y salud y nuevas capacitaciones.
Julio de 2019.
Plan de Formación del Profesorado de la CM. Plan de formación líneas prioritarias específicas Año 2019. Profesores de Secundaria y de FP Sanitarias.
Centro de Investigaciones Biológicas, Consejo Superior de Investigaciones Científicas.

Seminarios

Webinar: Exhaustive Characterization of Pyrogenic Environmental Samples using GC×GC-ToF MS. L. Ramos. Conferenciante invitado en la serie de e-Seminars “*The power of GC-ToF MS for food and environmental applications*”. <https://bit.ly/3qokXFI>.

Participación en la elaboración de Libros Blancos de los siguientes Desafíos Científicos en Temáticas estratégicas del CSIC

Temática 3 - GENOME & EPIGENETICS.
3.6 Environmental Genomics and Epigenomics.
3.7 Epigenomics and Life Style.

Temática 4 - CHALLENGES IN BIOMEDICINE AND HEALTH.
4E. Food allergy.
4H. New methods for diagnostic tools and prevention.

Temática 6 - SUSTAINABLE PRIMARY PRODUCTION.
6. Sustainable production in the food industry.
7. Food security.

Temática 7 - GLOBAL CHANGE IMPACTS.
4. Global change at the polar regions.

Temática 13 - OCEANS.
4: Ocean Health.
6. Polar oceans.

Participación en Plataformas Temáticas Interdisciplinares (PTI) del CSIC

- PTI Salud Global.
- PTI Polar.

Otra financiación obtenida en convocatorias competitivas

- Ayudas para la contratación de Personal Investigador predoctoral, Ayudantes de Investigación y Técnicos de Laboratorio financiadas por la Comunidad de Madrid y el FSE a través del programa operativo de empleo juvenil y la iniciativa de empleo juvenil (YEI) en las convocatorias de 2019 y 2020.
- Ayuda para la formalización de un contrato para la formación de investigadores en empresas (Doctorados industriales, Convocatoria 2019, MICINN) junto con la empresa Pharmactive Biotech Products S.L.
Entidad financiadora: MICINN.
Duración: 2020-2023.
- Ayuda para la realización de doctorados industriales en la Comunidad de Madrid (convocatoria 2020).
Empresa: Pharmactive Biotech Products S.L.
Duración: 2021-2023.
- Ayuda para la realización de las II Jornadas de Bioanálisis Instrumental de Medicamentos Biológicos (convocatoria 2019 para actividades en 2020). Entidad financiadora: FGCSIC.

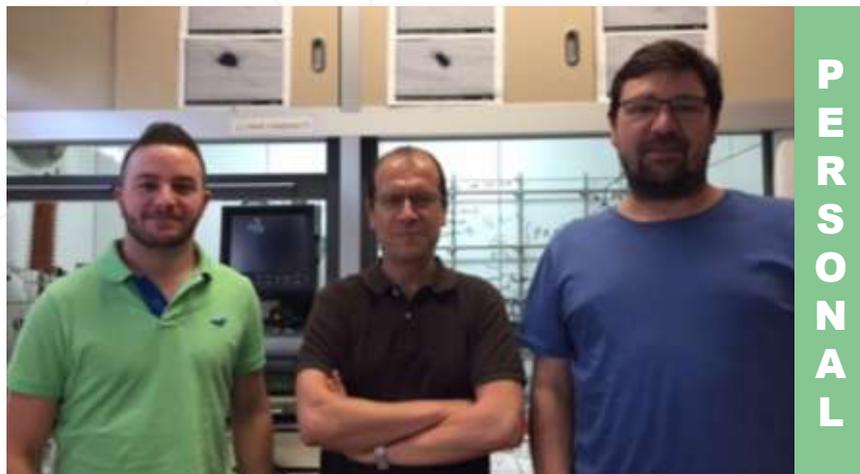
Asesoría científica

Asesoría científica y apoyo en la comunicación pública sobre el impacto que tienen en la Salud los niveles de dioxinas detectados en el captador de Ermua al Departamento de Salud del Gobierno Vasco en la gestión del problema de Salud Pública generado a consecuencia del desprendimiento e incendio del vertedero de Zaldibar. 2020.

Asesoría al Ministerio de Agricultura, Pesca y Alimentación (MAPA) para la recepción de expediente para la Adquisición de instrumentación para el Laboratorio Arbitral Agroalimentario de Madrid. 2020.

Dpto. de Química Bio-Orgánica (QBO)

Grupo de Glicomiméticos y Nanomateriales Híbridos



Personal investigador

José Luis Chiara Romero

Personal en formación

Alberto Blázquez-Moraleja

Larissa Maierhofer

Personal de apoyo

Enrique A. Mann Morales

Sandro Flores Ramírez

C. Estefanía Guamán Collaguazo

Los intereses científicos del grupo de investigación han evolucionado a lo largo de los años desde la síntesis de oligosacáridos bioactivos complejos y de ciclitoles naturales y glicomiméticos carbocíclicos y su estudio como inhibidores enzimáticos específicos, hasta el diseño, síntesis y caracterización de nuevas moléculas y nanomateriales fotosensibilizados con propiedades biofotónicas mejoradas para aplicaciones biomédicas avanzadas. Esta última línea de investigación se inició en 2006 con el diseño y preparación de glicomiméticos multivalentes basados en silsesquioxanos poliédricos como armazones centrales híbridos órgano-inorgánicos. Más recientemente, se han incorporado otras nanopartículas moleculares como los fullerenos y biopolímeros naturales como los nanocristales de celulosa que combinan la experiencia previa del grupo en química de carbohidratos con la más reciente en nanomateriales funcionales.

El grupo tiene también como objetivos prioritarios la formación de jóvenes investigadores de forma eficaz y motivadora para que adquieran habilidades y pensamiento transdisciplinares mediante la combinación de conocimientos que abarcan diferentes campos científicos (síntesis orgánica, síntesis de nanomateriales, fotofísica, microscopía celular avanzada, etc.) con el objetivo de desarrollar moléculas y nanomateriales altamente innovadores con aplicaciones avanzadas en el campo de la biofotónica, además de la consolidación de colaboraciones nacionales e internacionales enfocadas a la movilización de esfuerzos en líneas clave de conocimiento para afrontar desafíos y lograr resultados que difícilmente se podrían entender y alcanzar fuera del contexto de una red de investigación interdisciplinar.

Entre estas colaboraciones actualmente en marcha cabe destacar el grupo de Virginia Martínez, Íñigo López-Arbeloa y Jorge Bañuelos (UPV) para estudios fotofísicos de las moléculas y nanomateriales fotoactivos, el grupo de María D. Chiara (Hospital Universitario Central de Asturias, Instituto de Investigación Sanitaria del Principado de Asturias ISPA) para el desarrollo de aplicaciones

de las nuevas moléculas y nanomateriales en microscopía celular avanzada del cáncer, el grupo de Annamaria Caiolfa (Universidad de Bari, Italia) para estudios in vitro de transporte activo de moléculas en mitocondrias, el grupo de Valdimir Baulin (Universidad Rovira i Virgili) para estudios teóricos de interacción de nanopartículas con membranas biológicas y el grupo de Elena Ivanova (Melbourne Royal Institute of Technology, Australia) para el estudio de la acción nanomecánica bactericida de los nuevos nanomateriales desarrollados, que es la líder mundial en este nuevo campo.

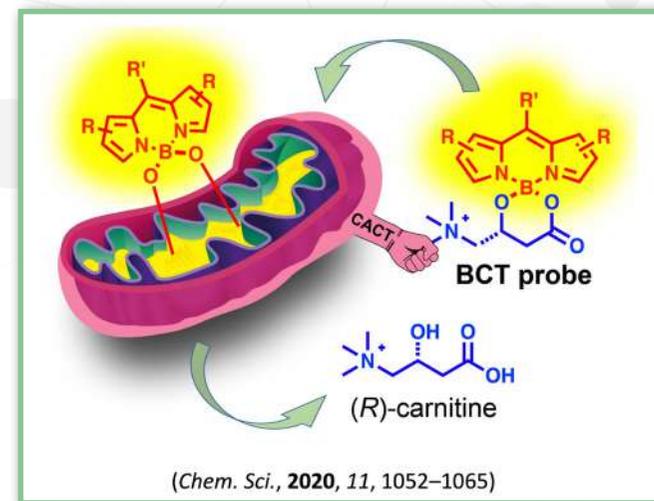
HITOS DESTACADOS

El grupo ha descrito las primeras sondas fluorescentes que son canalizadas activamente hacia la matriz mitocondrial en células vivas por un transportador específico de la membrana mitocondrial, la translocasa carnitina-acilcarnitina. Estas nuevas sondas funcionales (BCT) tienen un diseño estructural minimalista basado en el cromóforo BODIPY y L-carnitina como unidad biodirigida, unidos solo a través del átomo de boro. Las BCTs son los primeros derivados fluorescentes de carnitina que se utilizan en microscopía celular y son herramientas de investigación prometedoras para investigar el papel del sistema de carnitina en el remodelado metabólico del cáncer y en otras alteraciones relacionadas en enfermedades metabólicas de origen mitocondrial.

Este enfoque abre el camino para el desarrollo de nuevas sondas funcionales y fármacos dirigidos a otros transportadores mitocondriales para el estudio de la biología y patología de este fascinante orgánulo celular.

PUBLICACIONES DESTACADAS

Blázquez-Moraleja, A.; Prieto Montero, R.; García-Moreno, I.; Martínez-Martínez, V.; Bañuelos, J.; Saenz-de-Santa-María, I.; Chiara, M.D.; Chiara, J.L. A general modular approach for the



solubility tagging of BODIPY dyes. *Dyes and Pigments* 2019, 170, 107545.

DOI: [10.1016/j.dyepig.2019.107545](https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2019.107545)

Blázquez-Moraleja, A., Saenz-de-Santa Maria, I., Chiara, M. D., Alvarez-Fernandez, D., Garcia-Moreno, I., Prieto-Montero, R., Martínez-Martínez, V., Lopez Arbeloa, I., Chiara, J. L. Shedding light on the mitochondrial matrix through a functional membrane transporter. *Chemical Science* 2020, 11, 1052-1065.

DOI: [10.1039/c9sc04852a](https://doi.org/10.1039/c9sc04852a)

PARTICIPACIONES DESTACADAS EN CONGRESOS

Modular synthesis of O-BODIPY dyes for cell microscopy. A. Blázquez-Moraleja, D. Álvarez-Fernández, R. Prieto Montero, I. Sáenz-de-Santa María, M. D. Chiara, I. García-Moreno, V. Martínez-Martínez, J. Bañuelos, I. López Arbeloa, J. L. Chiara. Comunicación oral en el "International Symposium on Dyes & Pigments". Sevilla, 8-11 de septiembre de 2019.

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

Materiales fotónicos "diseñados a medida" como marcadores avanzados para bioimagen.

Referencia: MAT2017-83856-C3-1-P.

Entidad financiadora: MICINN.

Entidades participantes: Instituto de Química Orgánica General (IQOG-CSIC), Instituto de Química-Física Rocasolano (IQFR-CSIC), Universidad Complutense de Madrid, Universidad del País Vasco.

Duración: 01/01/2018 - 31/12/2020.

Investigador responsable y coordinador: José Luis Chiara (IP1, IQOG-CSIC); Inmaculada García-Moreno (IP2, IQFR-CSIC).

Cellulose-based spiky nanoparticles as mechanical bactericides.

Referencia: EIN2020-112327.

Entidad financiadora: MICINN.

Entidades participantes: Instituto de Química Orgánica General (IQOG-CSIC).

Duración: 01/10/2020 - 30/09/2022.

Investigador responsable: José Luis Chiara (IQOG-CSIC).

LIBROS Y CAPÍTULOS

Chiara, J.L. "Nonaflyl Azide", en *Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis* (e-EROS). Wiley, 2020.

DOI: 10.1002/047084289X.rn02321

TESIS DOCTORALES

Materiales avanzados para aplicaciones biofotónicas

Alberto Blázquez Moraleja .

Universidad Complutense de Madrid (UCM), Facultad de Farmacia.
27/10/2020.

Dirección: José Luis Chiara (IQOG), Inmaculada García-Moreno (IQFR).

TRABAJOS FIN DE MÁSTER

Desarrollo de nuevos materiales catalíticos basados en quitosano

Nerea Peña Montero.

Universidad Complutense de Madrid (UCM), Facultad de CC. Biológicas, 2020.

Dirección: Alfonso Fernández-Mayoralas y Julia Revuelta.

Síntesis de sondas fluorescentes avanzadas para bioimagen

Larissa Maierhofer.

Universidad Autónoma de Madrid (UAM). Facultad de Ciencias.
11/07/2019

Dirección: José Luis Chiara.

OTROS TRABAJOS DIRIGIDOS (prácticas externas en empresa, prácticas de formación profesional, etc.)

Síntesis de nuevos colorantes BODIPY

Miguel Romero Arcones (prácticas externas en empresas).

Universidad Complutense de Madrid (UCM), Facultad de Química, 2019.

Dirección: José Luis Chiara.

Síntesis de nuevos colorantes BODIPY

Isabel Ramón Martínez (prácticas externas en empresa).

Universidad de Alcalá de Henares, Facultad de Farmacia, 2020.

Dirección: José Luis Chiara.

DIVULGACIÓN CIENTÍFICA

Artículos

Chiara, J.L. "Z = 62, Samario, Sm. El primer elemento químico con nombre de persona". *Anales de Química* 2019, 115, 124.

OTROS

Seminarios

Compuestos y materiales moleculares avanzados para bioimagen

José Luis Chiara. Jornadas Científicas del IQOG, 23/10/2019.



Grupo de Glicoquímica Biológica



Personal investigador

Alfonso Fernández-Mayoralas
Agatha Bastida
Eduardo García-Junceda
Julia Revuelta

Personal de apoyo

Raúl Benito
Elena Trapero
Dianelis Toledo
Susana Iglesias

Personal en formación

Isabel Fraile
Nerea Peña
Antonio Aguanell
Sara Martín

En el grupo de Glicoquímica Biológica buscamos la revalorización de polisacáridos de origen marino obteniendo a partir de ellos moléculas y materiales de interés biológico y con aplicaciones biomédicas, aumentando la sostenibilidad de los procesos productivos en el marco de la economía azul y circular. Desde una perspectiva metodológica, nuestro propósito es el desarrollo de protocolos sostenibles y selectivos para la síntesis, modificación y transformación química y biocatalítica de carbohidratos y análogos, basados en los principios de la Química Verde. Además, buscamos obtener una comprensión básica de las relaciones estructura/función/actividad a nivel molecular de dichos polisacáridos con el fin de desarrollar, validar y aplicar las herramientas necesarias para explotar el potencial de los derivados de quitosano en el desarrollo de aplicaciones novedosas en el ámbito de los polímeros

terapéuticos y de los materiales inteligentes para la preparación de nuevos sistemas.

HITOS DESTACADOS

Atrapar y detener la infección por COVID-19

El grupo está trabajando frente a la pandemia COVID-19, en la carrera para la identificación de nuevos compuestos eficaces para su tratamiento, que consigan aliviar los síntomas y acabar con la infección. Dicho trabajo se está realizando en el marco del proyecto "Desarrollo de un spray nasal basado en miméticos de

sulfatos de heparano como antivirales” que ha sido financiado a través de la Plataforma Salud Global del CSIC. Con este objetivo el grupo ha desarrollado compuestos antivirales para su utilización como un spray nasal antiviral que utiliza polisacáridos para simular la superficie celular donde se adhiere el coronavirus y poder así atraparlo y detener la infección. Dicho proyecto se encuentra recogido en el informe científico-técnico “Una visión global de la pandemia COVID-19, elaborado por la plataforma Salud Global que ha sido publicado por la editorial CSIC, habiéndolo participado miembros del grupo en su redacción.

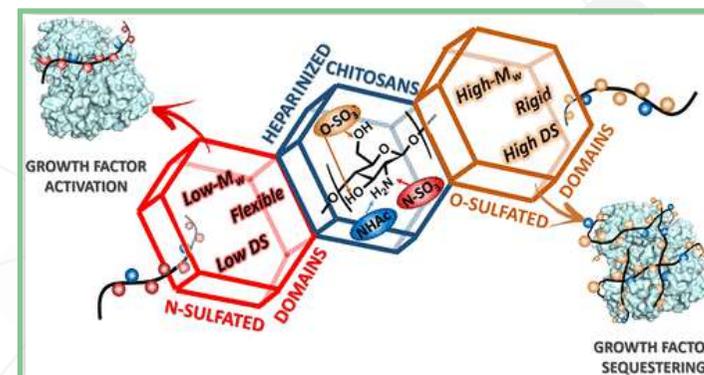


Además, el grupo participó con este proyecto en el Hackaton Virtual organizado por la Comunidad de Madrid #Vencealvirus los pasados 4 y 5 de abril de 2020 (<https://vencealvirus.org/>).



Hacia una nueva generación de quitosanos con actividad a la carta

Un equipo multidisciplinar liderado desde el grupo de Glicoquímica Biológica, ha llevado a cabo el diseño, síntesis y caracterización de nuevos ligandos de factores de crecimiento basados en quitosano, el segundo polisacárido más abundante de la naturaleza después de la celulosa. El trabajo, publicado en la revista ACS Applied Materials and Interfaces, confirma el potencial terapéutico de los sulfatos de quitosano como miméticos de los sulfatos de heparano en su unión a factores de crecimiento, proteínas de gran relevancia en muchos procesos biológicos y, por consiguiente, en un gran número de enfermedades. En particular, nuestros resultados ponen de manifiesto que las diferencias estructurales de los polisacáridos preparados, influyen significativamente en su unión a los factores de crecimiento, respaldando la hipótesis de que la unión de los polisacáridos a los factores de crecimiento está gobernada por una combinación de dos factores: las interacciones iónicas ligando-proteína y la capacidad de adaptación conformacional del polisacárido. De este modo la modificación estructural de los polisacáridos, en base a los resultados obtenidos, permitiría regular los diferentes grados de interferencia de dichos polisacáridos sulfatados con los factores de crecimiento, influyendo significativamente en el efecto promotor/inhibidor en los fenómenos de proliferación/diferenciación celular.



Hacia una economía más sostenible: Nuevos retos de la biocatálisis

Durante 2019 fue creada la red temática de “Biocatálisis y Tecnología enzimática; soluciones hacia una química sostenible”, de la que el grupo de Glicoquímica Biológica forma parte. Dicha red forma parte de la acción de dinamización “Redes de Investigación” del Ministerio de Ciencia e Innovación. El objetivo de la misma es establecer acciones colaborativas entre diferentes grupos de investigación repartidos por la geografía española y con experiencia contrastada en diferentes facetas de la Biocatálisis, con el fin de aumentar su peso específico en la agenda española de investigación y, más concretamente, en la agenda socio-económica hacia una economía más sostenible, en el contexto de la Agenda 2030 para el desarrollo sostenible aprobada por la ONU en 2015.

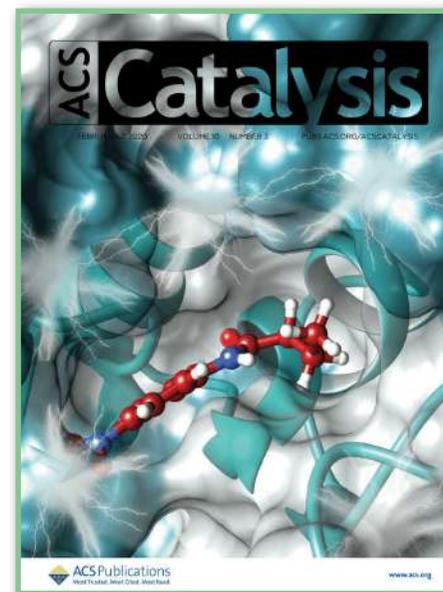


Promiscuidad enzimática: Una herramienta con grandes aplicaciones

Nuestro trabajo sobre el estudio teórico-experimental de la promiscuidad de sustrato de la enzima CALB, realizado en

colaboración con el grupo de química computacional BioComp de la Universidad Jaume I, fue elegido para ilustrar la portada del número de la revista ACS Catalysis en el que se publicó. Además, fue designado como “ACS Editors’ Choice” (Elección de los editores de la ACS) para hacerlo disponible en acceso en abierto debido a su potencial interés para un amplio público.

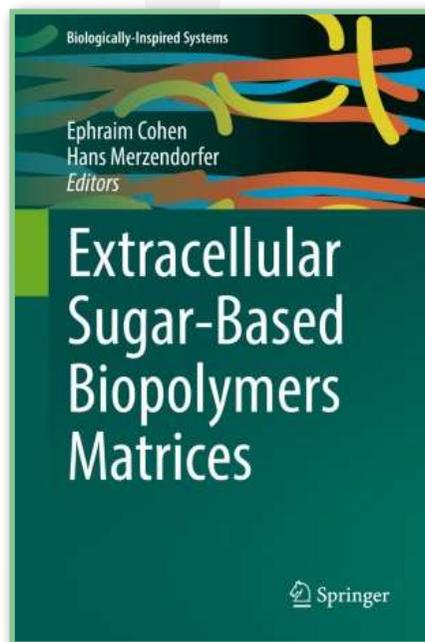
Galmés, M.À., García-Junceda, E., Świderek, K., Moliner, V., 2020. Exploring the Origin of Amidase Substrate Promiscuity in CALB by a Computational Approach. ACS Catal. 10, 1938–1946. <https://doi.org/10.1021/acscatal.9b04002>.



Sulfatos de condroitina, dermatano, heparano y keratano: Estructura y función

Nuestro grupo de investigación ha participado en el desarrollo de una extensa recopilación de la investigación desarrollada en torno a la estructura y función biológica de los glicosaminoglicanos, un tipo de biomoléculas presentes fundamentalmente en el tejido conectivo, epitelial y óseo, así como en el medio intercelular que

juegan un papel clave en el crecimiento, diferenciación y migración celular, así como en otros procesos de gran relevancia biológica. Dicha recopilación ha sido publicada dentro del libro "Extracellular Sugar-Based Biopolymers Matrices" de la editoria Springer en colaboración con investigadores de la Universidad de Nápoles (Italia). Dicho trabajo ofrece una visión completa de diferentes aspectos tales como su estructura química, su biosíntesis, los métodos de extracción y purificación desde fuentes naturales, su caracterización estructural, así como de sus funciones biológicas más relevantes.



Proyecto de cooperación internacional

En el contexto de un proyecto de cooperación internacional del programa I-COOP, miembros de nuestro grupo han dirigido tesis doctorales realizadas en la Universidad de San Francisco Xavier de Chuquisaca (Bolivia) por alumnos de dicha Universidad. Dichas tesis han sido realizadas en parte en el grupo de Glicoquímica

Biológica, a través de estancias financiadas por dicho programa.



PUBLICACIONES DESTACADAS

Revuelta J, Aranaz I, Acosta N, Acosta N, Civera C, Bastida A, Peña N, Monterrey D.T, Doncel-Pérez E, Garrido L, Heras A, García-Junceda E, Fernández-Mayoralas A. "Unraveling the Structural Landscape of Chitosan-Based Heparan Sulfate Mimics Binding to Growth Factors: Deciphering Structural Determinants for Optimal Activity". (2020). *ACS Applied Materials & Interfaces*. 12, 25534-25545

DOI: 10.1021/acscami.0c03074

Galmés, M.À.; García-Junceda, E.; Świderek, K.; Moliner. V. "Exploring the Origin of Amidase Substrate Promiscuity in CALB by a Computational Approach". (2020). *ACS Catalysis*, 10, 1938-1946.

DOI: 10.1021/acscatal.9b04002

Morales, P., Curtis, N.L., Zárata, S.G., Bastida, A., Bolanos-Garcia, V.M. "Interfering with mRNA methylation by the 2' o-methyltransferase (Nsp16) from sars-cov-2 to tackle the covid-19 disease". (2020) *Catalysts*, 10, 1023.

DOI: 10.3390/catal10091023

Vargas, E.L.; Velázquez, J.A.; Rodrigo, E.; Reinecke, H.; Rodríguez-Hernández, J.; Fernández Mayoralas, A.; Gallardo, A.; Cid, M.B. "pKa Modulation of Pyrrolidine-Based Catalytic Polymers Used for the Preparation of Glycosyl Hydrazides at Physiological pH and Temperature". (2020). *ACS Appl. Bio Mater*, 3, 1955–1967.

DOI: 10.1021/acsabm.9b01123

Sánchez-Moreno, I.; Benito-Arenas, R.; Montero-Calle, P.; Hermida, C.; García-Junceda, E.; Fernández-Mayoralas, A. "Simple and Practical Multigram Synthesis of d-Xylonate Using a Recombinant Xylose Dehydrogenase". (2019). *ACS Omega*, 4, 10593-10598.

DOI: 10.1021/acsomega.9b01090

Zarate S.G., Bastida A., Santana A.G., Revuelta, J. "Synthesis of Ring II/III Fragment of Kanamycin: A New Minimum Structural Motif for Aminoglycoside Recognition". (2019). *Antibiotics*, 2;8(3):109.

DOI: 10.3390/antibiotics8030109

Benito-Arenas, R., Zárate, S.G., Revuelta, J., Bastida, A. "Chondroitin sulfate-degrading enzymes as tools for the development of new pharmaceuticals". (2019). *Catalyst*, 9(4), 322.

DOI: 10.3390/catal9040322

Zárate, S.G., Morales, P., Swiderek, K., Bolanos-Garcia, V.M., Bastida, A. "A molecular modeling approach to identify novel inhibitors of the major facilitator superfamily of efflux pump transporters". (2019). *Antibiotics*, 8, 25.

DOI: 10.3390/antibiotics8010025

Martí, S., Bastida, A., Świderek, K. "Theoretical studies on mechanism of inactivation of kanamycin a by 4'-O-Nucleotidyltransferase". (2019). *Frontiers in Chemistry*, 7, 660.

DOI: 10.3389/fchem.2018.00660

PARTICIPACIONES DESTACADAS EN CONGRESOS

BDNF encapsulated in Chitosan particles promotes differentiation and neuritic growth of PC12 cells. E. Doncel-Pérez. Tipo de ponencia: 18th National Meeting of the Spanish Society of Neuroscience (SENC 2019). 04-06 septiembre 2019, Santiago de Compostela.

Sulfation: from nature to the lab. Trends in Enzyme Catalysis. Merging Theory and Experiments. E. García-Junceda. Tipo de ponencia: Conferencia invitada. TrEnCa 2019. 28-29 noviembre 2019, Benicassim (Castellón).

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

Nuevos dispositivos para terapia de reemplazamiento enzimático en hipolactasia a partir de biomasa de residuos de origen acuático.

Referencia: IND2019/IND-17121.

Entidad financiadora: Comunidad Autónoma de Madrid.

Entidades participantes: IQOG-CSIC / INFIQUS, S.L.

Duración: 04/02/2020-03/02/2023.

Investigador/es principal/es: Julia Revuelta Crespo.

Materiales basados en quitosanos hepara(i)nizados: modificaciones selectivas para nuevas aplicaciones biomédicas.

Referencia: PID2019-105337RB-C21.

Entidad financiadora: MICIIN.

Entidades participantes: IQOG-CSIC / UCM.

Duración: 01/06/2020-31/05/2023.

Investigador/es principal/es: Alfonso Fernández-Mayoralas y Julia Revuelta Crespo.

Desarrollo de un spray bucal basado en miméticos de sulfatos de heparano como antivirales.

Referencia: CSIC-COV19-013.

Entidad financiadora: CSIC.

Entidades participantes: IQOG-CSIC.

Duración: 15/04/2020-14/04/2021.

Investigador/es principal/es: Julia Revuelta Crespo.

Hidrogeles funcionalizados con derivados de glicosaminoglicanos: preparación y estudio de sus propiedades en células y tejidos neurales.

Referencia: MAT2015-65184-C2-2-R.

Entidad financiadora: MINECO.

Entidades participantes: IQOG-CSIC / ICTP-CSIC / UCM / Hospital Nacional de Paraplégicos de Toledo.

Duración: 01/01/2016-31/12/2019.

Investigador/es principal/es: Leoncio Garrido y Alfonso Fernández-Mayoras.

Red temática de bio-catálisis y tecnología enzimática; soluciones hacia una química sostenible.

Referencia: RED2018-102403-T.

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Entidades participantes: CIC biomaGUNE, CSIC, Universitat Jaume I, Universidad Complutense de Madrid, Universidad de Oviedo, Universitat de Girona y Universidad de Murcia.

Duración: 01/01/2020-30/09/2022.

Investigador responsable: Dr. Fernando López Gallego.

CONVENIO CON EMPRESAS

Quitosanos específicos y dermocosmética

Entidad financiadora: Infiquis, S.L. (en el contexto del programa de Cheques Innovación de la Comunidad de Madrid).

Duración: 12/2020-12/2021.

Investigador/es principal/es: Julia Revuelta Crespo.

LIBROS Y CAPÍTULOS

Abellán, A.; Aceituno, P.; Allende, A.; Andrés, A., et al. "Protección específica de las mucosas frente a la entrada del SARS-COV-2". Vicepresidencia de Ciencia y Tecnología del CSIC (VICYT). *Una visión global de la pandemia COVID-19: qué sabemos y qué estamos investigando desde el CSIC*, 116-119. Editorial: CSIC, 2020.

DOI: 10.20350/digitalCSIC/12596

Bedini, E.; Corsaro, M.M.; Fernández-Mayoralas, A.; Iadonisi, A. "Chondroitin, Dermatan, Heparan, and Keratan Sulfate: Structure and Functions". Cohen E., Merzendorfer H. *Extracellular Sugar-Based Biopolymers Matrices. Biologically-Inspired Systems*, 187-233. Editorial: Springer, Cham, 2019.

DOI: 10.1007/978-3-030-12919-4_5

PATENTES Y TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA

Derivados de quitosano sulfatados: Métodos de preparación y actividad antiviral

Inventores: Fernández-Mayoras, A.; Bastida, A.; García-Junceda, E.; Geller, R.; Revuelta, J.

Número de aplicación: Secreto Industrial (ACTA REGISTRO NOTARIAL SECRETO EMPRESARIAL nº 4490/2020 de 10 de noviembre).

Año: 2020.

Propietarios: CSIC / Universidad de Valencia.

Países: España.

VISITANTES NACIONALES Y EXTRANJEROS

Giullia Vesella.

Período de la estancia: 01/2020-03/2020.

Institución origen: Universidad de Nápoles.

País: Italia.

Noelia Seco Moro.

Período de la estancia: 01/09/2019-30/11/2019.

Institución origen: Hospital de Fuenlabrada.

País: España.

TESIS DOCTORALES

Efecto de nuevos compuestos bioactivos e hidrolasas sobre biopelículas generadas por *Cándida glabrata* en prótesis dentales

María Luisa de la Cruz Claire.

Universidad Mayor, Real y Pontificia de San Francisco Xavier de Chuquisaca. Diciembre 2020.

Directores: María Teresa Ulloa y Agatha Bastida.

TRABAJOS FIN DE MÁSTER

Desarrollo de nuevos materiales catalíticos basados en quitosano

Nerea Peña Montero.

Universidad Complutense de Madrid (UCM), Facultad de CC. Biológicas, 2020.

Dirección: Alfonso Fernández-Mayoralas y Julia Revuelta.

Desarrollo de nuevas sulfotransferasas autosuficientes para su aplicación en síntesis de compuestos de interés terapéutico

Dianélis Toledo Monterrey.

Universidad Complutense de Madrid (UCM), Facultad de CC. Biológicas, 2020.

Dirección: Eduardo García-Junceda.

TRABAJOS FIN DE GRADO

Revalorización de productos de deshecho de la industria alimentaria. Materiales inteligentes a partir de quitosano

Irene García-Junceda.

Universidad Complutense de Madrid (UCM), Facultad de CC. Biológicas, 2020.

Dirección: Julia Revuelta Crespo.

Empleo de BODIPYs como marcadores químicos para la localización de biomoléculas: estudio sintético y computacional

Inés María García Pérez.

Universidad Complutense de Madrid (UCM). Facultad de Ciencias Químicas. Grado en Bioquímica. Junio 2020.

Dirección: Agatha Bastida y Clara Uriel Arias.

OTROS TRABAJOS DIRIGIDOS (prácticas externas en empresa, prácticas de formación profesional, etc.)

Nuevos materiales inteligentes basados en quitosano para la liberación controlada con propiedades antibacterianas

Antonio Aguanell (prácticas externas en empresa).

Universidad de Alcalá de Henares (UAH), Dto. Química Orgánica, Facultad CC. Químicas, 2020.

Dirección: Julia Revuelta Crespo.

Nuevos derivados de polisacáridos para la obtención de nanomateriales

Macarena del Campo (prácticas externas en empresa).

Universidad de Alcalá de Henares (UAH), Dto. Química Orgánica, Facultad CC. Químicas, 2020.

Dirección: Julia Revuelta Crespo.

Preparación de beads cargados con antibióticos

Patricia Brizuela.

Universidad Complutense de Madrid (UCM), 2020.

Dirección: Agatha Bastida.

Módulo formativo: C.F.G.S Laboratorio de análisis y control de calidad

Erick Ernesto García Santos.

I.E.S Virgen de la Paloma Orgánica, 2019.

Dirección: Julia Revuelta Crespo.

DIVULGACIÓN CIENTÍFICA

Artículos

En el contexto del proyecto para la preparación de un spray nasal para combatir la COVID-19, durante el año 2020 hemos aparecido en diferentes periódicos y revistas. A continuación, se recogen las más destacas:

- Investigadores del CSIC desarrollan un spray bucal antiviral para detener la infección del coronavirus. *ABC*. Fecha: 31/07/2020. <https://bit.ly/3e5TF3Q>
- Investigadores del CSIC trabajan en un spray para 'engañar' al virus de la Covid-19 y detener la infección. *El Mundo*. Fecha: 31/07/2020. <https://bit.ly/3e5TVQm>
- Investigadores del CSIC trabajan en un espray que engaña y frena el avance del coronavirus. *La Vanguardia*. Fecha: 31/07/2020. <https://bit.ly/2MOM0d>
- Investigadores del CSIC trabajan en un spray bucal antiviral que detiene la infección de covid-19. *La Razón*. Fecha: 31/07/2020. <https://bit.ly/3rl7Fun>

Sitios en internet

Cuenta de Twitter del grupo: <https://twitter.com/BioGlycoChem>

Radio/TV

- TeleMadrid. Programa “*Juntos*”. Fecha de emisión: 01/08/2020. <https://bit.ly/38dG86p>
- Antena 3 noticias. Fecha de emisión: 01/08/2020. <https://bit.ly/30lpoWp>

- Cuatro. Programa “*Cuatro al día*”. Fecha de emisión: 31/07/2020.
- LaSexta. Fecha de emisión: 31/07/2020. <https://bit.ly/3qgZ62o>
- Entrevista en RNE. Boletín Informativo. Fecha de emisión: 31/07/2020 <https://bit.ly/30g9RaA>
- Entrevista en Radio Catalunya. Boletín Informativo. Fecha de emisión: 31/07/2020.
- Entrevista en Canal Sur Radio. Boletín Informativo. Fecha de emisión: 31/07/2020.
- CadenaSer: Fecha de emisión: 31/07/2020. <https://bit.ly/2MNfWrN>

Actividades

- Taller de Cocina macromolecular. Colegio Corazón Inmaculado. Fecha: 11/06/2019.

OTROS

Docencia universitaria

Máster Universitario en Química Orgánica.

Universidad Autónoma de Madrid. Conferencia “*De la química a la biología, un viaje de ida y vuelta: Reacciones bioortogonales y síntesis enzimática*”.

Prof. Alfonso Fernández-Mayoralas.

Máster Universitario en Biotecnología Industrial y Ambiental.

Dr. Eduardo García-Junceda y Dra. Agatha Bastida.

Grupo de Glicoquímica y Reconocimiento Molecular



Personal investigador

Juan Luis Asensio Álvarez

Postdoctorales

Andrés González Santana
Laura Montalvillo Jiménez

Personal en formación

Laura Díaz Casado

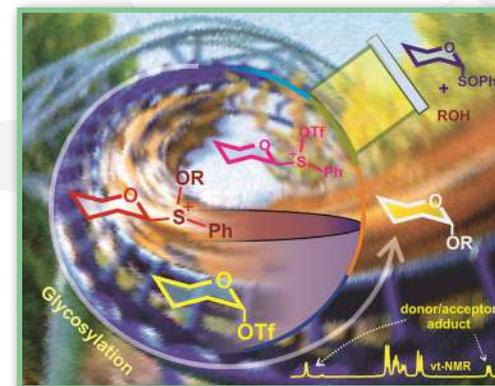
Personal de apoyo

Enrique Mann

PUBLICACIONES DESTACADAS

A.G. Santana, L. Montalvillo-Jiménez, L. Díaz-Casado, F. Corzana, P. Merino, F.J. Cañada, G. Jiménez-Osés, J. Jiménez-Barbero, A.M. Gómez, Juan L. Asensio. "Dissecting the Essential Role of Anomeric β -Triflates in Glycosylation Reactions". *J. Am. Chem. Soc.* (2020), 142, 12501-12514.

DOI: [10.1021/jacs.0c05525](https://doi.org/10.1021/jacs.0c05525)



El grupo desarrolla su actividad investigadora en aspectos fundamentales relacionados con el reconocimiento molecular y la reactividad de Glicósidos.

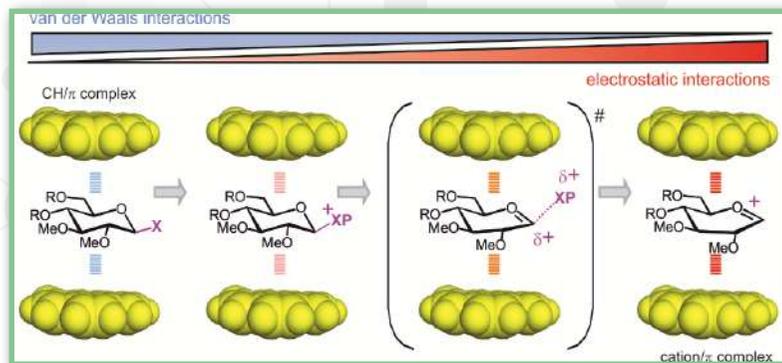
HITOS DESTACADOS

Se han descrito en detalle el mecanismo de reacciones de glicosilación largamente utilizadas por la comunidad química.

Se ha dilucidado el papel modulador de las interacciones de apilamiento CH/ π en reacciones de glicosilación.

L. Montalvillo-Jiménez, A. G. Santana, F. Corzana, G. Jiménez-Osés, J. Jiménez-Barbero, A. M. Gómez, Juan L. Asensio. "Impact of Aromatic Stacking on Glycoside Reactivity: Balancing CH/ π and Cation/ π Interactions for the Stabilization of GlycosylOxocarbenium Ions". *J. Am. Chem. Soc.* (2019), 141, 13372-13384.

DOI: 10.1021/jacs.9b03285



PARTICIPACIONES DESTACADAS EN CONGRESOS

Aminoglycoside antibiotics: From chemical biology to drug design. Juan Luis Asensio. Tipo de ponencia: Invited Lecture. Introductory Workshop on Biomedical Glycoscience. 3-5 Junio 2019, San Sebastian.

Finding the Right Candidate for the Right Position: a Fast NMR-Assisted Combinatorial Method for Optimizing Nucleic Acids Binders. Andrés González Santana. Tipo de ponencia: Oral Communication. Premio SEQT ·Best Oral Communication. V Symposium Medicinal Chemistry Young Researchers. 5-6 Septiembre 2019, Atenas.

pH-responsive GCase Inhibitors as potential Pharmacological Chaperones for Gaucher disease. Andrés González Santana. Tipo de ponencia: Oral Communication. Eurocarb XX. 30/06/2019 – 04/07/2019, Leiden – Países Bajos.

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

Glicoquímica y reconocimiento molecular: análisis de procesos de glicosidación y su modulación por medio de interacciones cation/ π .

Referencia: PID2019-107476GB-I00.

Entidad financiadora: Ministerio de ciencia e innovación.

Entidades participantes: CSIC.

Duración: 01/07/2020-31/06/2023.

Investigador/es principal/es: Juan Luis Asensio.

Estudios sobre reconocimiento molecular de glicósidos: bases moleculares y optimización de compuestos bio-activos.

Referencia: CTQ2016-79255-P.

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y competitividad.

Entidades participantes: CSIC.

Duración: 30/12/2016-29/12/2020.

Investigador/es principal/es: Juan Luis Asensio.

Marie Skłodowska Curie Actions - Reintegration 2018 Finalidad: Posdoctoral.

Referencia: SWEET-PI.

Entidad Financiadora: European Commission.

Entidades participantes: CSIC.

Duración: 01/01/2020-31/12/2021.

Investigador Principal: Juan Luis Asensio.

PATENTES Y TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA

Título propiedad industrial registrada: Procedimiento de Obtención de Glicoconjugados

Inventores: Manuel José Nieto Domínguez; María Jesús Martínez Hernández; Francisco Javier Cañada Vicinay; Andrés González Santana; Alicia Prieto Aorzamco; Juan Luis Asensio Alvarez.

Número de aplicación: P201930082.

Año: 2019.

Propietarios: CSIC.

Países: España.

TESIS DOCTORALES

Glicoquímica y reconocimiento molecular: influencia de las interacciones de apilamiento CH/ π sobre la reactividad de glicósidos

Laura Montalvillo Jiménez.

Universidad Complutense de Madrid (UCM). Facultad de Ciencias.
2019.

Dirección: Juan Luis Asensio.

Grupo de Metodologías Sintéticas Basadas en Sistemas Insaturados



Personal investigador

Pedro Almendros Requena

Personal en formación

Irene Martín Mejías

relevancia el acceso a heterociclos nitrogenados de diferentes tamaños y conectividades. Además, también se contemplará la preparación selectiva de sistemas tensionados (ciclobutanos, oxetanos, azetidinas y tietanos) que portan uno o dos grupos Tf (triflonas) mediante la reacción formal de cicloadición [2 + 2] entre los dipolos de Koshar y los sistemas insaturados. Finalmente, la síntesis asimétrica de los compuestos anteriores se abordará mediante el uso de agentes quirales no racémicos.

HITOS DESTACADOS

Síntesis regioselectiva de ciclobutenonas.

En el año 2019, investigadores del IQOG-CSIC y de la Unidad Asociada de Lactamas y Heterociclos Bioactivos de la UCM han diseñado una síntesis directa de ciclobutenonas 2,3-disustituidas a partir de yodoalquinos mediante ciclobutenilación, reacción de Suzuki y formación de cetonas. Esta metodología se ha aplicado de manera eficaz a la síntesis selectiva de un inhibidor de la ciclooxigenasa II, activo por vía oral. Además, las ciclobut-2-en-1-onas obtenidas se utilizaron como sintones útiles en varias transformaciones, como la preparación de β -lactamas, ftalazinas, ciclohexa-2,5-dien-1-onas y ciclopent-3-en-1-onas.

Nuestro grupo mantiene una estrecha colaboración con varios investigadores del Departamento de Química Orgánica de la Universidad Complutense de Madrid (UCM) a través de la Unidad Asociada al CSIC "Lactamas y Heterociclos Bioactivos". La actividad de nuestro grupo se enmarca en una línea de investigación centrada en la química de sistemas insaturados, en particular alenos y alquinos, y ciclos tensionados. El objetivo es contribuir al desarrollo de nuevos métodos sintéticos para la ciclación y/o reordenamiento de sistemas funcionalizados alénicos y alquínicos, con el objetivo de sintetizar compuestos de alto valor añadido. Nuestro plan es hacer uso de estrategias sintéticas directas, eficientes y estereocontroladas para la preparación de nuevos sistemas cíclicos, tanto estructuralmente novedosos como con interesantes propiedades biológicas o físicas. En este contexto, será de especial

Estos resultados se han publicado como artículo en “Convenient Access to 2,3-Disubstituted-cyclobut-2-en-1-ones under Suzuki Conditions and their Synthetic Utility” Alcaide, B.; Almendros, P.; Lázaro-Milla, C. Chem. Eur. J. 2019, 25, 7547-7552;

DOI: 10.1002/chem.201900690 (seleccionado como Hot Paper)
Factor de Impacto: 5,116.

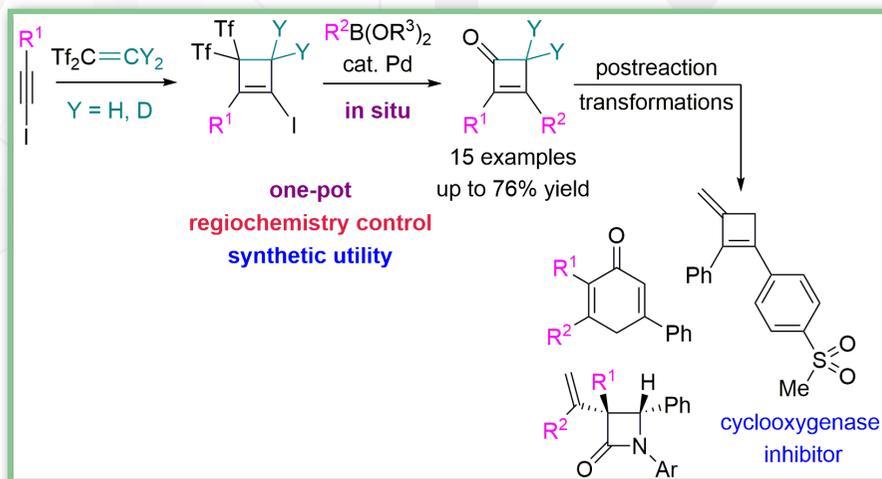


Figura 1. Preparación directa de ciclobutenonas 2,3-disustituidas a partir de yodoalquinos y versatilidad sintética

Preparación de carbazoles usando catálisis heterogénea.

Una investigación experimental y teórica conjunta entre científicos del IQOG-CSIC y la UCM ha demostrado que el nitrato de plata soportado en gel de sílice es un excelente sistema catalítico heterogéneo para la hidroarilación selectiva de alenos unidos a indol, con una inversión de selectividad en comparación con la catálisis de oro homogénea. Los experimentos de control respaldados por estudios DFT sugieren que los alenos unidos a indol reaccionan a través de una secuencia 5-endo-dig-carbometalación/reordenamiento para dar 9H-carbazoles-1,2-disustituidos, que contrasta con la clásica 6-endo-dig-carbometalación descrita anteriormente para [Au(I)] en fase homogénea. Este trabajo se ha publicado en “AgNO₃-SiO₂: Convenient AgNPs Source for the Sustainable Hydrofunctionalization

of Allenyl-Indoles using Heterogeneous Catalysis”. Luna, A.; Herrera, F.; Higuera, S.; Murillo, A.; Fernández, I.; Almendros, P. J. Catal. 2020, 389, 432-439;

DOI: 10.1016/j.jcat.2020.06.002; Factor de Impacto: 7,888.

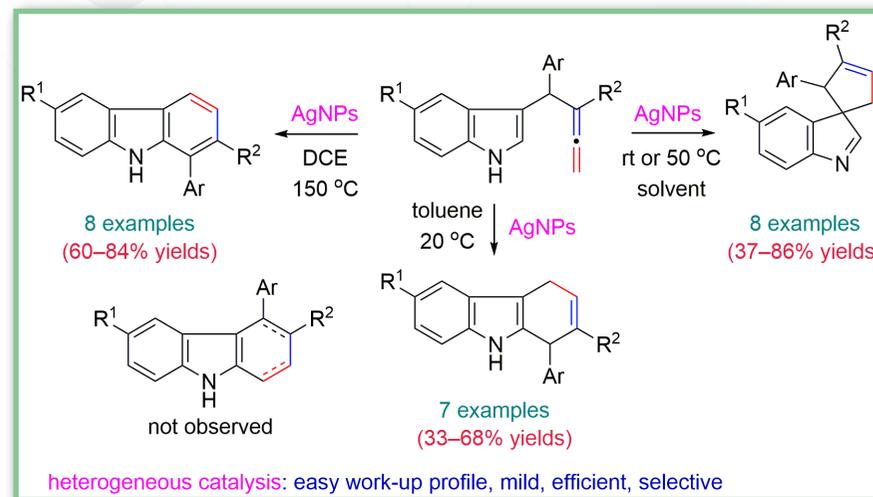


Figura 2. Síntesis regiocontrolada de carbazoles catalizada por Ag(0)

Sulfonilación de alcoholes alénicos catalizada por complejos de rutenio e inducida por luz visible.

Este logro se ha conseguido gracias a una investigación conjunta entre científicos del IQOG-CSIC y de la UCM. Se ha descrito el primer acoplamiento de α -alenoles, dióxido de azufre y sales de diazonio. La reacción de tres componentes que es promovida por luz visible puede lograrse fácilmente usando DABSO como un sustituto de dióxido de azufre en presencia de un catalizador foto-redox. De esta manera, se generan 3-(arilsulfonil)but-3-enales 2,2-disustituidos, compuestos de gran interés y a la vez difícil preparación por métodos convencionales. Este trabajo se ha publicado en “Visible-Light-Mediated Ru-Catalyzed Synthesis of 3-(Arylsulfonyl)but-3-enals via Coupling of α -Allenols with Diazonium Salts and Sulfur Dioxide” Herrera, F.; Luna, A.; Almendros, P. Org. Lett. 2020, 22, 9490-9494;

DOI: <https://dx.doi.org/10.1021/acs.orglett.0c03482>; Factor de Impacto: 6,091.

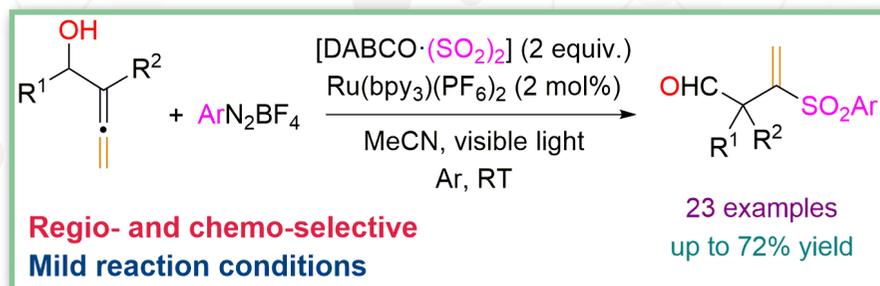


Figura 3. Síntesis fotoquímica de sulfonyl-aldehidos β,γ -insaturadas catalizada por rutenio

PUBLICACIONES DESTACADAS

Alcaide, B.; Almendros, P.; Fernández, I.; Martínez del Campo, T.; Palop, G.; Toledano-Pinedo, M.; Delgado-Martínez, P. "Chemoselectivity Switching in the Rhodium-Catalyzed Reactions of 4-Substituted-1-sulfonyl-1,2,3-triazoles with Allenols: Noticeable Differences between 4-Acyl- and 4-Aryl-Triazoles". (2019) *Adv. Synth. Catal* 361, 1160-1165.

DOI: [10.1002/adsc.201801424](https://doi.org/10.1002/adsc.201801424)

Alcaide, B.; Almendros, P.; Lázaro-Milla, C. "Convenient Access to 2,3-Disubstituted-cyclobut-2-en-1-ones under Suzuki Conditions and their Synthetic Utility". (2019) *Chem. Eur. J.* 25, 7547-7552.

DOI: [10.1002/chem.201900690](https://doi.org/10.1002/chem.201900690)

Alcaide, B.; Almendros, P.; Martínez del Campo, T.; Martín, L.; Palop, G.; Toledano-Pinedo, M. "Oxidative Selenofunctionalization of Allenes: Convenient Access to 2-(Phenylselenanyl)-but-2-enals and 4-Oxo-3-(phenylselenanyl)pent-2-enoates". (2019) *Org. Chem. Front.*, 6.

DOI: [10.1039/c9qo00561g](https://doi.org/10.1039/c9qo00561g)

Herrera, F.; Luna, A.; Fernández, I.; Almendros, P. "Transition Metal-Free Cyclobutene Rearrangement in Fused Naphthalen-1-ones: Controlled Access to Functionalized Quinones". (2020) *Chem.*

Commun, 56, 1290-1293.

DOI: [10.1039/c9cc08628e](https://doi.org/10.1039/c9cc08628e)

Martín-Mejías, I.; Aragoncillo, C.; Yanai, H.; Hoshikawa, S.; Fujimoto, Matsumoto, T.; Almendros, P. "Catalyst-Free Bis(triflyl)ethylation/Benzannulation Reaction: Rapid Access to Carbazole-Based Superacidic Carbon Acids from Alkynols". (2020) *Chem. Commun*, 56, 1795-1798.

DOI: [10.1039/c9cc008930f](https://doi.org/10.1039/c9cc008930f)

Toledano-Pinedo, M.; Martínez del Campo, T.; Tiemblo, M.; Fernández, I.; Almendros, P. "Organoseleno-Catalyzed Synthesis of α,β -Unsaturated α' -Alkoxy Ketones from Allenes Enabled by Se \cdots O interactions". (2020) *Org. Lett*, 22, 3979-3984.

DOI: [10.1021/acs.orglett.0c01288](https://doi.org/10.1021/acs.orglett.0c01288)

Luna, A.; Herrera, F.; Higuera, S.; Murillo, A.; Fernández, I.; Almendros, P. "AgNO₃-SiO₂: Convenient AgNPs Source for the Sustainable Hydrofunctionalization of Allenyl-Indoles using Heterogeneous Catalysis". (2020) *J. Catal*, 389, 432-439.

DOI: [10.1016/j.jcat.2020.06.002](https://doi.org/10.1016/j.jcat.2020.06.002)

Lázaro-Milla, C.; Quirós, M. T.; Cárdenas, D. J.; Almendros, P. "Triflyl-Assisted Reductive Pd-Catalyzed Tsuji-Trost type Reaction". (2020) *Chem. Commun*, 56, 6070-6073.

DOI: [10.1039/d0cc02146f](https://doi.org/10.1039/d0cc02146f)

Lázaro-Milla, C.; Macicior, J.; Yanai, H.; Almendros, P. "Trifluorosulfonylation Cascade in Allenes: Stereocontrolled Synthesis of Bis(triflyl)enones". (2020) *Chem. Eur. J.*, 26, 8983-8989.

DOI: [10.1002/chem.202001236](https://doi.org/10.1002/chem.202001236)

Lázaro-Milla, C.; Busto, E.; Burgos, I.; Nieto Faza, O.; Almendros, P. "Gold-Catalyzed Reaction of Alkynes with Diazonium Salts under Photoirradiation Revisited: New Alkoxyarylation Variant Leading to Enol Ethers". (2020) *J. Catal*, 391, 48-55.

DOI: [10.1016/j.jcat.2020.07.029](https://doi.org/10.1016/j.jcat.2020.07.029)

Maró, M. A.; Kincses, A.; Rácz, B.; Nasim, M. J.; Sarfraz, M.; Lázaro-Milla, C.; Domínguez-Álvarez, E.; Jacob, C.; Spengler, G.; Almendros, P. "Antimicrobial, Anticancer and Multidrug-Resistant Reversing Activity of Novel Oxygen-, Sulfur- and Selenium-Substituted Flavonoids". (2020) *Pharmaceuticals*, 13, 453(1)-453(11).

DOI: 10.3390/ph13120453

Herrera, F.; Luna, A.; Almendros, P. "Visible-Light-Mediated Ru-Catalyzed Synthesis of 3-(Arylsulfonyl)but-3-enals via Coupling of α -Allenols with Diazonium Salts and Sulfur Dioxide". (2020) *Org. Lett.*, 22, 9490-9494.

DOI: 10.1021/acs.orglett.0c03482

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

Nuevas Estrategias Sintéticas de Ciclación y Reagrupamiento basadas en Alenos y Alquinos para la Síntesis Eficiente de Moléculas Orgánicas de Interés

Referencia: PGC2018-095025-B-I00.

Entidad financiadora: AEI (Agencia Estatal de Investigación).

Entidades participantes: CSIC y UCM.

Duración: enero 2019 - diciembre 2021.

Investigador/es principal/es: Pedro Almendros Requena.

LIBROS Y CAPÍTULOS DE LIBROS

Alcaide, B.; Almendros, P.; Aragoncillo, C. "Axial Chirality Beyond Atropisomerism: Allenes and Related Compounds". José M. Lassaletta. *Atropisomerism and Axial Chirality* (<https://doi.org/10.1142/q0192>; ISBN: 978-1-78634-647-6 (ebook)). World Scientific: Singapore (2019). chp. 8, pp 541-609.

DOI: 10.1142/9781786346469_0008

PATENTES Y TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA

Derivados de 1,3-oxazin-2-onas que incorporan en su estructura un átomo de bromo, procedimiento de obtención y uso

Inventores: Martínez del Campo, T.; Toledano, M.; Almendros, P.

Número de aplicación: P202030527.

Año: 2020.

Propietarios: CSIC y UCM.

Países: España.

TESIS DOCTORALES

Estudio de la Reactividad de Sistemas Insaturados frente a Zwitteriones Tipo Koshar. Aplicaciones Sintéticas

Carlos Lázaro Milla.

Universidad Complutense de Madrid (UCM). Departamento de Química Orgánica. Facultad de Ciencias Químicas. 27/11/2019.

Dirección: Pedro Almendros y Benito Alcaide.

TRABAJOS FIN DE MÁSTER

Nuevas Metodologías Sintéticas Basadas en Alenos, Alquinos y Heterociclos Bioactivos.

Jon Macicior Michelena.

Universidad Complutense de Madrid (UCM). Facultad de Ciencias Químicas (Departamento de Química Orgánica). 2019.

Dirección: JPedro Almendros y Benito Alcaide.

Nuevas Metodologías Sintéticas Basadas en Alenos, Alquinos y Heterociclos Bioactivos.

Miguel Ángel Aleñá Rodríguez.

Universidad Complutense de Madrid (UCM). Facultad de Ciencias Químicas (Departamento de Química Orgánica). 2019.

Dirección: Pedro Almendros y Teresa Martínez.

Síntesis de Bis(Carbazoles), Helicenos y Fluorenos. Estudio de sus Propiedades Fotofísicas

Juan González de Miguel.

Universidad Complutense de Madrid (UCM). Facultad de Ciencias Químicas (Departamento de Química Orgánica). 2019.

Dirección: Pedro Almendros y Cristina Aragoncillo.

Nuevos Procesos de Ciclación Basados en Heterociclos Bioactivos

Alejandro Murillo Lizcano.

Universidad Complutense de Madrid (UCM). Facultad de Ciencias Químicas (Departamento de Química Orgánica). 2019.

Dirección: Pedro Almendros y Amparo Luna.

TRABAJOS FIN DE GRADO

Nuevos Procesos de Ciclación Basados en Heterociclos Bioactivos

David García Vieira.

Universidad Complutense de Madrid (UCM). Facultad de Ciencias Químicas. (Departamento de Química Orgánica). 2019.

Dirección: Pedro Almendros y Amparo Luna.

OTROS TRABAJOS DIRIGIDOS (prácticas externas en empresa, prácticas de formación profesional, etc.)

Reactividad de Alenos en presencia de Metales

Ángela Vales Estepa.

Universidad Rey Juan Carlos. Escuela de Ciencias Experimentales (ESCET). Julio 2020.

Preparación de Moléculas Orgánicas de Estructura Novedosa

Marta Tiemblo Martín.

Universidad Complutense de Madrid. 03/06/2019 - 31/08/2019.

PREMIOS Y RECONOCIMIENTOS

Profesor Honorífico de la Universidad Complutense de Madrid (2017-actualidad). Nombramiento del Rector de la UCM a propuesta del Departamento de Química Orgánica de la Facultad de Ciencias Químicas.

OTROS

Docencia universitaria

Profesor en la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense de Madrid del Programa de Doctorado en Química Orgánica (Programa de Doctorado con Mención hacia la Excelencia otorgado por el Ministerio de Educación, Ref. MEE2011-0052) del Curso de Formación Avanzada "Síntesis de compuestos orgánicos: Nuevas sustancias, nuevas transformaciones y nuevas técnicas de preparación" durante los cursos académicos 2018/19 y 2019/20.

Grupo de Oligosacáridos y Glicosistemas



Personal investigador

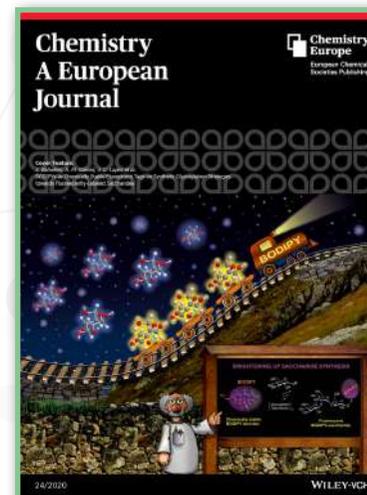
José Cristóbal López Pérez
Ana M. Gómez López
Clara Uriel Arias

Personal de apoyo

Marina Rodríguez Yáñez
Juan Antonio Ventura Toledano
Jennifer Barato Garrido
Diego Raúl Pozas

HITOS DESTACADOS

Se ha implementado por primera vez, y de manera general, el uso de BODIPYs como marcadores cromofóricos en la síntesis de oligosacáridos, de manera que facilitan la estrategia sintética mediante la visualización de los intermedios sintéticos, y la posible detección de los oligosacáridos marcados con el colorante mediante microscopía.

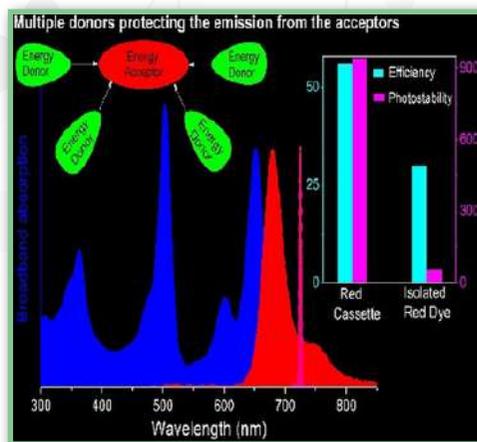


El grupo desarrolla su actividad investigadora en dos áreas de investigación que han mostrado ser complementarias:

- 1) Desarrollo de aspectos básicos de la química de carbohidratos con aplicaciones potenciales en biología y biomedicina.
- 2) Desarrollo de fluoróforos con propiedades físicas y fotofísicas mejoradas.

Estos dos temas de investigación han mostrado una sinergia que se está estudiando en la actualidad y que tiene importantes implicaciones, (por ejemplo. en la síntesis de productos bioactivos con marcaje cromofórico, el acceso a glico-fluoróforos con solubilidad mejorada en disolventes polares, y el acceso a cromóforos quirales con propiedades quiroópticas relevantes).

Se ha desarrollado un multicassette cromofórico basado en unidades de BODIPY, con propiedades laser sobresalientes.



PUBLICACIONES DESTACADAS

Santana, A. G., Montalvillo-Jiménez, L., Díaz-Casado, L., Mann, E., Jiménez-Barbero, J., Gómez, A. M., Asensio, J. L. "Single-Step Glycosylations with C-13-Labelled Sulfoxide Donors: A Low-Temperature NMR Cartography of the Distinguishing Mechanistic Intermediates" (2021) *Chem. Eur. J.* 27 xxxxx.

DOI: 10.1002/chem.202003840

Uriel, C., Permingeat, C., Ventura, J., Avellanal-Zaballa, E., Bañuelos, J., García-Moreno, I., Gómez, A. M., López, J. C. "BODIPYs as Chemically Stable Fluorescent Tags for Synthetic Glycosylation Strategies towards Fluorescently Labeled Saccharides" (2020) *Chemistry a European Journal* 26, 5388-5399.

DOI: 10.1002/chem.201905780

Isca, V.M.S., Andrade, J., Fernandes, A.S., Paixão, P., Uriel, C., Gómez, A.M., Duarte, N., Rijo, P. "In Vitro Antimicrobial Activity of Isopimarane-Type Diterpenoids" (2020) *Molecules* 25, 4250.

DOI: 10.3390/molecules25184250

Santana, A. G., Montalvillo-Jiménez, L., Díaz-Casado, L., Corzana, F., Merino, P., Cañada, F. J., Jiménez-Osés, G., Jiménez-Barbero, J., Gómez, A. M., Asensio, J. L. "Dissecting the Essential Role of Anomeric β -Triflates in Glycosylation Reactions" (2020) *J. Am. Chem. Soc.* 142, 12501-12514.

DOI: 10.1021/jacs.0c05525

Avellanal-Zaballa, E., Ventura, J., Gartzia-Rivero, L., Bañuelos, J., García-Moreno, I., Uriel, C., Gómez, A. M., López, J. C. "Towards Efficient and Photostable Red-Emitting Photonic Materials Based on Symmetric all-BODIPY-Triads, -Pentads, and -Hexads" (2019) *Chemistry a European Journal* 25, 1495-14971.

DOI: 10.1002/chem.201903804

Oliden, A., Sola-Llano, R., Bañuelos, J., García-Moreno, I., Uriel, C., López, J. C., Gómez, A. M. "Tuning the photonic behavior of symmetrical bis-BODIPY architectures: the key role of the spacer moiety" (2019) *Frontiers in Chemistry*, 7, 801.

DOI: 10.3389/fchem.2019.00801

Gómez, A. M., López, J. C. "Carbohydrates and BODIPYs: Access to bioconjugatable and water-soluble BODIPYs" (2019) *Pure Applied Chemistry*, 91, 1073-1083.

DOI: 10.1515/pac-2019-0204

Uriel, C., Solá-Llano, R., Bañuelos, J., Gómez, A. M., López, J. C. "A Malonyl-Based Scaffold for Conjugatable Multivalent Carbohydrate-BODIPY Presentations" (2019) *Molecules* 24, 2050.

DOI: 10.3390/molecules24112050

Montalvillo-Jiménez, Santana, A. G., Corzana, Jiménez-Osés, G., Jiménez-Barbero, J., Gómez, A. M., Asensio, J. L. "The impact of aromatic stacking on glycoside reactivity: balancing CH/ π and cation/ π interactions for the stabilization of glycosyl-oxocarbenium ions" *J. Am. Chem. Soc.* 2019, 134, 13372-13384.

DOI: 10.1021/jacs.9b03285

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

Carbohidratos y bodipys: explorando las propiedades mejoradas de nuevos glicobodipys.

Referencia: RTI2018-094862-B-I00

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia Innovación y Universidades.

Entidades participantes: CSIC.

Duración: enero 2019 - diciembre 2021.

Investigador/es principal/es: José Cristóbal López Pérez y Ana María Gómez López.

LIBROS Y CAPÍTULOS DE LIBROS

Gómez, A. M., López, J. C. "Alkynedicobalt complexes in carbohydrates: Synthetic applications" en Rauter, A. P., Christensen, B. E., Somsak, L., Kosma, P., Adamo, R. (eds), *Recent Trends in Carbohydrate Chemistry*, cap. 3, Elsevier, 2020, pp 101-138.

PATENTES Y TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA

Derivados de 4,4-difluoro-4-bora-3a,4a-diaza-s-indaceno

Inventores: Gómez, A. M., López, J. C., Uriel, C.

Número de aplicación: P202030300.

Año: 2020.

Propietarios: CSIC.

Países: España.

VISITANTES NACIONALES Y EXTRANJEROS

Dylan Grenier.

Período de la estancia: Septiembre 2020 - Agosto 2021.

Institución origen: Ecole Supérieure de Chimie Physique Electronique de Lyon.

País: Francia.

TESIS DOCTORALES

Diseño, síntesis y reactividad de nuevos sistemas Ferrier-Nicholas en derivados de piranosas

Silvia Miranda Alcázar.

Universidad de Alcalá (UAH), Departamento de Química Orgánica y Química Inorgánica. Facultad de Farmacias. Marzo 2019.

Dirección: Ana María Gómez López, José Cristóbal López Pérez.

TRABAJOS FIN DE MÁSTER

Síntesis de híbridos BODIPY-carbohidrato

Angel Gutiérrez Redondo.

Master interuniversitario (UCM, UAH, CEU), Junio 2019.

Dirección: José Cristóbal López Pérez, Clara Uriel Arias.

Síntesis de BODIPYs Diméricos conjugados

Arturo Llamosí Fornés.

Master interuniversitario (UCM, UAH, CEU), Junio 2019.

Dirección: José Cristóbal López Pérez, Ana María Gómez López.

Diseño de nuevos fluoróforos basados en híbridos BODIPY-carbohidrato

Paula Llanos Fernandez-Valmayor.

Master interuniversitario (UCM, UAH, CEU), Junio 2020.

Dirección: José Cristóbal López Pérez, Clara Uriel Arias.

Síntesis de cassettes multicromofóricos quirales basados en derivados de BODIPYs

Mario Domínguez García.

Máster interuniversitario (UCM, UAH, CEU), Junio 2020.

Dirección: José Cristóbal López Pérez, Ana María Gómez López.

TRABAJOS FIN DE GRADO

Empleo de BODIPYs como marcadores químicos para la localización de biomoléculas: estudio sintético y computacional

Inés María García Pérez.

Universidad Complutense de Madrid (UCM). Facultad de Ciencias Químicas. Grado en Bioquímica. Junio 2020.

Dirección: Agatha Bastida, Clara Uriel Arias.

OTROS TRABAJOS DIRIGIDOS (prácticas externas en empresa, prácticas de formación profesional, etc.)

Synthèse et caractérisation chimique des nouveaux dérivés du BODIPY avec des propriétés biologiques et spectroscopiques d'intérêt

Dylan Grenier.

Ecole Supérieure de Chimie Physique Electronique de Lyon (Francia). Septiembre 2020 - agosto 2021.

Dirección: Clara Uriel Arias y José Cristóbal López Pérez.

Síntesis de conjugados carbohidrato-BODIPY

Miriam San Eusebio Álvaro.

Universidad Complutense de Madrid. Facultad de Ciencias Químicas. Grado en Química. Junio - Octubre 2019.

Prácticas de empresa.

Dirección: Ana María Gómez López.

Síntesis y derivatización de BODIPYs conjugables

Beatriz Pino Leal.

Universidad Alcalá de Henares. Facultad de Farmacia. Grado en Farmacia. Julio - Septiembre 2020.

Prácticas de empresa.

Dirección: Ana María Gómez López y José Cristóbal López Pérez.

OTROS

Docencia universitaria

Profesor Asociado, Departamento de Química Orgánica e Inorgánica, Facultad de Farmacia (UAH) Curso 2018-2019; 2019-2020; 2020-2021 (José Cristóbal López Pérez).

Cursos de especialización

Docencia en Máster Interuniversitario de Descubrimiento de Fármacos (CEU, UAH, UCM) (José Cristóbal López Pérez).

Departamento de Síntesis, Estructura y
Propiedades de los Compuestos Orgánicos
(SEPCO)

Grupo de Investigación del Dr. Pedro
Noheda (PNRG)



Personal investigador

Pedro Noheda Marín

Personal de apoyo

Nuria Tabarés Cantero

David Herrero Ruíz

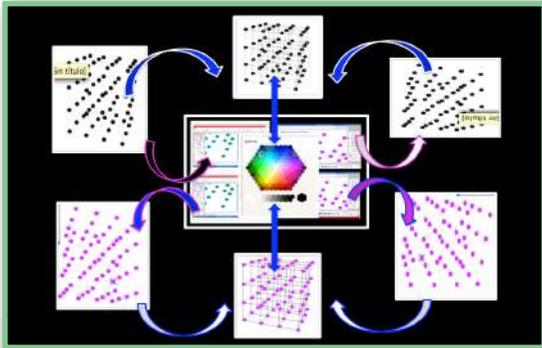
Modelos trans-disciplinares (lógicos, lingüísticos, matemáticos y computacionales) propios y de sus representaciones formales simbólicas (Teoremas de la Representación aplicados a *Imaging and Visualization Formal*). Nuevas firmas lógicas, matemáticas y computacionales tanto de numerales y sistemas numéricos como de sus colectividades y de sus operaciones lógicas y/o aritméticas. Éstas permiten reinterpretaciones y representaciones formales de los conceptos y argumentos tales como: i.- Paridad, Imparidad y Primalidad. ii.- El argumento de la diagonal (Cantor), de la numeración de Gödel y de sus teoremas referidos a la complitud/incomplitud de sistemas axiomáticos. iii.- Procesos de generación y de ruptura de la Simetría Puntual y Continua. Además, permiten nuevas aproximaciones formales tanto del problema de la métrica, la dimensionalidad y estandarización lógico-matemática en espacios abstractos (cibespacio y espacio cognitivo, incluidos) como al de la medida de magnitudes físicas en el espacio físico (clásico, relativista y/o cuántico.)

Computación Semiótica Post-Cuántica. Diseño *ad hoc* de nuevos algoritmos eficaces y eficientes propios para la resolución, verificación y representación (*Formal Imaging and Visualization; FI&V*) implicados en problemas de tipo “P versus NP” en relación con ambas, la complejidad intrínseca de la función de partición (Teoría de Números, Combinatoria y Estadística) y con la complejidad computacional de Kolmogorov. Diseño de hardware *ad hoc*.

Los objetivos, retos y desafíos tanto metodológicos como prácticos del Grupo de Investigación PNRG del Departamento SEPCO (IQOG-CSIC) durante el periodo 2019-2020 se engarzan y pretenden potenciar sinérgicamente los que conforman el Plan Estratégico CSIC 2018-2021. Su actividad investigadora científico-técnica se ha focalizado en las temáticas 2 (*Origins, (Co)Evolution and Diversity of Life; 2.1. The origins of life: from Chemistry to Biology; 2.8. Synthetic Life*), 11 (*Intelligence, Robotics and Data Science; 11.3 Matching Learning and Data Science; 11.5. Computational Cognitive Models; Smart Cybersecurity (Blockchain)*) y 12 (*Our Future? Space Colonization and Exploration. 12.5. In search of Life; 12.6. Pushing the limits of Space technology*). La labor investigadora e innovadora del PNRG se ha centrado en el desarrollo de:

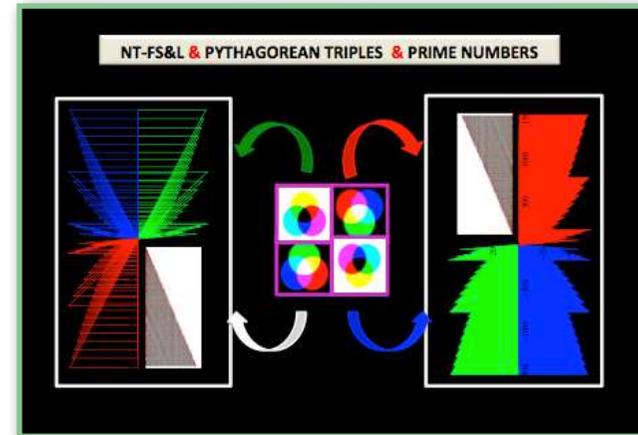
HITOS DESTACADOS

La Incorporación al aparato lógico-lingüístico-matemático-computacional de NT-FS&L de: i.-un proceso de inducción para enumeración y conteo (incluidos de símbolos) de numerales representando números naturales pares (incluido al cero) en sistemas numéricos de base impar y/o de números naturales impares en sistemas numéricos de base par; ii.- el concepto de numeral de Church tal como fue inicialmente propuesto por Alonso Church en el Cálculo Lambda sin tipos; ha permitido la superposición y entrelazamiento entre diferentes Grupos de Permutación (de símbolos pertenecientes a diferentes alfabetos y/o otros sistemas formales representación provenientes, por ejemplo, de Teoría de Grafos), Grupos de Simetría, Grupos de Matrices (especialmente, han sido utilizadas: Matrices cuadradas de conectividad y de adyacencia, Matrices Hadamard; Matrices triangulares tales como las pertenecientes al Grupo de Heisenberg). Todo ello, ha permitido a desarrollar nuevo Know-How eficaz y eficiente en el Formal Imaging & Visualization (FI&V) de Información bien sea esta Clásica, Relativista y/o Cuántica.



Extensión del *Noheda-Tabarés Formal System and Language* (NT-FS&L), focalizado inicialmente tanto a lo referido al cálculo, verificación y distribución como a la representación (*Formal Imaging and Visualization*, FI&V) del conjunto de los números Naturales (N), de sus subconjuntos y la de sus operaciones lógico-aritméticas;

a la de los números Enteros (Z), Racionales (Q), Reales (R) y Complejos (C). En especial, NT-FS&L permite FI&V de numerales representando/referentes a números algebraicos, trascendentes (en especial, nos hemos centrado en los números de Liouville, ϕ , π y e), naturales primos de Pitágoras, Gauss, Fermat, Mersenne, Hilbert y Ramanujan) y de naturales compuestos (números perfectos).



Desarrollo de *Know-How*, principalmente en *Symbolic Pattern Recognition* y *Deep Machine Learning* (diseño de software y hardware *ad hoc*), orientado a la modelización/simulación de estructuras, sistemas y procesos y de elevada complejidad procedentes de ciencias de la vida, del espacio, de las ciencias formales y de la computación. En ciencias de la vida, se ha abordado: 1. La estructura y dinámica de la cápside del virus del Zika [ZIKV; Dominio: *Riboviria*; Grupo: IV (Virus ARN monocatenario positivo); Reino: *Orthoviriae*; Filo: *Kitrinoviricota*; Familia: *Flaviviridae*; Género: *Flavivirus*; Especie: Virus Zika] y, se ha iniciado la organización y expresión de su información genética. 2. La estructura y funcionalidad de los microtúbulos. En ciencias de la computación, nos hemos centrado en la en el desarrollo de nuevos sistemas criptográficos fundamentados en NT-FS&L y en formalización de la metodología Blockchain con el objetivo de superar las amenazas, especialmente en Ciberseguridad, que la irrupción, desarrollo y rápida evolución de la Computación Cuántica (hardware y software) a día de hoy ya son una realidad a afrontar.

PUBLICACIONES DESTACADAS Y TRANSFERENCIA TECNOLÓGICA

Secretos industriales

NT-FORMAL FORMAL SYSTEM AND LANGUAGE (NT-FS&L) FOCUSED ON THE REPRESENTATION AND IMAGING FORMAL OF SUPERPOSITION AND ENTANGLEMENT OF PERMUTATION GROUPS OF SYMBOLS (NT- COMPUTATIONAL SEMIOTICS. Part I).

Autores: NOHEDA MARÍN, P.; TABARÉS CANTERO, N.

Fecha de Aplicación: 14/12/2019.

Fecha de Registro Notarial: 16/12/2019.

Propietario Exclusivo: CSIC.

NT-FORMAL FORMAL SYSTEM AND LANGUAGE (NT-FS&L) FOCUSED ON THE REPRESENTATION AND IMAGING FORMAL OF SUPERPOSITION AND ENTANGLEMENT OF PERMUTATION GROUPS OF SYMBOLS (NT- COMPUTATIONAL SEMIOTICS. Part II).

Autores: NOHEDA MARÍN, P.; TABARÉS CANTERO, N.

Fecha de Aplicación: 14/12/2019.

Fecha de Registro Notarial: 16/12/2019.

Propietario Exclusivo: CSIC.

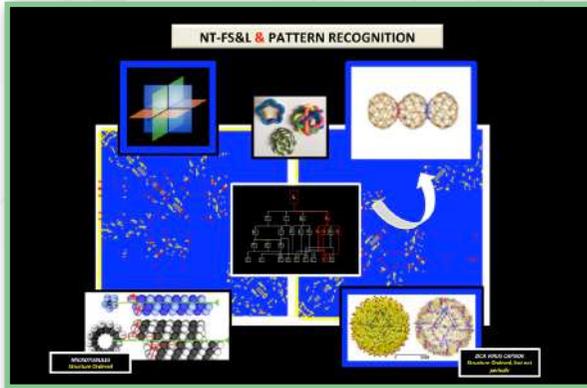
NT-FORMAL SYSTEM AND LANGUAGE (NT-FS&L) FOCUSED ON THE REPRESENTATION AND IMAGING FORMAL OF NUMERALS AND NUMERAL SYSTEMS. (NT-COMPUTATIONAL SEMIOTICS. Part. III. PATTERN RECOGNITION A.

Autores: NOHEDA MARÍN, P.; TABARÉS CANTERO, N.

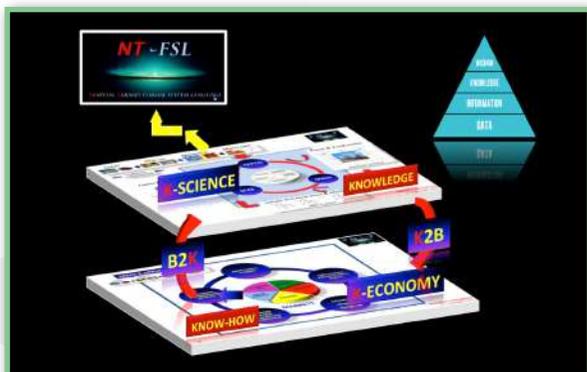
Fecha de Aplicación: 29/12/2020.

Fecha de Registro Notarial: 29/12/2020.

Propietario Exclusivo: CSIC.



Concesión por la Oficina Española de Patentes y Marcas (OEPM) de *Noheda-Tabarés Formal System & Language (NT-FSL)* como marca registrada (Clases 41 y 42; propiedad del CSIC). En la actualidad, 4 creaciones intelectuales y 10 secretos Industriales (4 de ellos registrados notarialmente en el periodo 2019-2020) conforman tanto, el portfolio de propiedad intelectual/industrial asociado a *NT-FSL*® (propiedad exclusiva del CSIC) como, las bases conceptuales y el *Know How* de la Computación Semiótica Post-Cuántica.



NT-FORMAL SYSTEM AND LANGUAGE (NT-FS&L) FOCUSED ON THE REPRESENTATION AND IMAGING FORMAL OF NUMERALS AND NUMERAL SYSTEMS. (NT-COMPUTATIONAL SEMIOTICS. Part. IV. PATTERN RECOGNITION B.

Autores: NOHEDA MARÍN, P.; TABARÉS CANTERO, N.
Fecha de Aplicación: 29/12/2020.
Fecha de Registro Notarial: 29/12/2020.
Propietario Exclusivo: CSIC.

Marca y dominio registrados

Marca registrada: NOHEDA-TABARÉS FORMAL SYSTEM AND LANGUAGE; NT-FSL®

Solicitantes VATC-CSIC: NOHEDA MARÍN, P.; TABARÉS CANTERO, N.
Fecha Presentación de Solicitud: 18/06/2019.
Fecha Concesión Registro (Oficina Española de Patentes y Marcas, OEPM): 24/03/2020.
Número de Marca (OEPM): 4.024.135.
Clases: 41 y 42.



Titular de la Marca Registrada: CSIC.

Dominio registrado: nt-fsl.es

Identificador: 12ª81D8-ESNIC-F5.

Fecha de Alta: 15/07/2019.

Agente Registrador: Pons Patentes y Marcas Int.

Titular: CSIC.

LIBROS Y CAPÍTULOS DE LIBROS

Título del capítulo: Smart Cybersecurity (Chapter 8).

Editores: Arroyo Guardado, D., Brox Jiménez, P.; Páginas Chapter 8: 133-172.

Título del libro: White Paper on Artificial Intelligence and Data Science. CSIC's Strategic Roadmap.

Editor: Carles Sierra.

Editoriales: CSIC y Digital CSIC.

Año: 2020.

Autores: Arroyo Guardado, D., Brox Jiménez, P., Godoy, J., Villagra J., Mueller, H., Gallego, V., Kosgodagan, A., Naveiro, R., Rios Insua, D., Rodríguez González, D., Hidalgo Villena, S., Degli Esposti, S., Noheda Marín, P.

Grupo de Péptidos y Compuestos Aromáticos (PEPARO)



Personal investigador

Bernardo Herradón García

Personal en formación

Cristina Santamaría Olivera
Yisset Nápoles Santana
Daniel Serrano Rodríguez
Irene de la Iglesia del Pino
Sara Fernández Pandiello
Laetitia Bourgeois

Nuestros temas de investigación más recientes abarcan un amplio rango de la química, incluyendo la síntesis orgánica, compuestos bioactivos, estructura e interacciones de compuestos aromáticos y péptidos, toxicología computacional, materiales nanoestructurados (preparación, caracterización y propiedades), diseño y preparación de líquidos iónicos para electrolitos de baterías y condensadores, y materiales composites derivados de grafeno.

PUBLICACIONES DESTACADAS

Vélez, J. F., Vázquez-Santos, M. B., Amarilla, J. M., Herradón, B., Mann, del Río, C., Morales, E. "Geminal pyrrolidinium and piperidinium dicationic ionic liquid electrolytes. Synthesis, characterization and

cell performance in LiMn₂O₄ rechargeable lithium cells". (2019) *J. Power Sources*, 439, 227098.

DOI: 10.1016/j.jpowsour.2019.227098

Herradón, B. "Z = 43, tecnecio, Tc. El elemento más peculiar de la tabla periódica". (2019) *Anales de Química*, 115, 105.

<https://analesdequimica.es/index.php/AnalesQuimica/article/view/1421>

Herradón, B. "Grafeno y COVID-19: aspectos científicos y sociales". (2020) *Boletín del Grupo Español del Carbón 2020*, 57, 4-15.

http://www.gecarbon.org/Boletines/Boletin/BoletinGEC_057.pdf

PARTICIPACIONES DESTACADAS EN CONGRESOS

La tabla periódica de los elementos químicos: su papel en la ciencia de los materiales. B. Herradón. Conferencia inaugural en el congreso 'Día Mundial de los Materiales', organizado por la

Sociedad Española de Materiales (SOCIEMAT). ETSI de Caminos, Canales y Puertos, UPM. 6 de noviembre de 2019.

La historia y el arte como herramientas en la enseñanza de la química. B. Herradón. Conferencia inaugural en el "II Congreso de Didáctica de la Química". Congreso online organizado por el Colegio y la Asociación de Químicos de Galicia (Santiago de Compostela). 27 de noviembre de 2020.

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

Dispositivos de almacenamiento eléctrico guiados por aspectos medioambientales: de los materiales a prototipos de baterías de ion-sodio

Referencia: RT2018-095425-B-100 .

Entidad financiadora: MINECO.

Entidades participantes: IQOG-CSIC, ICMM-CSIC, ICTP-CSIC.

Duración: 1 de enero de 2019 - 31 de diciembre de 2021.

Investigador/es principal/es: José Manuel Amarilla Álvarez.

CONVENIO CON EMPRESAS

Síntesis de impurezas de APIs

Entidad financiadora: Química Sintética (grupo CHEMO).

Duración: de febrero de 2020 a febrero de 2021.

Investigador/es principal/es: Bernardo Herradón García.

LIBROS Y CAPÍTULOS DE LIBROS

Herradón, B. "Una tabla para ordenarlos a todos", en A. Parra y Q. Garrido (eds.), *CIENCIA, y el "Cosmos" del siglo XXI*, 2020, 157-160.

<https://cienciayelcosmosdelsigloxxi.blogspot.com/>

ESTANCIAS

Bernardo Herradón García.

Período de la estancia: 29 de abril a 9 de mayo de 2019.

Institución destino: Cape Peninsula University of Technology, Ciudad del Cabo.

País: Sudáfrica.

TRABAJOS FIN DE MÁSTER

Síntesis y estructura de híbridos aminoácido-antraceno

Cristina Santamaría Olivera.

Universidad de Alcalá, Universidad San Pablo-CEU y Universidad Complutense de Madrid (máster interuniversitario), 2019.

Dirección: Bernardo Herradón.

Síntesis de híbridos péptido-fluorenona

Yiset Nápoles Santana.

Universidad de Alcalá, Universidad San Pablo-CEU y Universidad Complutense de Madrid (máster interuniversitario), 2019.

Dirección: Bernardo Herradón.

Experimentos para la optimización de líquidos iónicos como electrolitos para baterías de sodio

Daniel Serrano Rodríguez.

Universidad Autónoma de Madrid, 2020.

Dirección: Bernardo Herradón.

Híbridos péptido-areno: inhibidores potenciales de la proteasa calpaína

Irene de la Iglesia del Pino.

Universidad de Alcalá, Universidad San Pablo-CEU y Universidad Complutense de Madrid (máster interuniversitario), 2019.

Dirección: Bernardo Herradón.

OTROS TRABAJOS DIRIGIDOS (prácticas externas en empresa, prácticas de formación profesional, etc.)

Síntesis de disolventes eutécticos profundos y líquidos iónicos para usar como electrolitos para baterías

Laetitia Bourgeois.

École Supérieure de Chimie Physique Électronique de Lyon, 2019.

Dirección: Bernardo Herradón.

DIVULGACIÓN CIENTÍFICA

Artículos

Reseña del libro El alfabeto del universo. La tabla periódica de los elementos. B. Herradón, *Anales de Química* 2020, 116, 287-288.

<https://analesdequimica.es/index.php/AnalesQuimica/article/view/1513/2087>

50 Aniversario de la Tabla Periódica de los Elementos. B. Herradón, Revista *ARQUICMA* 29 de noviembre de 2019.

Año Internacional de la Tabla Periódica de los Elementos Químicos. B. Herradon, *Enlace* 2019, 43, 16-17.

Ponencias

Bernardo Herradón ha impartido alrededor de 50 conferencias en diversas instituciones (fundaciones, centros culturales, etc.), universidades y centros de enseñanza preuniversitaria.

Sitios en internet

Durante el periodo 2019-2020, Bernardo Herradón ha gestionado dos páginas web, un canal de YouTube, una página de Facebook, y cinco grupos de Facebook.

Radio/TV/Prensa

En el periodo 2019-2020, Bernardo Herradón ha participado en 40 programas de *A Hombros de Gigantes* (RNE). También ha colaborado en una docena de actividades periodísticas (artículos en periódicos y programas de televisión).

Juegos divulgativos/educativos

Bernardo Herradón, en colaboración con Carmen Arribas (UPM), han diseñado la baraja de cartas sobre la Tabla Periódica de los Elementos Químicos, con motivo del Año Internacional (año 2019).

<https://www.grupo-sm.com/es/post/tabla-periodica>

Olimpiadas científicas

Bernardo Herradón coordinó la organización de la Olimpiada de Química de Madrid (2019), los Premios a las Mejores Tesis Doctorales en la Comunidad de Madrid (2019) y el concurso 'Elige un elemento' (2019).

Jurado en certámenes científicos

En los años 2019 y 2020, Bernardo Herradón participó como jurado en 11 certámenes científicos, educativos y divulgativos.

Ferias científicas

Bernardo Herradón participó en la Feria Madrid por la Ciencia (2019), impartiendo una conferencia, presentando la baraja de cartas sobre la Tabla Periódica de los Elementos Químicos, y organizando talleres prácticos.

OTROS

Docencia universitaria

Bernardo Herradón impartió la conferencia '2019 Año Internacional de la Tabla Periódica de los elementos químicos: el impacto en la sociedad. La aportación de los científicos españoles' en el curso de verano '2019 Año internacional de la tabla periódica de los elementos químicos. El impacto de la química en la sociedad', celebrado en El Escorial entre el 17 y el 19 de julio de 2019.

Bernardo Herradón impartió la conferencia 'La tabla periódica de los elementos químicos: icono cultural e impacto en la sociedad' en el curso de verano 'Divulgar ciencia en el siglo XXI', celebrado en la Universidad de Alicante el 4 y 5 de septiembre de 2019

Bernardo Herradón impartió la ponencia 'Descubrimiento de fármacos: aspectos sociales e históricos', que fue la conferencia inaugural del 'Máster sobre Descubrimiento de fármacos' de la UCM, UAH, USP-CEU. La conferencia se impartió en la facultad de Farmacia de la UCM el 26 de septiembre de 2019.

Bernardo Herradón impartió la ponencia 'Biotecnología en la sociedad', en el curso 'XIV Curso de biotecnología elemental 2013 *Biotechnology Explorer*', organizado por la Universidad Autónoma de Madrid. 1 de julio de 2020.

Cursos de especialización

Bernardo Herradón impartió la ponencia 'El desarrollo de los fármacos: origen del negocio farmacéutico. Su papel en la sociedad y la salud' en el curso de formación de profesores (CTIF-Madrid Sur) 'Controversias en biología y biomedicina', impartida en Leganés el 13 de mayo de 2019.

Actividades en sociedades científicas

Bernardo Herradón ha sido presidente de la Sección Territorial de Madrid de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ-STM), vocal de la junta de gobierno de la Asociación de Químicos de Madrid (AQM) y asambleísta de la Asociación Nacional de Químicos de España (ANQUE).

Otras tareas científicas

Bernardo Herradón ha sido evaluador de la National Research Foundation de Sudáfrica, editor asociado de la revista *Biocatalysis and Biotransformations* y miembros de los comités científicos de los congresos ECSOC-23 (2019, <https://ecsoc-23.sciforum.net/>) y ECSOC-24 (2020, <https://ecsoc-24.sciforum.net/>).

Grupo de Química Bio-Organometálica



P
E
R
S
O
N
A
L

Personal investigador

M^a del Carmen de la Torre Egido

Personal en formación

María Moreno Latorre

Enrique Francés Poveda

Resurrección Rodríguez Segovia

Mariana Leiferman Tamames

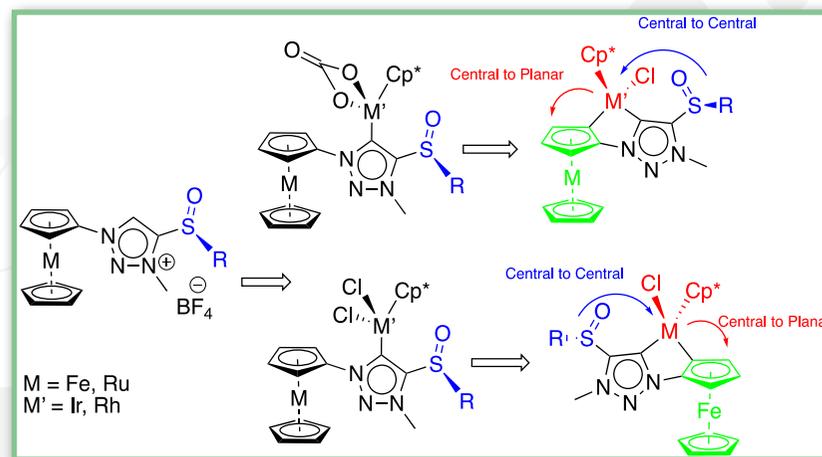
Postdoctorales

Marta García-Avello

En nuestro Grupo estamos interesados en la síntesis de nuevas entidades moleculares organometálicas conteniendo productos naturales, para el estudio de sus propiedades fisicoquímicas y biológicas. Con este objetivo, desarrollamos metodologías sintéticas basadas en la modificación estructural de productos naturales comerciales y sus derivados, utilizando nuevos complejos de metales de transición, bien como catalizadores, o como reactivos en cantidades estequiométricas, desarrollados por nosotros. Recientemente, debido al incremento de cepas bacterianas resistentes a los antibióticos disponibles, nos hemos centrado en el desarrollo de nuevos compuestos organometálicos, derivados de sistemas β -lactámicos, con posible actividad antibacteriana.

HITOS DESTACADOS

Desarrollo de metodología sintética para la generación de quiralidad central y planar en una sola etapa en complejos organometálicos



PUBLICACIONES DESTACADAS

1) Sierra, M. A.; Casarrubios, L.; de la Torre, M. C. Bio-Organometallic Derivatives of Antibacterial Drugs. *Chem. Eur. J.* 2019, 25, 7232-7242.

DOI: 10.1002/chem.201805985

2) Sierra, M. A.; de la Torre, M. C. 1,2,3-Triazolium-Derived Mesoionic Carbene Ligands Bearing Chiral Sulfur-Based Moieties: Synthesis, Catalytic Properties, and Their Role in Chirality Transfer. *ACS Omega* 2019, 4, 12983–12994.

DOI: 10.1021/acsomega.9b01285

3) García-Avello, M.; de la Torre, M. C.; Sierra, M. A.; Gornitzka, H.; Hemmert, C. Central (S) to Central (M=Ir, Rh) to Planar (Metallocene, M=Fe, Ru) Chirality Transfer Using Sulfoxide-Substituted Mesoionic Carbene Ligands: Synthesis of Bimetallic Planar Chiral Metallocenes. *Chem. Eur. J.* 2019, 25, 13344-13353.

DOI: 10.1002/chem.201902102

4) García-Avello, M.; de la Torre, M. C.; Guerrero-Martínez, A.; Sierra, M. A.; Gornitzka, H.; Hemmert, C. Chiral-at-Metal BODIPY-Based Iridium(III) Complexes: Synthesis and Luminescence Properties. *Eur. J. Inorg. Chem.* 2020, 4045-4053.

DOI: 10.1002/ejic.202000745

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

Moléculas Biofuncionales Moduladas por Metales de Transición: Síntesis y Aplicaciones

Referencia: CTQ2016-77555-C2-2-R

Entidades Participantes: CSIC-UCM.

Entidad financiadora: Ministerio de Economía, Industria y Competitividad.

Duración: desde: 30-12-2016 hasta: 31-12-2020.

Investigador responsable: Dra. María del Carmen de la Torre Egido.

TESIS DOCTORALES

Estudio de la Transferencia de Quiralidad en Sistemas Organometálicos

Marta García-Avello.

Universidad Complutense de Madrid (UCM). Facultad de Ciencias Químicas. Octubre 2019.

Dirección: M. Carmen de la Torre.

OTROS TRABAJOS DIRIGIDOS (prácticas externas en empresa, prácticas de formación profesional, etc.)

Resurrección Rodríguez Segovia.

Prácticas en Empresa.

Universidad Complutense de Madrid (UCM). Departamento de Química Orgánica. (2019-2020).

Directora: M. Carmen de la Torre.

Grupo de Química Farmacéutica de los Compuestos de Azufre y Selenio



Personal investigador

Enrique Domínguez Álvarez

Personal de apoyo

Miguel Benito de Lama

Personal en formación

Noemí Salardón Jiménez

Raquel Segura Molina

Clotilde Sevilla Hernández

Francisco Javier Alonso Martínez

En nuestro grupo se investiga en proyectos que buscan diseñar y sintetizar nuevos selenocompuestos con actividad biológica. Actualmente trabajamos en la síntesis de nuevos selenoésteres simétricos y asimétricos como agentes antitumorales, como compuestos antimicrobianos, como compuestos disgregadores del biofilm bacteriano y como inhibidores de los mecanismos a través de los cuales las células tumorales o las cepas bacterianas resistentes escapan de la acción de los medicamentos. Nos centramos en la evaluación en líneas tumorales de cáncer de colon, y en la actividad de los compuestos contra bacterias como *Staphylococcus aureus*, *Escherichia coli* y *Salmonella entérica* serovar Typhimurium.

Respecto a los mecanismos de resistencia, trabajamos en la inhibición de las bombas de eflujo, que son unas proteínas

transportadoras de membrana que reconocen sustancias ajenas a la célula para captarlas y expulsarlas fuera. De esta forma reconocen a los medicamentos y los expulsan al exterior, evitando que actúen contra ellos, y por lo tanto escapando a su acción. La evaluación de la actividad biológica se realiza en centros colaboradores internacionales del investigador, en universidades y centros de investigación de Alemania, Hungría, Polonia, República Checa y República Eslovaca.

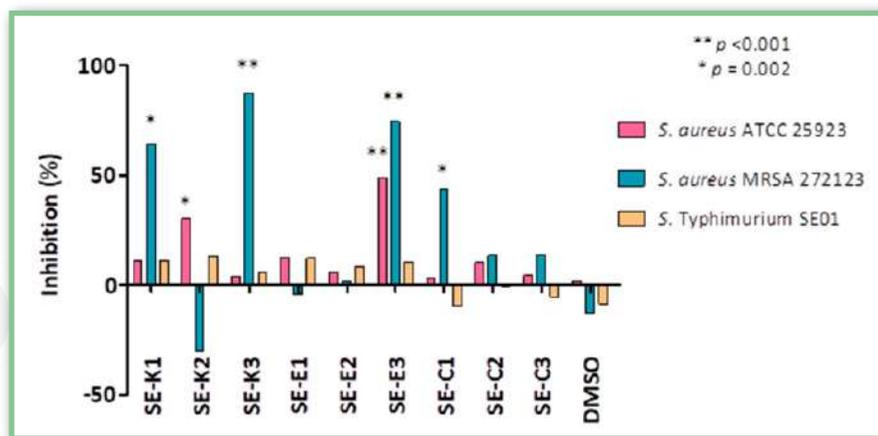
HITOS DESTACADOS

Selenoésteres simétricos con actividad antifúngica y antibacteriana

Se ha obtenido una serie de selenodiésteres y selenotriésteres simétricos con una potente actividad antifúngica y antibacteriana. Los derivados con mayor actividad antifúngica mostraron valores de MIC (concentración mínima inhibitoria) contra diferentes cepas

de *Candida* a bajas concentraciones, entre 0,5 y 4 µg/mL. Aparte, fueron capaces tanto de inhibir la formación del biofilm fúngico (evitando que dicha formación favorezca la resistencia del hongo a los fungicidas) como de disgregar biofilms ya preexistentes. Los resultados se publicaron en *Microorganisms* (De la Cruz-Claure, M.L. et al, 2019, 7, 664).

En cuanto a la actividad antibacteriana, los derivados simétricos más potentes mostraron actividad a concentraciones submicromolares contra *Staphylococcus aureus* ATCC 25923 y *Staphylococcus aureus* MRSA 272123. Estos selenocompuestos simétricos fueron muy efectivos como potenciadores de la actividad de antibióticos contra dichas cepas de *S. aureus*; y además inhibieron fuertemente la formación del biofilm bacteriano. Este trabajo se ha publicado en un artículo en *Microorganisms* (Nové, M. et al, 2020, 8, 566).

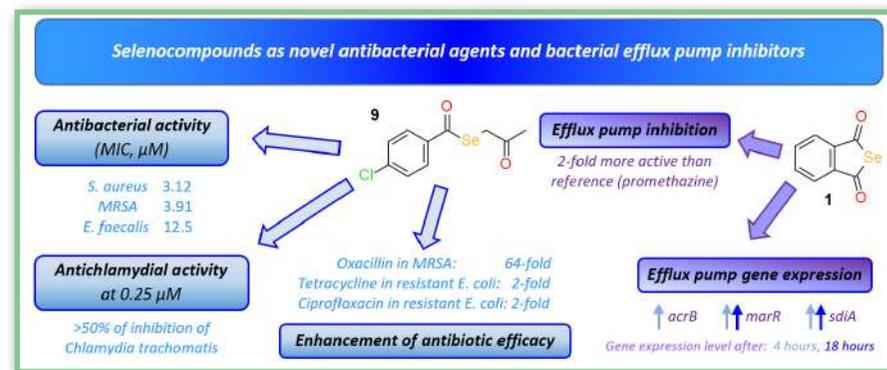


Ciano- y oxoselenoésteres con actividad antibacteriana e inhibidora del biofilm bacteriano

Compuestos previos seleccionados fueron evaluados como antibacterianos, mostrando una potente actividad antibacteriana contra *Staphylococcus aureus* ATCC 25923, contra *Staphylococcus aureus* MRSA 272123 y contra *Chlamydia trachomatis*. De entre los derivados evaluados, un oxoselenoéster potenció además la

actividad del antibiótico oxacilina contra MRSA, reduciendo en un factor de 64 veces la concentración necesaria para matar a la bacteria. Este trabajo se publicó en *Molecules* (Mosolygó, T. et al, 2019, 24, 1487).

La actividad antibacteriana de una segunda serie de compuestos ha sido evaluada en un artículo publicado en *Antibiotics* (Szemerédi, N. et al, 2020, 9, 896), obteniendo de nuevo compuestos que mostraron actividad contra *Staphylococcus aureus* MRSA 272123 a concentraciones submicromolares. Estos derivados inhibieron la comunicación entre bacterias (quorum sensing), impidieron la formación del biofilm tanto en *Staphylococcus aureus* ATCC 25923 como en *Pseudomonas aeruginosa* CCM 3955.

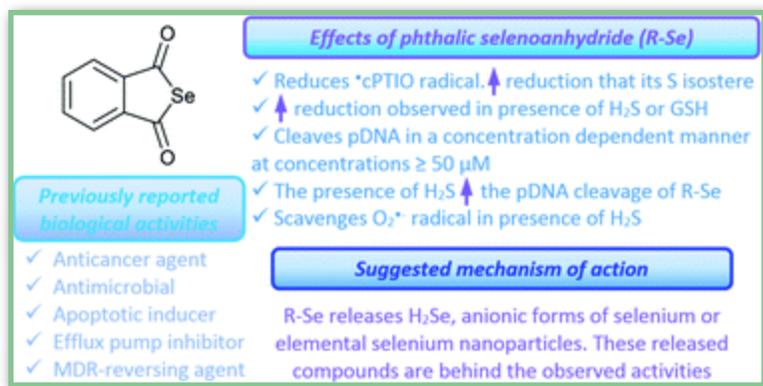


Actividad antitumoral de los selenoésteres y selenoanhidridos

Se ha determinado en un estudio publicado en *Molecules* (Spengler, G., et al, 2019, 24, 336) que, de entre los derivados evaluados, los tres más activos potenciaban con diferentes grados de sinergismo la actividad antitumoral en líneas celulares ejercida por fármacos empleados en quimioterapia como el topotecan, la doxorubicina y la vincristina. Estos fármacos actúan a través de la inhibición de las enzimas DNA topoisomerasas (Top, Dox), o del bloqueo de la formación de los microtúbulos (Vin). Por otro lado, se encontró que los derivados reducían la actividad antitumoral de otros fármacos de quimioterapia como el cisplatino y la ciclofosfamida, que son

agentes alquilantes, poniendo de relieve la importancia de que los mecanismos de acción de fármacos / compuestos administrados en combinación no sean antagónicos.

En un artículo diferente de los anteriores, publicado en *New Journal of Chemistry* (Kharm, A., et al, 2019, 43, 11771-11783), se ha evaluado a fondo la interacción del anhídrido selenoftálico con diferentes radicales libres en soluciones acuosas, así como con especies con una alta actividad redox en medios celulares, como H₂S y glutatión. Se determinó que dicho selenoanhídrido tiene capacidad para eliminar radicales libres, siendo esta capacidad mayor en presencia de H₂S y de glutatión. A altas concentraciones produjo además mutaciones en el DNA de plásmidos. Con estos resultados se sugiere que el mecanismo de acción puede deberse a la liberación de especies reactivas como H₂Se, que serían las responsables de las diferentes actividades biológicas que ha mostrado este compuesto.



PUBLICACIONES DESTACADAS

Spengler, G., Gajdács, M., Marć, M.A., Domínguez-Álvarez, E., Sanmartín, C. Organoselenium compounds as novel adjuvants of chemotherapy drugs—a promising approach to fight cancer drug resistance. (2019) *Molecules*, 24(2), 336.

DOI: 10.3390/molecules24020336

Kharm, A., Misak, A., Grman, M., Brezova, V., Kurakova, L., Baráth, P., Jacob, C., Chovanec, M., Ondrias, K., Domínguez-Álvarez, E. Release of reactive selenium species from phthalic selenoanhydride in the presence of hydrogen sulfide and glutathione with implications for cancer research. (2019) *New Journal of Chemistry*, 43(29), pp. 11771-11783.

DOI: 10.1039/c9nj02245g

Kharm, A., Grman, M., Misak, A., Domínguez-Álvarez, E., Nasim, M.J., Ondrias, K., Chovanec, M., Jacob, C. Inorganic polysulfides and related reactive sulfur selenium species from the perspective of chemistry. (2019) *Molecules*, 24(7), 1359.

DOI: 10.3390/molecules24071359

Csonka, A., Kincses, A., Nové, M., Vadas, Z., Sanmartín, C., Domínguez-Álvarez, E., Spengler, G. Selenoesters and selenoanhydrides as novel agents against resistant breast cancer. (2019) *Anticancer Research*, 39(7), pp. 3777-3783.

DOI: 10.21873/anticancer.13526

Mosolygó, T., Kincses, A., Csonka, A., Tönki, Á.S., Witek, K., Sanmartín, C., Marć, M.A., Handzlik, J., Kieć-Kononowicz, K., Domínguez-Álvarez, E., Spengler, G. Selenocompounds as novel antibacterial agents and bacterial efflux pump inhibitors. (2019) *Molecules*, 24(8), 1487.

DOI: 10.3390/molecules24081487

Domínguez-Álvarez, E., Łażewska, D., Szabó, Z., Hagenow, S., Reiner, D., Gajdács, M., Spengler, G., Stark, H., Handzlik, J., Kieć-Kononowicz, K. The Search for Histamine H₄ Receptor Ligands with Anticancer Activity among Novel (Thio)urea Derivatives. (2019) *ChemistrySelect*, 4(36), pp. 10943-10952.

DOI: 10.1002/slct.201902747

Spengler, G., Kincses, A., Mosolygó, T., Marć, M.A., Nové, M., Gajdács, M., Sanmartín, C., McNeil, H.E., Blair, J.M.A., Domínguez-Álvarez, E. Antiviral, antimicrobial and antibiofilm activity of

selenoesters and selenoanhydrides. (2019) *Molecules*, 24(23), 4264.

DOI: 10.3390/molecules24234264

Grman, M., Misak, A., Kurakova, L., Brezova, V., Cacanyiova, S., Berenyiova, A., Balis, P., Tomasova, L., Kharma, A., Domínguez-Álvarez, E., Chovanec, M., Ondrias, K. Products of sulfide/selenite interaction possess antioxidant properties, scavenge superoxide-derived radicals, react with DNA, and modulate blood pressure and tension of isolated thoracic aorta. (2019) *Oxidative Medicine and Cellular Longevity*, 2019, 9847650.

DOI: 10.1155/2019/9847650

De la Cruz-Claure, M.L., Céspedes-Llave, A.A., Ulloa, M.T., Benito-Lama, M., Domínguez-Álvarez, E., Bastida, A. Inhibition–disruption of *Candida glabrata* biofilms: Symmetrical selenoesters as potential anti-biofilm agents. (2019) *Microorganisms*, 7(12), 664.

DOI: 10.3390/microorganisms7120664

Al-Muntaser, A.A., Varfolomeev, M.A., Suwaid, M.A., Yuan, C., Chemodanov, A.E., Feoktistov, D.A., Rakhmatullin, I.Z., Abbas, M., Domínguez-Álvarez, E., Akhmediyarov, A.A., Klochkov, V.V., Amerkhanov, M.I. Hydrothermal upgrading of heavy oil in the presence of water at sub-critical, near-critical and supercritical conditions. (2020) *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 184, 106592.

DOI: 10.1016/j.petrol.2019.106592

Nové, M., Kincses, A., Szalontai, B., Rácz, B., Blair, J.M.A., González-Prádena, A., Benito-Lama, M., Domínguez-Álvarez, E., Spengler, G. Biofilm eradication by symmetrical selenoesters for food-borne pathogens. (2020) *Microorganisms*, 8(4), 566.

DOI: 10.3390/microorganisms8040566

Gajdács, M., Nové, M., Csonka, Á., Varga, B., Sanmartín, C., Domínguez-Álvarez, E., Spengler, G. Phenothiazines and selenocompounds: A potential novel combination therapy of

multidrug resistant cancer. (2020) *Anticancer Research*, 40(9), pp. 4921-4928.

DOI: 10.21873/anticancer.14495

Marć, M.A., Kincses, A., Rácz, B., Nasim, M.J., Sarfraz, M., Lázaro-Milla, C., Domínguez-Álvarez, E., Jacob, C., Spengler, G., Almendros, P. Antimicrobial, anticancer and multidrug-resistant reversing activity of novel oxygen-, sulfur- and selenoflavones and bioisosteric analogues. (2020) *Pharmaceuticals*, 12(12), 453.

DOI: 10.3390/ph13120453

Szemerédi, N., Kincses, A., Rehorova, K., Hoang, L., Salardón-Jiménez, N., Sevilla-Hernández, C., Viktorová, J., Domínguez-Álvarez, E., Spengler, G. Ketone- and cyano-selenoesters to overcome efflux pump, quorum-sensing, and biofilm-mediated resistance. (2020) *Antibiotics*, 9(12), 896.

DOI: 10.3390/antibiotics9120896

PARTICIPACIONES DESTACADAS EN CONGRESOS

El Selenio: un elemento desconocido con posibles aplicaciones en el tratamiento y prevención del cáncer. E. Domínguez-Álvarez. Conferencia invitada en “Jornadas sobre Avances en Investigación Oncológica”. Benavente (Zamora, España). 22 de marzo de 2019.

Symmetrical selenocompounds as anticancer and antibacterial agents. N. Salardón-Jiménez, A. Kincses, B. Rácz, C. Sevilla-Hernández, M. Nové, P. Parra-Pineda, M. Benito-Lama, G. Spengler, E. Domínguez-Álvarez. “6th Young Researchers Symposium 2019”. Tres Cantos (Madrid, España), 21 de junio de 2019.

Synthesis of novel cyanoselenoesters with anticancer activity. M. Benito-Lama, A. González-Prádena, A. Kincses, B. Rácz, C. Sevilla-Hernández, B. Szalontai, N. Salardón-Jiménez, G. Spengler, E. Domínguez-Álvarez. “6th Young Researchers Symposium 2019”. Tres Cantos (Madrid, España), 21 de junio de 2019.

Biofilm inhibiting activity of selenium compounds. A. Kincses, E. Domínguez-Álvarez, C. Sanmartín, H.E. Smith, J.M.A. Blair, M. Nové, G. Spengler. "Eurobiofilms 2019 - Glasgow. ESCMID Study Group for Biofilms (ESGB)". Glasgow (Reino Unido). 3 de septiembre de 2019.

Efflux pump inhibition by symmetric selenoesters on colon adenocarcinoma cells. B. Rácz, A. Kincses, M. Benito-Lama, A. González-Prádena, E. Domínguez-Álvarez, G. Spengler. "COST Action 17104 (STRATAGEM) WG3 Meeting - International Online Symposium on 'New Therapeutic Tools Against Preclinical Models of Multidrug Resistant Tumors'". Conferencia online, 4 de noviembre de 2020.

Resistance modulating activity of selenoesters in bacteria. N. Szeméredi, A. Kincses, K. Rehorova, J. Viktorova, E. Domínguez-Álvarez, G. Spengler. "COST Action 17104 (STRATAGEM) WG3 Meeting - International Online Symposium on 'New Therapeutic Tools Against Preclinical Models of Multidrug Resistant Tumors'". Conferencia online, 4 de noviembre de 2020.

Selenocompounds: a novel approach to fight cancer resistance. E. Domínguez-Álvarez, M.A. Marć, J. Handzlik, G. Spengler. "COST Action 17104 (STRATAGEM) WG2 Meeting and International Online Symposium on 'Synthesis and nanodelivery strategies for new therapeutic tools against Multidrug Resistant Tumours'". Conferencia online, 15 de diciembre de 2020.

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

Síntesis de selenoderivados con actividad antibacteriana, antitumoral y quimiopreventiva, y con capacidad para inhibir los mecanismos de resistencia a los medicamentos antitumorales y antibacterianos

Referencia: LINKA20285.

Entidad financiadora: CSIC.

Entidades participantes: IQOG-CSIC, Saarland University (Saarbruecken, Alemania), Jagiellonian University Medical College (Cracovia, Polonia), University of Szeged (Szeged, Hungría).

Duración: 01/01/2020 al 31/12/2021.

Investigador/es principal/es: Enrique Domínguez Álvarez.

Síntesis de nuevos compuestos selenados como antitumorales

Entidad financiadora: Asociación Cultural Trevinca.

Entidades participantes: IQOG-CSIC.

Duración: 01/10/2019 al 31/12/2019.

Investigador/es principal/es: Enrique Domínguez Álvarez.

Síntesis de nuevos selenocompuestos antitumorales e inhibidores de los mecanismos de resistencia del cáncer a los medicamentos

Entidad financiadora: Asociación Cultural Iniciativas Ropelanas.

Entidades participantes: IQOG-CSIC.

Duración: 01/01/2019 al 31/12/2019.

Investigador/es principal/es: Enrique Domínguez Álvarez.

Síntesis de nuevos selenocompuestos antitumorales e inhibidores de los mecanismos de resistencia del cáncer a los medicamentos

Entidad financiadora: Asociación Unidos Contra el Cáncer – Toro y su Alfoz (UCCTA).

Entidades participantes: IQOG-CSIC.

Duración: 01/01/2019 al 31/12/2019.

Investigador/es principal/es: Enrique Domínguez Álvarez.

ESTANCIAS

Enrique Domínguez Álvarez.

Período de la estancia: 12-02-2020 al 14-03-2020.

Institución destino: Jagiellonian University Medical College.

País: Cracovia (Polonia).

TRABAJOS FIN DE MÁSTER

Síntesis de nuevos selenoderivados como inhibidores de los mecanismos de resistencia en cáncer e infecciones bacterianas resistentes

Noemi Salardón Jiménez.

Universidad Complutense de Madrid. Facultad de Ciencias Químicas. 2019.

Dirección: Enrique Domínguez Álvarez y María José Mancheño Real.

Síntesis de nuevos derivados organoselénicos, como agentes antibacterianos e inhibidores de los mecanismos de resistencia a los medicamentos

Raquel Segura Molina.

Universidad Nacional de Educación a Distancia. Facultad de Ciencias. 2020.

Dirección: Enrique Domínguez Álvarez y María de los Ángeles Farrán Morales.

OTROS TRABAJOS DIRIGIDOS (prácticas externas en empresa, prácticas de formación profesional, etc.)

BECA CSIC - JAE INTRO

Trabajo dirigido a Clotilde Sevilla Hernández, becaria JAE INTRO en la convocatoria 2018; Facultad de Farmacia de la Universidad Complutense de Madrid. 2019. Director: Enrique Domínguez Álvarez.

PREMIOS Y RECONOCIMIENTOS

Marzo 2019 – Reconocimiento como Socio de Honor de la Asociación Unidos Contra el Cáncer – Toro y su Alfoz.

DIVULGACIÓN CIENTÍFICA

Menciones en prensa

La Opinión de Zamora, 23/03/2019. Descubrir terapias sin resistencias, uno de los retos de la investigación oncológica.

<https://www.laopiniondezamora.es/benavente/2019/03/23/descubrir-terapias-resistencias-retos-investigacion-2606872.html>

La Opinión de Zamora, 24/03/2019. Las pruebas de cribado y seguir una dieta saludable, claves para prevenir el cáncer

<https://www.laopiniondezamora.es/toro/2019/03/24/pruebas-cribado-seguir-dieta-saludable-2607713.html>

La Opinión de Zamora, 19/08/2019. El festival solidario de Fuentes logra recaudar más de 1.700 euros.

<https://www.laopiniondezamora.es/benavente/2019/08/19/festival-solidario-fuentes-logra-recaudar-2601955.html>

La Opinión de Zamora, 27/09/2019. 400 sanabreses contra el cáncer.

<https://www.laopiniondezamora.es/comarcas/2019/09/24/400-sanabreses-cancer-1167470.html>

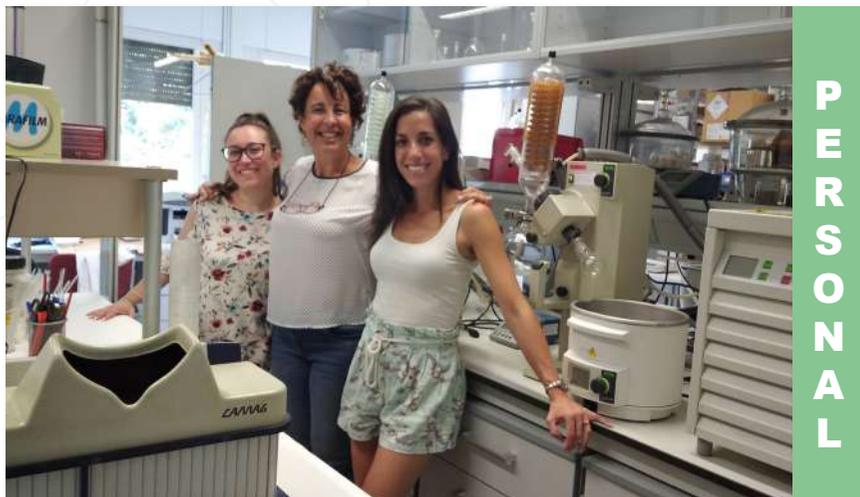
OTROS

Seminarios

“Selenoesters and Selenoanhydrides: a promising scaffold with multiple applications in Medicinal Chemistry”. Domínguez-Álvarez, E. 03/12/2019; Department of Medical Microbiology and Immunology, Faculty of Medicine, University of Szeged (Szeged, Hungría).

“Selenoesters and Selenoanhydrides: active novel compounds with promising applications in Medicinal Chemistry”. Domínguez-Álvarez, E. 27/02/2020; Department of Technology and Biotechnology of Drugs, Faculty of Pharmacy, Jagiellonian University Medical College (Cracovia, Polonia).

Grupo de Reconocimiento Molecular: Interacción Carbohidrato-ADN



El laboratorio centra su investigación en aspectos importantes de la química del reconocimiento molecular: el estudio básico de las interacciones que rigen la asociación de carbohidratos al surco menor del B-ADN y otras biomoléculas de interés biológico. Recientemente la interacción del virus SARS-Cov-2 con la glicoproteína humana ACE2.

Líneas de Investigación:

- Estudio de las interacciones de enlace de hidrógeno cooperativo y las interacciones CH- π . El objetivo fundamental es poder aplicar esos conocimientos básicos al diseño de ligandos del ADN con mayor afinidad y selectividad.

Personal investigador

Cristina Vicent Laso

Postdoctorales

Laura Montalvillo Jiménez

Personal en formación

Diego García Puentes

Paula Flores Galán

- Participación en proyecto COVID19 liderado por la Dra. Paula Bosch en el ICTP. El objetivo es la modificación de filtros de aire acondicionado para atrapar al virus SARS-Cov2 responsable de la COVID.

HITOS DESTACADOS

Se ha sintetizado y estudiado las propiedades como ligando del surco menor del ADN de un compuesto capaz de llevar carbohidratos de estructura sencilla al interior del surco menor del ADN.

Así, ha podido determinarse el papel fundamental de los enlaces de hidrógeno del azúcar en dicha interacción.

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

RMN y reconocimiento molecular de carbohidratos: lectinas, enzimas y ácidos nucleicos (CARBNMRMR)

Referencia: RTI2018-094751-B-C21 & C22.

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Duración: 3 años.

Investigador/es principal/es: Jesús Jiménez Barbero y Javier Cañada Vicinay.

Textiles y recubrimientos poliméricos funcionales recargables con previsible actividad anti-SARS-Cov-2

Referencia: 202060E171.

Entidad financiadora: CSIC.

Duración: 1 año.

Investigador/es principal/es: Paula Bosch Sarobe.

TESIS DOCTORALES

Derivados de Bis(benzimidazol) como nuevo vector para el estudio de la interacción de carbohidratos con el surco menor del ADN

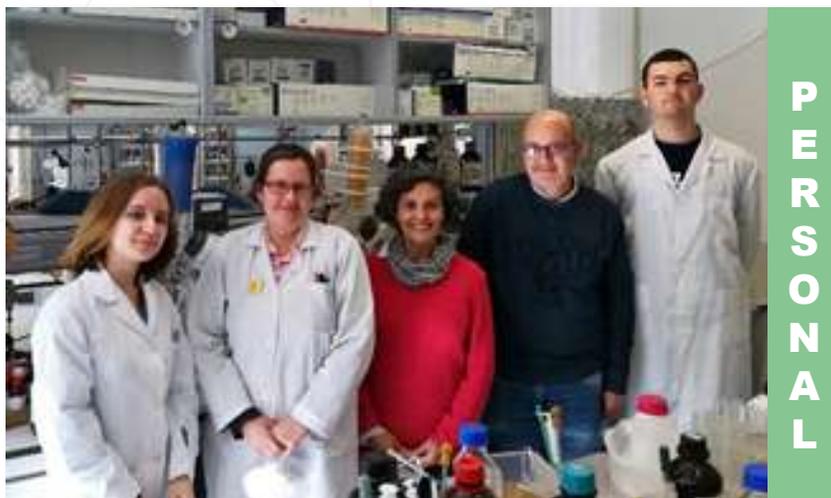
Diego García Puentes.

Universidad Complutense de Madrid (UCM). Facultad de Químicas, Departamento de Química Orgánica.

Dirección: Dra. Cristina Vicent Laso.



Grupo de Síntesis Asimétrica con Sulfóxidos



En nuestro grupo se investiga en distintos proyectos que procuran enlazar el desarrollo de metodología sintética (nuevas reacciones, nuevos elementos de control, etc.) con su posterior aplicación a la preparación de productos biológicamente activos y estructuralmente complejos. Nuestras contribuciones se centran en problemas fundamentales como el control de la regio-, estereo- y enantioselectividad en síntesis asimétrica utilizando auxiliares quirales de azufre para abrir nuevas rutas de preparación de heterociclos nitrogenados y oxigenados, ciclos pequeños y moléculas acíclicas quirales.

Personal investigador

Roberto Fernández de la Pradilla
Alma Viso

Personal en formación

Laura Fernández
Raquel Hidalgo
María Redondo

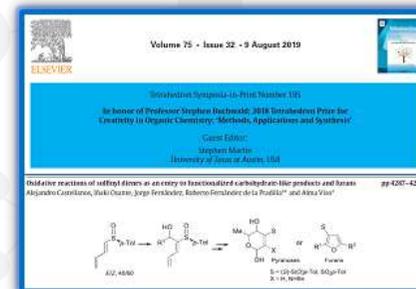
Personal de apoyo

Marina Velado
Patricia Herrera

HITOS DESTACADOS

Tetrahedron Symposia-in-Print

Participación en el simposium impreso organizado por la revista Tetrahedron por la concesión del “Tetrahedron Prize for Creativity in Organic Chemistry: Methods, Applications and Total Synthesis” al Profesor Stephen L. Buchwald por sus innovadoras contribuciones en el campo de la Química Orgánica y los procesos catalizados por metales de transición.



Síntesis de 1,4-dioles y 1,4-aminoalcoholes enantioenriquecidos

Se ha conseguido la funcionalización de sulfinil-dienos mediante un proceso en cascada que conlleva la adición conjugada de aminas y alcóxidos seguida de protonación diastereoselectiva y transposición [2,3]-sigmatrópica. La eficiente preparación de estos compuestos ha permitido su aplicación en la síntesis de polioles de gran valor, con un alto grado de stereocontrol y buen rendimiento. Los resultados se han publicado en la revista Chemistry a European Journal.



Defensa de tesis doctoral

En el mes de octubre de 2019, Marta García-Avello Méndez defendió la tesis doctoral titulada "Estudio de la transferencia de quiralidad en sistemas organometálicos" en la Universidad, Universidad Complutense de Madrid. Esta tesis fue un fruto de un proyecto de colaboración de nuestro grupo de investigación con el de los Dres. Miguel Ángel Sierra y María del Carmen de la Torre en la UCM y en el IQOG respectivamente, dirigido a abrir rutas sintéticas hacia

nuevos complejos metálicos de oro e iridio enantiopuros, derivados de carbenos 1,2,3-triazolilidenos que contienen un grupo sulfinilo en su estructura con objeto de estudiar sus propiedades físico-químicas y su aplicación en catálisis.



PUBLICACIONES DESTACADAS

Alejandro Castellanos, Iñaki Osante, Jorge Fernández, Roberto Fernández de la Pradilla, Alma Viso. "Oxidative reactions of sulfinyl dienes as an entry to functionalized carbohydrate-like products and furans". *Tetrahedron* 2019, 75, 4287-4297.

DOI: [10.1016/j.tet.2019.04.014](https://doi.org/10.1016/j.tet.2019.04.014)

Ignacio Colomer, Mercedes Ureña, Alma Viso, and Roberto Fernández de la Pradilla. "Sulfinyl-Mediated Stereoselective Functionalization of Acyclic Conjugated Dienes". *Chem. Eur. J.* 2020, 26, 4620 – 4632.

DOI: [10.1002/chem.201905742](https://doi.org/10.1002/chem.201905742)

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

Nuevos procesos catalíticos dirigidos a la formación de enlaces carbono-boro y a la ruptura selectiva de enlaces carbono-nitrogeno

Referencia: PID2019-107380GB-I00.

Entidad financiadora: MICINN.

Duración: 01/06/2020 - 30/12/2022.

Investigador/es principal/es: Dra. Mariola Tortosa.

Moléculas biofuncionales moduladas por metales de transición: síntesis y aplicaciones

Referencia: CTQ2016-77555-C2-2-R.

Entidad financiadora: MINECO.

Duración: 30/12/2016 - 29/12/2019.

Investigador/es principal/es: Dra. Carmen de la Torre.

TESIS DOCTORALES

Estudio de la transferencia de quiralidad en sistemas organometálicos

Marta García-Avello Méndez.

Universidad Complutense de Madrid (UCM). Departamento de Orgánica I. Facultad de Químicas, 2019.

Dirección: Miguel Ángel Sierra, María del Carmen de la Torre, Alma Viso.

TRABAJOS FIN DE MÁSTER

Adición de silanos metalados a sulfóxidos insaturados

Laura Fernández Peña.

Universidad Autónoma de Madrid (UAM), Facultad de Ciencias, 2019.

Dirección: Alma Viso.

Transposición sigmatrópica regioselectiva sobre 2-sulfinil butadienos mediada por base

Raquel Hidalgo León.

Universidad Autónoma de Madrid (UAM), Facultad de Ciencias, 2020.

Dirección: Roberto Fernández de la Pradilla.

OTROS TRABAJOS DIRIGIDOS (prácticas externas en empresa, prácticas de formación profesional, etc.)

Síntesis asimétrica con grupos sulfóxido

María Redondo Álvarez.

Universidad Autónoma de Madrid (UAM), Facultad de Ciencias, 2019.

Dirección: Alma Viso.

Laboratorio de Química Médica



Personal investigador

José Luis Marco Contelles

Personal de apoyo

Mourad Chioua

Personal en formación

Daniel Diez Iriepa

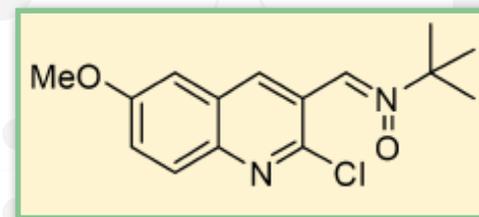
Mireia Toledano Pinedo

El grupo desarrolla su actividad investigadora en el área de la química médica de enfermedades neurodegenerativas (enfermedad de Alzheimer) y neurovasculares (isquemia cerebral), teniendo como objetivo la identificación de moléculas pequeñas para su posible terapia en base a la síntesis orgánica y evaluación biológica de nuevos ligandos racionalmente diseñados.

HITOS DESTACADOS

En el proyecto cuyo objetivo es la identificación y desarrollo de nuevas nitronas antioxidantes y neuroprotectoras para la posible terapia de la isquemia cerebral, recientemente hemos patentado y

comunicado la síntesis y propiedades farmacológicas de una serie de QUINOLILNITRONAS, entre las que destaca especialmente QN23 [óxido de (Z)-N-*tert*-butil-1-(2-cloro-6-metoxiquinolín-3-il) metanimina] como un poderoso agente neuroprotector en un modelo *in vitro* de ictus, de privación de oxígeno y glucosa, que es capaz de atrapar diferentes tipos de radicales oxigenados tóxicos, que compara muy bien con otras nitronas usadas como compuestos de referencia, y que en dos modelos *in vivo* (focal y global) de isquemia cerebral, ha mostrado que reduce muy eficientemente la muerte neuronal y el volumen de infarto. Estos resultados nos permiten proponer QN23 como una molécula pequeña muy interesante y prometedora para su posible desarrollo clínico con vistas a su uso en el tratamiento del ictus.



PUBLICACIONES DESTACADAS

I. Pachón-Angona, B. Refouvelet, R. Andrýs, H. Martin, V. Luzet, I. Iriepa, I. Moraleda, D. Diez-Iriepa, M. J. Oset-Gasque, J. Marco-Contelles, K. Musilek and L. Ismaili. Donepezil+Chromone+Melatonin hybrids as promising agents for Alzheimer's disease therapy. *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry* 2019, 34, 479-489.

DOI: 10.1080/14756366.2018.1545766

C. de los Ríos and J. Marco-Contelles. Tacrines for Alzheimer's disease therapy. III. The PyridoTacrines. *European Journal of Medicinal Chemistry (Special number: "Multi-Target Drug Discovery: An opportunity for novel and repurposed bioactive molecules")* 2019, 166, 381-389.

DOI: 10.1016/j.ejmech.2019.02.005

Marco-Contelles. Facts, Results and Perspectives of the Current Alzheimer's Disease Research. *ACS Chemical Neuroscience (WIEWPOINT)* 2019, 10, 1127-1128.

DOI: 10.1021/acscchemneuro.9b00034

M. Chioua, E. Martínez-Alonso, R. Gonzalo-Gobernado, M. I. Ayuso, A. Escobar-Peso, L. Infantes, D. Hadjipavlou-Litina, J. J. Montoya, J. Montaner, A. Alcázar and J. Marco-Contelles. New quinolylnitrones for stroke therapy: Antioxidant and neuroprotective (Z)-N-t-butyl-1-(2-chloro-6-methoxyquinolin-3-yl) methanimine oxide as a new lead compound for ischemic stroke treatment. *Journal of Medicinal Chemistry* 2019, 62, 2184-2201.

DOI: 10.1021/acs.jmedchem.8b01987

M. Chioua, M. Salgado-Ramos, D. Diez-Iriepa, A. Escobar-Peso, D. Hadjipavlou-Litina, I. Iriepa, E. Martínez-Alonso, A. Alcázar and J. Marco-Contelles. Novel quinolylnitrones combining neuroprotective and antioxidant properties, as potential agents for cerebral ischemia therapy. *ACS Chemical Neuroscience (Letter)* 2019, 10, 2703-2706.

DOI: 10.1021/acscchemneuro.9b00152

B. Svobodova, E. Mezeiova, V. Hepnarova, M. Hrabnova, L. Muckova, T. Kobrlova, D. Jun, O. Soukup, M. L. Jimeno, J. Marco-Contelles and J. Korabecny. Exploring structure-activity relationship in tacrine-squaramide derivatives as potent cholinesterase inhibitors. *Biomolecules* 2019, 9, 379 (1-19).

DOI: 10.3390/biom9080379

R. Malek, R. L. Arribas, A. Palomino-Antolín, P. Totoson, C. Demougeot, T. Kobrlova, O. Soukup, I. Iriepa, I. Moraleda, D. Diez-Iriepa, J. Godyń, D. Panek, B. Malawska, M. Głuch-Lutwin, B. Mordyl, A. Siwek, F. Chabchoub, J. Marco-Contelles, K. Kiec-Kononowicz, J. Egea, C. de los Ríos and L. Ismaili. New dual small molecules for Alzheimer's disease therapy combining H3R (H3R) antagonism and calcium channel blockade with additional cholinesterase inhibition. *Journal of Medicinal Chemistry (Brief Article)* 2019, 62, 11416-11422.

DOI: 10.1021/acs.jmedchem.9b00937

E. Martínez-Alonso, A. Escobar-Peso, M. I. Ayuso, R. Gonzalo-Gobernado, M. Chioua, J. J. Montoya, J. Montaner, I. Fernández, J. Marco-Contelles and A. Alcázar. Characterization of a cholesteronitron (ISQ-201), a novel drug candidate for the treatment of ischemic stroke. *Antioxidants* 2020, 9, 291.

DOI: 10.3390/antiox9040291

G. Abbruzzese, J. Morón-Oset, S. Díaz-Castroverde, N. García-Font, C. Roncero, F. López-Muñoz, J. Marco-Contelles and M. J. Oset-Gasque. Neuroprotection by phytoestrogens in the model of deprivation and resupply of oxygen and glucose in vitro: The contribution of autophagy and related signaling mechanisms. *Antioxidants* 2020, 9, 545.

DOI: 10.3390/antiox9060545

M. J. Oset-Gasque and J. L. Marco-Contelles. Tacrine-natural-product hybrids for Alzheimer's disease therapy. *Current Medicinal Chemistry (review)* 2020, 27, 4392-4400.

DOI: 10.2174/0929867325666180403151725

B. Chamorro, D. Diez-Iriepa, B. Merás-Sáiz, M. Chioua, D. García-Vieira, I. Iriepa, D. Hadjipavlou-Litina, F. López-Muñoz, R. Martínez-Murillo, D. González-Nieto, I. Fernández, J. Marco-Contelles and M. J. Oset-Gasque. Synthesis, antioxidant properties and neuroprotection of α -phenyl-*tert*-butylnitronone derived HomoBisNitronones in in vitro and in vivo ischemia models. *HomoBisNitronones in in vitro and in vivo ischemia models. Scientific Reports* 2020, 10, 14150.

DOI: 10.1038/s41598-020-70690-y

I. Pachón-Angona, H. Martin, S. Daniel, I. Moraleda, A. Bonet, A. Whorowski, M. Maj, K. Jozwiak, I. Iriepa, B. Refouvelet, J. Marco-Contelles and L. Ismaili. Synthesis of Hantzsch adducts as cholinesterases and calcium flux inhibitors, antioxidants and neuroprotectives. *International Journal of Molecular Sciences* 2020, 21, 7652.

DOI: 10.3390/ijms21207652

D. Diez-Iriepa, B. Chamorro, M. Talaván, M. Chioua, I. Iriepa, D. Hadjipavlou-Litina, F. López-Muñoz, J. Marco-Contelles and M. J. Oset-Gasque. Homo-Tris-Nitronones derived from α -phenyl-*N-tert*-butylnitronone: Synthesis, neuroprotection and properties. *International Journal of Molecular Sciences* 2020, 21, 7949.

DOI: 10.3390/ijms21217949

J. Marco-Contelles and Y. Zhang. From seeds of *Apium graveolens* Linn. to a cerebral ischemia medicine: The long journey of 3-*n*-butylphthalide. *Journal of Medicinal Chemistry (Perspective)* 2020, 63, 12485–12510.

DOI: 10.1021/acs.jmedchem.0c00887

A. Więckowska, N. Szałaj, I. Góral, A. Bucki, G. Latacz, K. Kiec-Kononowicz, Ó. M. Bautista-Aguilera, A. Romero, E. Ramos, J. Egea, V. Farré-Alíns, Á. González-Rodríguez, F. López-Muñoz, M. Chioua and J. Marco-Contelles. In vitro and in silico ADME-Tox profiling and safety significance of multifunctional monoamine oxidases inhibitors targeting neurodegenerative diseases. *ACS Chemical Neuroscience* 2020, 11, 3793–3801.

DOI: 10.1021/acscchemneuro.0c00489

J. Marco-Contelles. Recent advances on nitronones design for stroke treatment. *Journal of Medicinal Chemistry (Miniperspective)* 2020, 63, 13413–13427.

DOI: 10.1021/acs.jmedchem.0c00976

PARTICIPACIONES DESTACADAS EN CONGRESOS

Moléculas for Alzheimer's disease therapy.

Laboratoire de Chimie Organique et Thérapeutique, Neurosciences intégratives et cliniques EA 481, Univ. Bourgogne Franche-Comté, UFR Santé, 19, rue Ambroise Paré, F-25000 Besançon, France (28 de Noviembre), 2019.

Moléculas for Alzheimer's disease therapy.

Instituto de Investigaciones Biomédicas "Alberto Sols" (CSIC, Madrid, España) (5 de Diciembre), 2019.

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

Moléculas para el tratamiento de enfermedades complejas asociadas con la edad

Referencia: SAF2015-65586-R (Biomedicina).

Entidad financiadora: MINECO.

Duración desde: 01-01-2016/ 31-12-2019.

Optimización de Contilisant: Diseño, síntesis y evaluación biológica

Referencia: PDI-2019-105813RB-C21.

Entidad financiadora: AEI (MICINN).

Duración desde: 01-06-2020/ 01-06-2023.

INVESTIGACIÓN CONTRATADA PÚBLICA

Contrato de Apoyo Tecnológico

Entidad participante: Fundación para la Investigación Biomédica del Hospital Ramón y Cajal.
Duración desde: 04 Septiembre 2020.

TRABAJOS FIN DE MÁSTER

Nuevas nitronas para la terapia de enfermedades de la edad

Adelina Sonia Petcu.
Universidad de Alcalá de Henares (UAH). Departamento de Química Orgánica. Facultad de Químicas. 29-10-2020
Co-Dirección: Isabel Iriepa Canalda.

TRABAJOS FIN DE GRADO

TRIS-NITRONAS DERIVADAS de α -FENIL-*N*-*tert*-BUTIL NITRONA (PBN), como posibles Agentes Neuroprotectores en la Isquemia Cerebral

Marta Talaván Ruiz.
Universidad Complutense de Madrid (UCM). Departamento de Bioquímica y Biología Molecular II. Facultad de Farmacia. 2019.
Co-Dirección: María J. Oset Gasque.

OTROS TRABAJOS DIRIGIDOS (prácticas externas en empresa, prácticas de formación profesional, etc.)

Nuevas nitronas para el tratamiento de la isquemia cerebral

David García Viera.
Universidad Complutense de Madrid (UCM). Departamento de Química Orgánica. Facultad de Ciencias Químicas. 20-06-2019
Co-Dirección: Mourad Chioua.

Síntesis de posibles inhibidores del inflammasoma NLRP3

Adelina Sonia Petcu.
Universidad de Alcalá de Henares (UAH). Departamento de Química Orgánica. Facultad de Químicas. 26-06-2019.
Co-Dirección: Mourad Chioua.

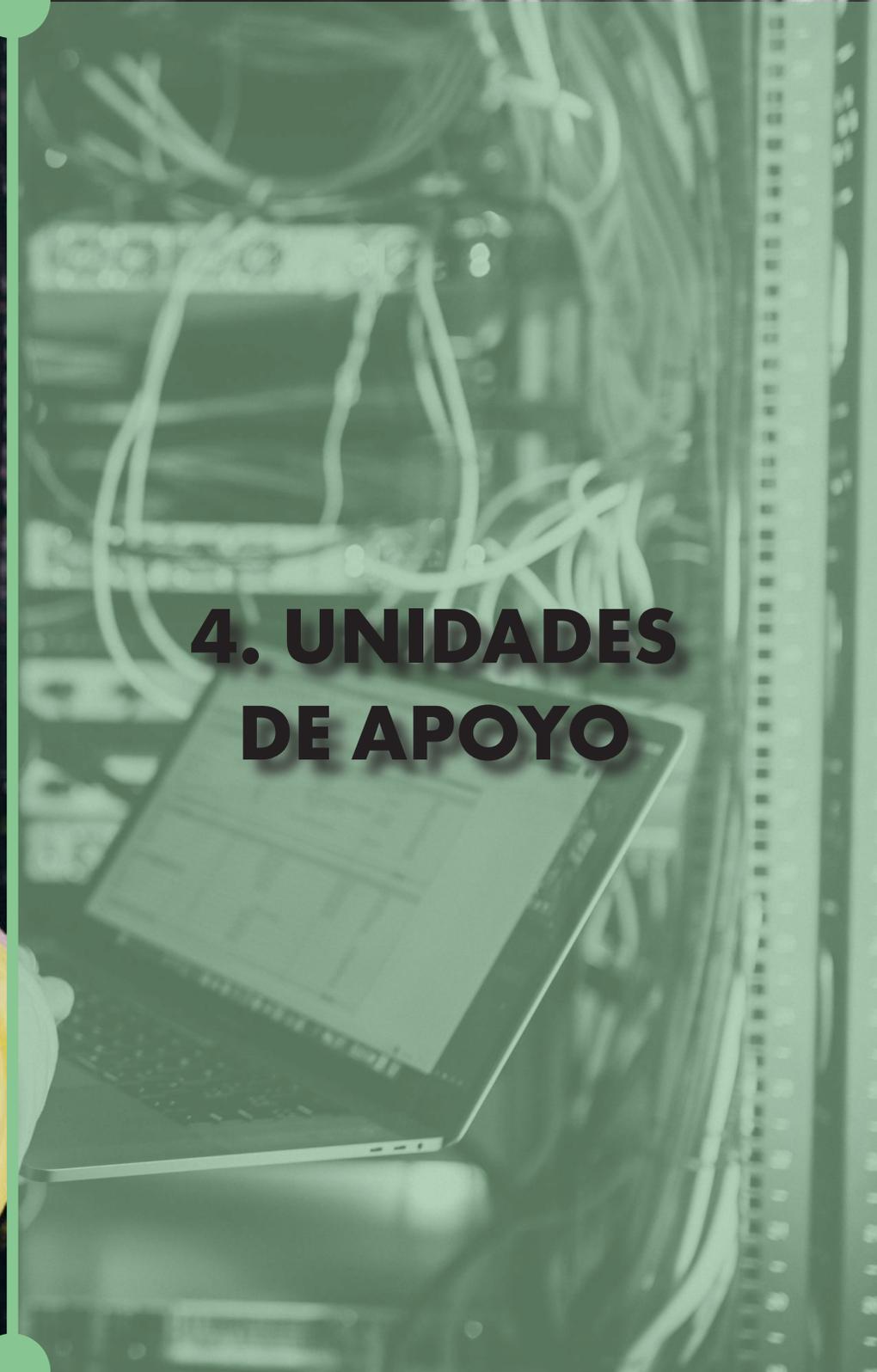
PREMIOS Y RECONOCIMIENTOS

Editorial Board Member.
Molecular Diversity (2019-...).
Review Editor on the Editorial Board of *Frontiers in Molecular Neuroscience* (2020-...).

OTROS

Docencia universitaria

Profesor asociado (19/11/2018-09/04/2019). 2018-2019.
Universidad Complutense de Madrid.
Química en Ciencias Farmaceuticas (Facultad De Farmacia) (4 + 4).
Química Farmacéutica I.



4. UNIDADES DE APOYO

Servicios Científico-Técnicos



Servicios Científico-Técnicos

Mercedes Pintado Sierra

Técnico de LC-QTOF MS y GC-Q MS

Ana Isabel Ruiz Matute

Técnico del LC-QqQ-MS

Sagrario Calvarro Sañudo

Los Servicios Científico-Técnicos (SCT) del Instituto de Química Orgánica General (IQOG) del CSIC tienen como objetivo principal proporcionar apoyo a la investigación a los diferentes Grupos y Departamentos de dicho Instituto. También se ofrece servicio a otros institutos del CSIC, a usuarios de otros Organismos Públicos de Investigación y de empresas privadas.

Catálogo de Prestaciones del CSIC

El Catálogo de Prestaciones del CSIC consiste en un conjunto de Servicios, compuesto por un amplio espectro de técnicas y ensayos, que constituye el núcleo principal de la oferta de servicios científico-técnicos del CSIC a la comunidad científica y al sector industrial y empresarial. La elevada cualificación de los recursos humanos y la calidad de las infraestructuras en general se evidencia en un catálogo actualizado que puede consultarse en la siguiente página: <https://www.csic.es/es/investigacion/catalogo-de-servicios-cientifico-tecnico>

Los SCT-IQOG están incluidos en dicho Catálogo, ofreciendo así la mayor parte de los análisis que se pueden llevar a cabo en nuestras instalaciones a quien los necesite. Se pueden consultar en nuestra web: <http://www.iqog.csic.es/es/services>

Servicio de Espectrometría de Masas (E.M.)

El Servicio de Espectrometría de Masas comenzó su actividad en el año 2008 y tiene como objetivo fundamental servir de herramienta de apoyo a la investigación de los diferentes departamentos del IQOG así como a usuarios externos. El equipamiento disponible permite llevar a cabo el análisis por Espectrometría de Masas desde compuestos de bajo peso molecular hasta compuestos más complejos como polímeros y proteínas. Con ellos es posible llevar a cabo el análisis de moléculas de muy diferente naturaleza. Actualmente se dispone en el Servicio de tres espectrómetros de masas con distintas configuraciones:

Se puede obtener información cuantitativa y cualitativa, hacer medidas de masas exactas y realizar experimentos de masas en tándem.

Sistema LC-MS con analizador de tiempo de vuelo (LC-QTOF)

Consta de un cromatógrafo de líquidos (Agilent 1200 LC) acoplado a un espectrómetro de masas con analizador híbrido Q-TOF (Agilent 6500 Accurate Mass). Posee fuentes de ionización ESI/APCI y un intervalo de masas de 25 - 20.000 u. Permite obtener una exactitud de masa de 1 - 2 ppm y una resolución máxima de 20.000 FWHM.



Sistema LC-MS con analizador de triple cuadrupolo (LC-QqQ)

Está constituido por un cromatógrafo de líquidos de ultra-alta presión (Waters Acquity UPLC H CLASS) acoplado a un espectrómetro de masas con analizador de triple cuadrupolo (Waters Xevo TQS). Dispone de fuentes de ionización ESI/APCI, permitiendo registrar espectros de masas en el intervalo 1 - 2.050 u.



Sistema GC-MS con analizador cuadrupolar (GC-MS)

Está formado por un cromatógrafo de gases (Agilent 7890 A) acoplado a un espectrómetro de masas cuadrupolar (Agilent 5975 C). El sistema de inyección incorporado es del tipo split/splitless, y la fuente de ionización de impacto electrónico. El intervalo de masas que permite registrar es de 1 - 800 u.



Unidad de Apoyo a la Investigación (UAI)

La instrumentación con la que cuenta actualmente la Unidad está constituida por los siguientes equipos:

Microcalorímetro modelo VP-ITC de MicroCal (MC)

La Calorimetría Isoterma de Valoración determina cambios de calor asociados a las interacciones entre dos biomoléculas y se emplea principalmente para determinar parámetros termodinámicos y de afinidad en biomoléculas como constantes, relación estequiométrica, entalpía y entropía.



Dicroísmo circular modelo J-815 spectropolarimeter de Jasco (DC)

El Dicroísmo Circular permite el estudio quiral de sustancias ópticamente activas y con cromóforos. Es posible determinar la configuración molecular o la estereoquímica de sustancias de forma rápida y sencilla.



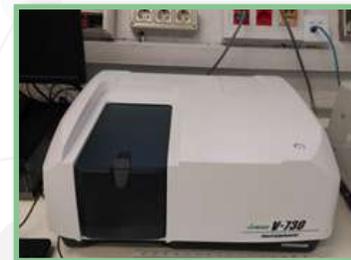
Polarímetro modelo P2000 de Jasco (POL)

El Polarímetro permite medir de una manera automática la rotación óptica de moléculas activas ópticamente con alta precisión y a una temperatura controlada.



Ultravioleta-visible modelo V-730 de Jasco (UV)

El Ultravioleta-Visible permite la determinación del espectro electromagnético de una molécula, comprendiendo la región de longitudes de onda entre 800 y 200 nm. El instrumento es de doble haz y permite hacer tanto barridos como medidas puntuales a una longitud de onda fijada.



Hidrogenador modelo 3900 Parr Instrument Company

El Hidrogenador-Parr es un compacto y sencillo sistema para tratar sustancias químicas con hidrógeno en presencia de un catalizador a presiones de hasta 5 atm (60 psi) a temperatura ambiente. Su principal aplicación es la síntesis o modificación de compuestos orgánicos por hidrogenación catalítica, reducción o condensación.



Microondas modelo Discover-S de CEM Corporation (1) y Micoondas modelo Monowave300 de Anton Paar (2)

Estos Microondas (MW) están diseñados para acelerar ciertas reacciones químicas bajo condiciones controladas en una escala de laboratorio.



Generador de Ozono Modelo 500 de Fischer

El equipo genera Ozono en una proporción determinada a partir de oxígeno gas. Se emplea generalmente en reacciones de oxidación.



Karl-Fischer modelo C20 de Mettler Toledo (KF)

La valoración de Karl Fischer es el método de referencia específico para determinar el contenido de agua en una muestra y ofrece resultados precisos en tan solo unos minutos. Este equipo permite el análisis de agua (en ppm) de muestras líquidas.



Cámara Seca MBraun (CAM)

Esta cámara permite tanto el almacenaje de reactivos como la síntesis de compuestos orgánicos en atmósfera inerte.



Sistemas de Purificación de disolventes (SPS) de Scharlab

Los SPS permiten el acceso de una forma rápida y sencilla a disolventes anhidros.



Infrarrojo modelo Spectrum One B de Perkin-Elmer

El Infrarrojo permite la determinación del espectro electromagnético infrarrojo de una molécula, comprendiendo la región de números de onda entre 4000 y 400 cm^{-1} . Su principal aplicación es el análisis cualitativo, determinando los grupos funcionales presentes en la molécula.



OTRAS ACTIVIDADES DE LOS SCT

Dentro de las tareas que se llevan a cabo en los SCT podríamos destacar las de:

- Control y supervisión de los equipos:

En los SCT-IQOG se dedican grandes esfuerzos en que el equipamiento esté a punto para poder llevar a cabo las medidas o análisis pertinentes. Esto se consigue a través de labores intensivas de limpieza, control, supervisión, calibrado de equipos, etc., por parte del personal que los constituye.

- Formación de usuarios:

Se forma a los usuarios en las técnicas habituales para que ellos mismos puedan llevar a cabo sus análisis rutinarios en muchas de las técnicas, principalmente en las incluidas en la UAI.

- Gestión y control de calidad:

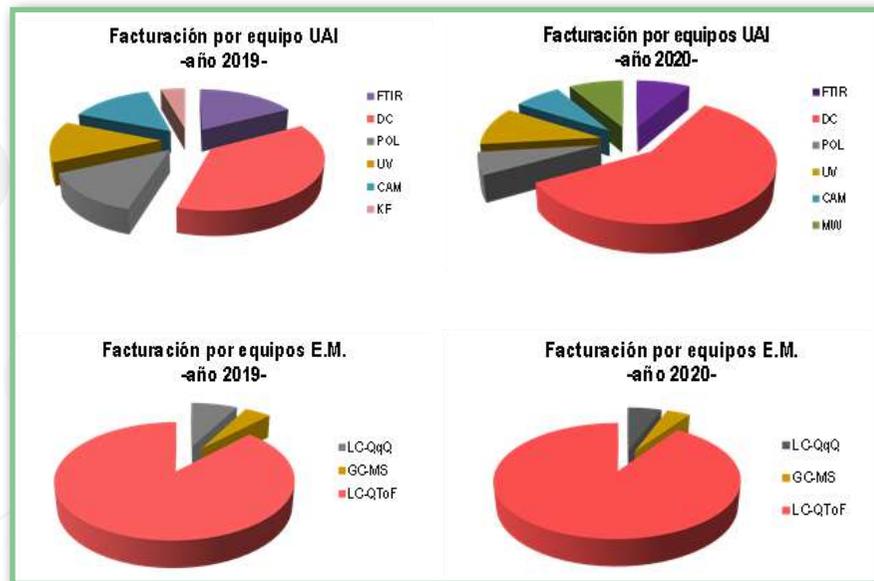
Se elaboran Procedimientos Normalizados de Trabajo (PNTs) de carácter interno con instrucciones para el uso de los distintos equipos.

También se lleva a cabo un registro de las incidencias que ocurren en los equipos de manera que se puedan llevar un seguimiento de los problemas que pueden surgir intentando de esta manera prevenir futuras averías más complejas en los equipos. También se redactan y envían solicitudes de ayudas tanto para adquirir nuevo equipamiento como para poder mejorar el existente.

- Facturación:

El uso del equipamiento lleva asociado unas tarifas que aportan financiación a los mismos teniendo como objetivo final la “autofinanciación” de los servicios, la que, dependiendo del servicio, no siempre se puede conseguir.

A continuación se muestra unos resúmenes gráficos de los ingresos, asociados a los distintos equipos y separados por servicios, durante los años 2019 y 2020.

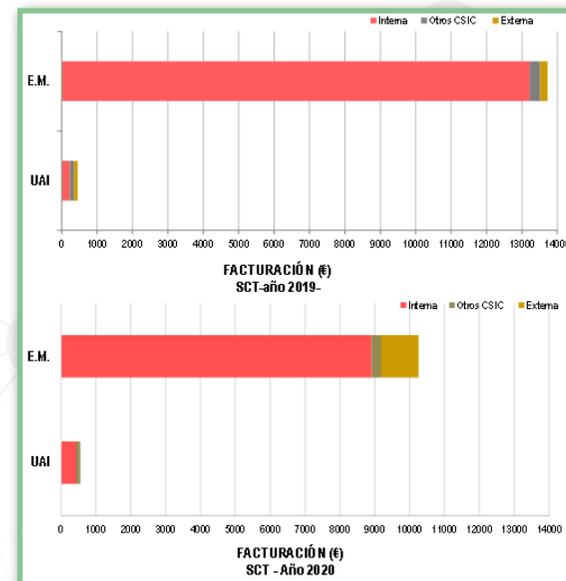


Dentro de la Unidad de Apoyo a la Investigación la técnica que más ingresos reportó en ambos años fue el Dicroísmo Circular (DC), 37% en 2019 y 59% en 2020. Técnicas como Polarímetro (POL), Cámara Seca (CAM), UV-Visible (UV) e Infrarrojo (FTIR) aportan, generalmente de manera equitativa, entre el 10% y el 17%, mientras que el resto de equipos podrían aportar hasta un 5% dependiendo del año.

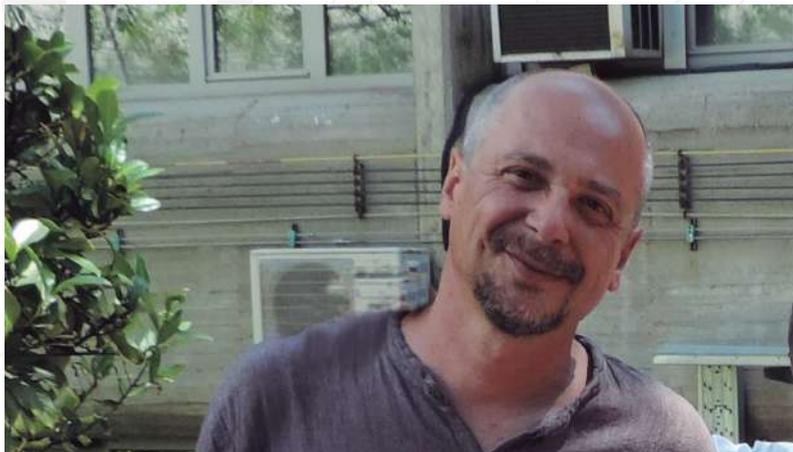
Para este servicio, la facturación interna suele estar en torno al 75-80%, mientras que el resto corresponde a Otros centros CSIC y, en ocasiones, también a usuarios externos (empresas privadas) dependiendo del año.

Dentro del Servicio de Espectrometría de Masas los análisis de Masas Exactas son los que reportan un mayor porcentaje de ingresos anuales, suponiendo el 90% del total, oscilando entre los 10.000-12.000 € anuales, de los que suelen ser de carácter interno CENQUIOR en un 80%.

La demanda de uso de los otros dos espectrómetros de masas (GC-MS y LC-MS-QqQ) fue únicamente para usuarios internos (IQOG), siendo análisis rutinarios continuos y programados que les aportaron resultados relevantes para el desarrollo de sus proyectos de investigación.



Servicio de Informática



PERSONAL

Responsable del servicio

Patrick Moutel Márquez de Prado

El Servicio de Informática del IQOG se encarga de la gestión y el mantenimiento de los recursos informáticos del Instituto. Entre sus funciones figura la atención y soporte a usuarios y la resolución de incidencias de microinformática (tanto hardware como software), de informática científica y de comunicaciones en el entorno de red local e internet, en coordinación con el Servicio de TIC del CENQUIOR y la Secretaría General Adjunta de Informática del CSIC.

Asimismo, el Servicio es responsable de la administración de los servicios DNS, AD, antivirus y correo electrónico prestados desde la SGAI, así como del servicio web y servidores de archivos y de acceso.

<http://www.iqog.csic.es/es/servicios-iqog/servicio-de-informatica>

Cultura Científica



PERSONAL

Responsable del servicio

Daniel Gómez Torrico

El Servicio de Cultura Científica se encarga de la organización de las actividades y eventos de divulgación del IQOG.

Entre sus funciones está la organización de la participación en eventos como la Semana de la Ciencia o el Día Internacional de la Mujer y la Niña en la Ciencia, la elaboración de la Memoria Científica del instituto, el diseño y elaboración de bases de datos que permiten actualizar, guardar, organizar y compartir datos de forma digital, el diseño y preparación de ficheros autorrellenables que acompañan el plan de acogida del IQOG, el diseño y preparación de hojas de solicitud autorrellenables para los Servicios Científico Técnicos del IQOG, etc.

También lleva las cuentas institucionales del IQOG en Twitter y Facebook.



5. COMUNICACIÓN Y DIFUSIÓN DE LA CIENCIA

Ciclo de Conferencias del IQOG

El ciclo de conferencias del IQOG cuenta con una trayectoria de más de 15 años. Entre sus objetivos principales se encuentra la transmisión de temas actuales de investigación de la mano de los propios autores, estimulando el contacto entre los investigadores y del IQOG y los conferenciantes invitados a nuestro instituto.

CONFERENCIAS 2019

Los seminarios se han programado a lo largo de todo el año con una periodicidad quincenal. En la elaboración del programa se ha incluido a conferenciantes del mundo académico y de la industria, investigadores jóvenes y otros ya establecidos, con perspectivas distintas e interesantes para el personal en formación que asiste a las conferencias. En general, se han abarcado áreas de interés tanto para el conjunto de investigadores del IQOG, como para investigadores de otros institutos y universidades localizados en Madrid. Además, se han incluido las Jornadas Científicas del IQOG y un seminario sobre seguridad y buenas prácticas en el laboratorio impartido por miembros de la Comisión de Seguridad del propio Instituto. Cabe destacar que el Máster Interuniversitario en Química Orgánica, ha reconocido el carácter formativo del ciclo de conferencias del IQOG y a los alumnos matriculados en este Máster se les recomienda y acredita su asistencia, siendo esto un estipendio incentivo. Algunos de los conferenciantes que han participado en el ciclo durante el año 2019 son los doctores Yasuhiro Uozumi (Institute for Molecular Science, Japón), Juan Félix Espinosa (Lilly), Xavier Querol (IDAEA-CSIC) y Juan José Vaquero (Universidad de Alcalá). La relación completa de los participantes en 2019 se recoge a continuación:

Miércoles 16 de enero

Single particle y single cell ICP-MS análisis para la cuantificación de nanopartículas metálicas y acumulación intracelular de metales

Dra. Milagros Gómez (Universidad Complutense de Madrid).

Miércoles 23 de enero

Impacto y evolución de las técnicas biofísicas en Química Médica

Dr. Juan Félix Espinosa (Lilly).

Jueves 31 de enero

Diseño de materiales heterogéneos a partir de la modulación de las interfaces: electrolitos y superficies superhidrófobas

Dra. Nuria García (Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros-CSIC, Madrid).

Miércoles 13 de febrero

Calidad del aire y movilidad urbana

Dr. Xavier Querol (IDAEA-CSIC, Barcelona).

Miércoles 27 de febrero

Nuevas aplicaciones de la reacción aza-Michael intramolecular asimétrica

Dra. María Sánchez Roselló (Universidad de Valencia).

Miércoles 13 de marzo

Organic transformations in water with amphiphilic polymer-supported transition metal catalyst

Dr. Yasuhiro Uozumi (Institute for Molecular Science, Japón).

Miércoles 27 de marzo

Hydrogen bonding: from hypervalent iodine activation to self-assembling replication

Dr. Ignacio Colomer (Universidad Autónoma de Madrid).

Miércoles 3 de abril

Diseño de nuevos antígenos para el desarrollo de vacunas contra el cáncer

Dr. Francisco Corzana (Universidad de la Rioja).

Miércoles 8 de mayo

Complejos de paladio con ligandos NHC: de la catálisis en agua a la estabilización de estados de oxidación inusuales

Dr. Ernesto de Jesús Alcañiz (Universidad de Alcalá, Madrid).

Miércoles 22 de mayo

Explorando cromóforos orgánicos: bn-arenos

Dr. Juan José Vaquero (Universidad de Alcalá, Madrid).

Miércoles 5 de junio

Desarrollo de métodos analíticos que complementen al análisis sensorial para clasificar aceites de oliva virgen extra, virgen o lampante: Transferencia de nuestra investigación a la empresa

Dra. Lourdes Arce (Universidad de Córdoba).

Miércoles 19 de junio

Selectividad en catálisis: sililación, borilación y arilación de alquinos asimétricos

Dr. Pablo Mauleón (Universidad Autónoma de Madrid).

Miércoles 13 de noviembre

Diseño y síntesis de polímeros porosos para aplicaciones en energía

Dra. Marta Liras (IMDEA Energía, Madrid).

Miércoles 27 de noviembre

Reacciones de anelación catalizadas por metales de transición: variantes enantioselectivas y aplicaciones en síntesis

Dr. Fernando López (CIQUS-CSIC, Santiago de Compostela).

Miércoles 11 de diciembre

Dendrímeros y dendrones: nuevas posibilidades en el tratamiento de muestras para el estudio de proteínas

Dra. Concepción García (Universidad de Alcalá, Madrid).



CONFERENCIAS 2020

Los seminarios se programaron con normalidad hasta el 10 de marzo, fecha en la que se suspendieron por motivo de la propagación de la COVID-19.

Los conferenciantes que han participado en el ciclo durante el año 2020 son los que se recogen a continuación:

Miércoles 15 de enero

(Micro) reactores de flujo continuo en biocatálisis

Dr. Juan Bolívar (UCM, Madrid).

Viernes 24 de enero

Insight into natural products applications in green nanotechnology/nanomedicine

Dr. Ahmed A. Hussein (Cape Peninsula University of Technology).

Miércoles 12 de febrero

Los pingüinos como centinelas del ecosistema antártico

Dr. Andrés Barbosa (MNCN, CSIC).

Miércoles 26 de febrero

New Carbon Reactivity Rules

Dr. Marcos García Suero (ICIQ, Tarragona).



Dr. Ahmed A. Hussein
(Cape Peninsula
University of
Technology)
2020

Dr. Andrés Barbosa
(MNCN, CSIC)
2020



Dr. Marcos García
Suero (ICIQ,
Tarragona)
2020

Jornadas Científicas

Entre octubre y noviembre de 2019, el IQOG celebró sus Jornadas Científicas que tienen por objeto la presentación de los resultados científicos más significativos logrados en el último año por los diferentes grupos de investigación del Instituto.

Las Jornadas se llevaron a cabo en tres sesiones, con la programación que se detalla a continuación:

23 DE OCTUBRE DE 2019

Nuevas metodologías sintéticas basadas en sistemas insaturados

Pedro Almendros (Dpto. de Química Bio-Orgánica).

NT FORMAL SYSTEM & LANGUAGE

Pedro Noheda (Dpto. de Síntesis, Estructura y Propiedades de Compuestos Orgánicos).

Nuevas estrategias analíticas para la detección de fraudes en complementos alimenticios para el control del sobrepeso

María Luz Sanz (Dpto. de Análisis Instrumental y Química Ambiental).

Compuestos y materiales moleculares avanzados para bioimagen

José Luis Chiara (Dpto. de Química Bio-Orgánica).

Síntesis y reactividad de compuestos organosulfurados

Alma Viso (Dpto. de Síntesis, Estructura y Propiedades de Compuestos Orgánicos).

30 DE OCTUBRE DE 2019

Ciencia y sociedad, inhibidores de Calpaína y electroquímica

Bernardo Herradón (Dpto. de Síntesis, Estructura y Propiedades de Compuestos Orgánicos).

Carbohidratos y fluoróforos : Nuevas oportunidades en química y glicoquímica

Ana Gómez (Dpto. de Química Bio-Orgánica).

Métodos de HPLC y electroforesis capilar para preparación de muestra, separación y detección de glicoproteínas

Mercedes de Frutos (Dpto. de Análisis Instrumental y Química Ambiental).

Moléculas para el tratamiento de enfermedades complejas asociadas a la edad

José Luis Marco (Dpto. de Síntesis, Estructura y Propiedades de Compuestos Orgánicos).

Análisis de interacciones débiles: estudios de reactividad de glicósidos y reconocimiento molecular

Andrés González (Dpto. de Química Bio-Orgánica).

20 DE NOVIEMBRE DE 2019

Estudio de la transferencia de quiralidad en sistemas organometálicos

Marta García-Avello (Dpto. de Síntesis, Estructura y Propiedades de Compuestos Orgánicos).

Desarrollo de metodologías avanzadas para el análisis de contaminantes orgánicos

Belén Gómara (Dpto. de Análisis Instrumental y Química Ambiental).

Quitosanitos heparanizados : el reto de conocer su estructura para el desarrollo de aplicaciones biomédicas

Julia Revuelta (Dpto. de Química Bio-Orgánica).

Síntesis de nuevos selenoésteres con actividad citotóxica e inhibidora de las bombas de eflujo

Enrique Domínguez (Dpto. de Síntesis, Estructura y Propiedades de Compuestos Orgánicos).

Contaminantes orgánicos persistentes

Begoña Jiménez (Dpto. de Análisis Instrumental y Química Ambiental).

Semana de la Ciencia

El IQOG continúa participando en las actividades desarrolladas en el marco de la Semana de la Ciencia que se celebra cada año durante el mes de noviembre en la Comunidad de Madrid. Las actividades son gratuitas y están dirigidas a todos los públicos, cubriendo diferentes edades y niveles de formación.

XIX Edición: 7 al 17 de noviembre de 2019

XX Edición: 2 al 15 de noviembre de 2020*

El IQOG participa con diferentes actividades: el taller “¿Quieres venir a preparar la Aspirina?”, el Campeonato “UNO QUÍMICO” y las conferencias “¿Qué es y para qué sirve el año internacional de la tabla periódica de los elementos químicos?” y “Los avances de la química y su impacto en la sociedad”.

TALLER “¿QUIERES VENIR A PREPARAR LA ASPIRINA?”

En 2019, en esta actividad, cerca de 300 participantes realizaron una reacción de síntesis con el fin de preparar pastillas de aspirina, bajo la supervisión de los investigadores del Instituto.



**Todas las actividades fueron programadas con carácter presencial, y, debido a las restricciones de aforo existentes por el SARS-Cov2 en el momento que debían celebrarse, tuvieron que ser canceladas.*

CAMPEONATO DE "UNO QUÍMICO"

Con motivo del Año Internacional de la Tabla Periódica de los Elementos Químicos, y empleando la baraja de cartas diseñada por Bernardo Herradón en colaboración con Carmen Arribas (UPM), el IQOG organizó un campeonato de UNO Químico en el que participaron estudiantes de la ESO de distintos colegios de Madrid.

En las cartas se representan tanto los elementos químicos de la tabla periódica como científicos y científicas que han tenido un papel relevante en la química.

Se pueden descargar en el siguiente enlace:

<https://www.grupo-sm.com/es/post/tabla-periodica>



CONFERENCIAS DIVULGATIVAS

Con motivo de la celebración en 2019 del Año Internacional de la Tabla Periódica de los Elementos Químicos, el Dr. Bernardo Herradón, investigador del IQOG impartió la conferencia titulada “¿Qué es y para qué sirve el año internacional de la tabla periódica de los elementos químicos?” a la que asistieron alumnos de 2º de Bachillerato de diferentes institutos de Madrid.

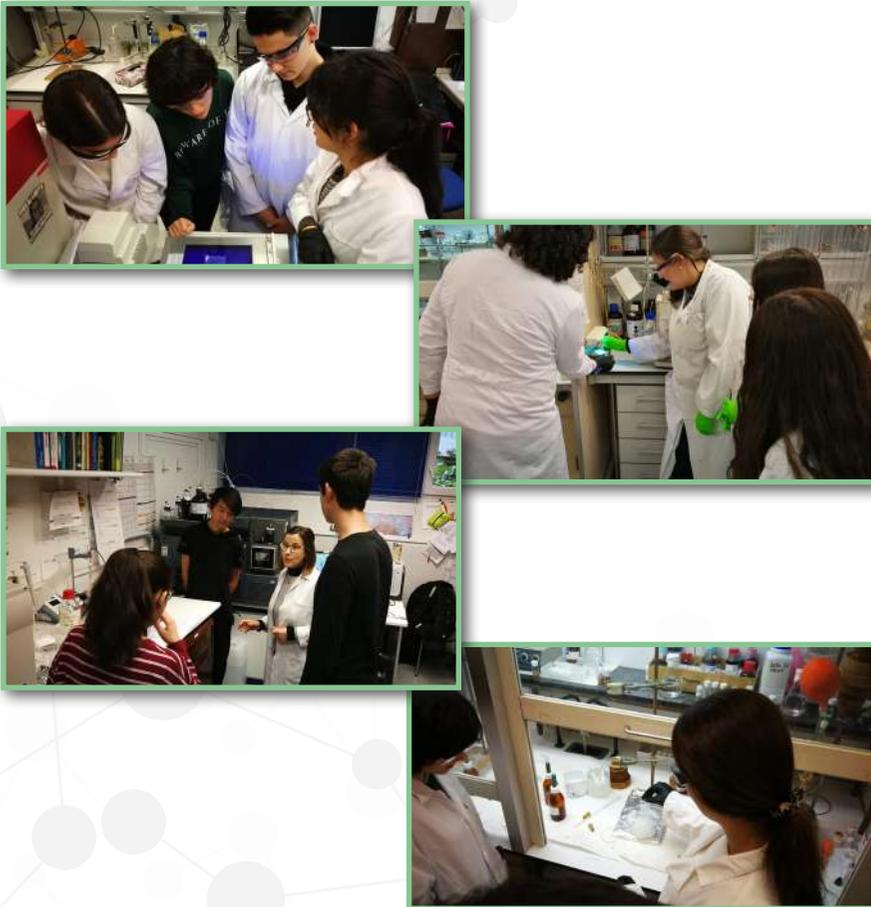
Además, parte de las conferencias impartidas en el marco del curso de divulgación “Los avances de la química y su impacto en la sociedad” (organizado por el Dr. Bernardo Herradón) se publicitaron y tuvieron lugar en el contexto de las actividades organizadas por el IQOG con motivo de la celebración de la Semana de la Ciencia 2019.



Programa 4º ESO+Empresa

El programa "4º ESO+Empresa" es una iniciativa de la Comunidad de Madrid para acercar el sistema educativo al entorno laboral y con el propósito de que los jóvenes estén mejor preparados en la elección de su futuro profesional. El IQOG se unió por primera vez a este programa en el año 2014 y desde entonces continúa colaborando de manera continuada.

Las estancias se desarrollaron durante los días 3, 4 y 5 de abril del año 2019.



Día Internacional de la Mujer y la Niña en la Ciencia

El 11 de febrero se celebra el **Día Internacional de la Mujer y la Niña en la Ciencia**, y desde el IQOG, las investigadoras Ana Gómez, Belén Gómara y Dianelis Toledo visitan colegios e institutos dando su charla "*Tres científicas del CSIC: de la universidad a liderar tu propio grupo de investigación*".

Durante el año 2019 visitaron el Colegio La Salle Maravillas y en 2020 estuvieron en el Colegio Corazón Inmaculado.



Otras actividades de divulgación

"Los avances de la química y su impacto en la sociedad". Este curso de divulgación se realiza de forma anual y está organizado por el investigador del IQOG Bernardo Herradón. A través de diferentes conferencias y mesas redondas se abordan temas que van desde las aplicaciones de la química en áreas tan diversas como la ciencia de materiales, biomateriales y enología, hasta la relación de la química con las ciencias de la vida, la energía, la toxicología y el desarrollo de fármacos. Las conferencias son impartidas por algunos de los científicos más relevantes de España, incluyendo varios académicos, premios nacionales de investigación, premios Jaime I, etc. El curso está dirigido a público en general ya que los temas son tratados con un carácter divulgativo, pero con rigor científico.

En 2019 se celebró la VII edición del curso, que tuvo lugar en el IQOG entre el 12 de septiembre y el 28 de noviembre.

Esta edición ha sido telemática: 'Alrededor de la tabla periódica y los elementos químicos', constando de 10 conferencias y una mesa redonda.



Canal Divulgación es un portal de divulgación científica de Youtube con vídeos que muestran, de forma sencilla y didáctica, distintas técnicas de laboratorio, métodos y temas relacionados con las actividades de investigación del Instituto de Química Orgánica General (IQOG-CSIC). Los vídeos han sido realizados íntegramente (filmación, dibujos, animación, etc.) por Guillermo Corrales, del departamento de Química Bio-Orgánica del IQOG-CSIC. En sus 9 años de existencia, Canal Divulgación ha alcanzado los 24.000 suscriptores y las más de 7 millones de visualizaciones. Se puede acceder directamente al portal en el siguiente enlace:

<https://www.youtube.com/user/CanalDivulgacion>

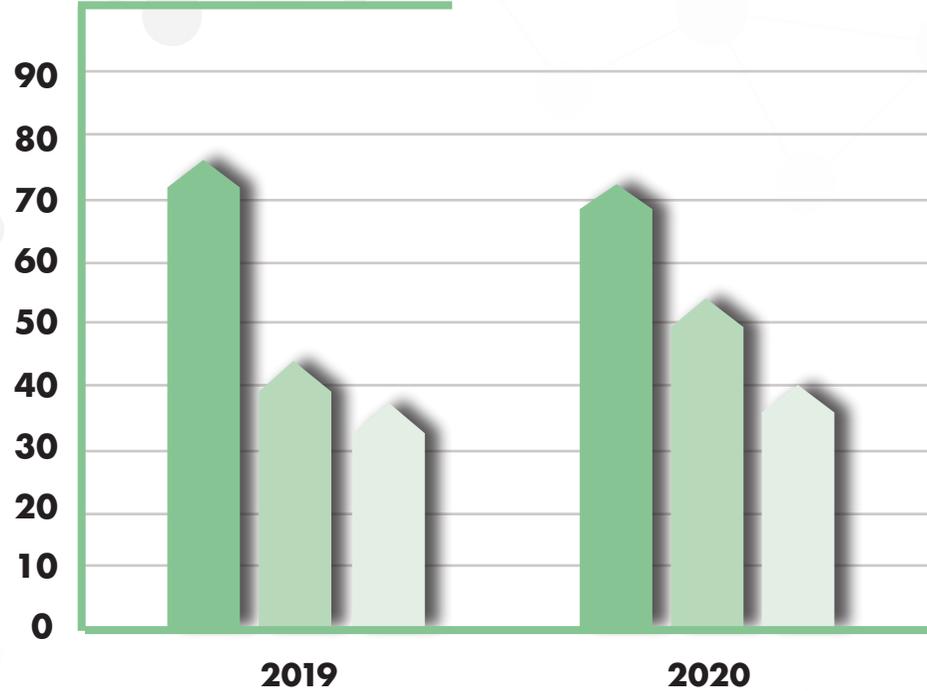
En la **página web del IQOG** (www.iqog.csic.es) se recogen las novedades más importantes, noticias, eventos, publicaciones y ofertas de empleo, así como la actividad investigadora del personal científico del Instituto. Desde el año 2012, el IQOG también participa en distintas redes sociales, para dar a conocer y difundir todas las informaciones de actualidad, especialmente a través de Facebook ([@iqog.csic](https://www.facebook.com/iqog.csic)) y Twitter ([@IQOG_CSIC](https://twitter.com/IQOG_CSIC)). La cuenta de Twitter cuenta con más de 1200 seguidores.



6. ANEXO. PUBLICACIONES

Producción Científica

PUBLICACIONES IQOG



Total Publicaciones	77	71
Publicaciones Q1	42	52
Publicaciones D1	37	40



Listado de Publicaciones

2019

Malek, R., Arribas, R.L., Palomino-Antolin, A., Totoson, P., Demougeot, C., Kobrlova, T., Soukup, O., Iriepa, I., Moraleda, I., Diez-Iriepa, D., Godyń, J., Panek, D., Malawska, B., Głuch-Lutwin, M., Mordyl, B., Siwek, A., Chabchoub, F., Marco-Contelles, J., Kiec-Kononowicz, K., Egea, J., De Los Ríos, C., Ismaili, L. New Dual Small Molecules for Alzheimer's Disease Therapy Combining Histamine H3 Receptor (H3R) Antagonism and Calcium Channels Blockade with Additional Cholinesterase Inhibition. (2019) *Journal of Medicinal Chemistry*, 62 (24), pp. 11416-11422.

DOI: [10.1021/acs.jmedchem.9b00937](https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.9b00937)

Lemke, C., Christmann, J., Yin, J., Alonso, J.M., Serrano, E., Chioua, M., Ismaili, L., Martínez-Grau, M.A., Beadle, C.D., Vetman, T., Dato, F.M., Bartz, U., Elsinghorst, P.W., Pietsch, M., Müller, C.E., Iriepa, I., Wille, T., Marco-Contelles, J., Gütschow, M. Chromenones as Multineurotargeting Inhibitors of Human Enzymes. (2019) *ACS Omega*, 4 (26), pp. 22161-22168.

DOI: [10.1021/acsomega.9b03409](https://doi.org/10.1021/acsomega.9b03409)

Pachón-Angona, I., Martin, H., Chhor, S., Oset-Gasque, M.-J., Refouvelet, B., Marco-Contelles, J., Ismaili, L. Synthesis of new ferulic/lipoic/comenic acid-melatonin hybrids as antioxidants and Nrf2 activators via Ugi reaction. (2019) *Future Medicinal Chemistry*, 11 (24), pp. 3097-3108.

DOI: [10.4155/fmc-2019-0191](https://doi.org/10.4155/fmc-2019-0191)

Oliden-Sánchez, A., Sola-Llano, R., Bañuelos, J., García-Moreno, I., Uriel, C., López, J.C., Gómez, A.M. Tuning the Photonic Behavior of Symmetrical bis-BODIPY Architectures: The Key Role of the Spacer Moiety. (2019) *Frontiers in Chemistry*, 7, art. no. 801, .

DOI: [10.3389/fchem.2019.00801](https://doi.org/10.3389/fchem.2019.00801)

De la Cruz-Claire, M.L., Céspedes-Llave, A.A., Ulloa, M.T., Benito-Lama, M., Domínguez-álvarez, E., Bastida, A. Inhibition–disruption of *Candida glabrata* biofilms: Symmetrical selenoesters as potential anti-biofilm agents. (2019) *Microorganisms*, 7 (12), art. no. 664, .

DOI: [10.3390/microorganisms7120664](https://doi.org/10.3390/microorganisms7120664)

Mkaouar, K., Iriepa, I., Diez-Iriepa, D., Marco-Contelles, J., Ismaili, L., Chabchoub, F. Synthesis of (±)-cis-1-Aryl-3-oxo-2,3-dihydro-1H-benzo[f]chromene-2-carbonitriles and (±)-trans-4-Aryl-2-oxo-3,4-dihydro-2H-benzo[h]chromene-3-carbonitriles. (2019) *ChemistrySelect*, 4 (44), pp. 12902-12905.

DOI: [10.1002/slct.201903982](https://doi.org/10.1002/slct.201903982)

Avellanal-Zaballa, E., Ventura, J., Gartzia-Rivero, L., Bañuelos, J., García-Moreno, I., Uriel, C., Gómez, A.M., Lopez, J.C. Towards Efficient and Photostable Red-Emitting Photonic Materials Based on Symmetric All-BODIPY-Triads, -Pentads, and -Hexads. (2019) *Chemistry - A European Journal*, 25 (65), pp. 14959-14971.

DOI: [10.1002/chem.201903804](https://doi.org/10.1002/chem.201903804)

Spengler, G., Kincses, A., Mosolygó, T., Maræ, M.A., Nové, M., Gajdács, M., Sanmartín, C., McNeil, H.E., Blair, J.M.A., Domínguez-Álvarez, E.

Antiviral, antimicrobial and antibiofilm activity of selenoesters and selenoanhydrides. (2019) *Molecules*, 24 (23), art. no. 4264, .

DOI: [10.3390/molecules24234264](https://doi.org/10.3390/molecules24234264)

Choura, E., Ncir, M., Maalej, E., Marco-Contelles, J., Ismaili, L., Chabchoub, F. New method for the synthesis of 4-aryl-3,4-dihydro-2H-benzo[g]chromene-2,5,10-triones. (2019) *Synthetic Communications*, 49 (21), pp. 2834-2839.

DOI: [10.1080/00397911.2019.1646286](https://doi.org/10.1080/00397911.2019.1646286)

Rodríguez-Sánchez, S., Soria, A.C., Lebrón-Aguilar, R., Sanz,

M.L., Ruiz-Matute, A.I. Evaluation of different ionic liquid stationary phases for the analysis of carbohydrates by gas chromatography-mass spectrometry. (2019) *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 411 (28), pp. 7461-7472.

DOI: 10.1007/s00216-019-02118-0

Vélez, J.F., Vázquez-Santos, M.B., Amarilla, J.M., Herradón, B., Mann, E., del Río, C., Morales, E. Geminal pyrrolidinium and piperidinium dicationic ionic liquid electrolytes. Synthesis, characterization and cell performance in LiMn2O4 rechargeable lithium cells. (2019) *Journal of Power Sources*, 439, art. no. 227098.

DOI: 10.1016/j.jpowsour.2019.227098

González-Gaya, B., Casal, P., Jurado, E., Dachs, J., Jiménez, B. Vertical transport and sinks of perfluoroalkyl substances in the global open ocean. (2019) *Environmental Science: Processes and Impacts*, 21 (11), pp. 1957-1969.

DOI: 10.1039/c9em00266a

Blázquez-Moraleja, A., Álvarez-Fernández, D., Prieto Montero, R., García-Moreno, I., Martínez-Martínez, V., Bañuelos, J., Sáenz-de-Santa-María, I., Chiara, M.D., Chiara, J.L. A general modular approach for the solubility tagging of BODIPY dyes. (2019) *Dyes and Pigments*, 170, art. no. 107545.

DOI: 10.1016/j.dyepig.2019.107545

Avello, M.G., de la Torre, M.C., Sierra, M.A., Gornitzka, H., Hemmert, C. Central (S) to Central (M=Ir, Rh) to Planar (Metallocene, M=Fe, Ru) Chirality Transfer Using Sulfoxide-Substituted Mesoionic Carbene Ligands: Synthesis of Bimetallic Planar Chiral Metallocenes. (2019) *Chemistry - A European Journal*, 25 (58), pp. 13344-13353.

DOI: 10.1002/chem.201902102

Marco-Contelles, J. "AβTau", Lobby or Religion?. (2019) *ACS Medicinal Chemistry Letters*, 10 (10), pp. 1361-1362.

DOI: 10.1021/acsmchemlett.9b00439

Mena-García, A., Ruiz-Matute, A.I., Soria, A.C., Sanz, M.L. Green techniques for extraction of bioactive carbohydrates. (2019) *TrAC - Trends in Analytical Chemistry*, 119, art. no. 115612.

DOI: 10.1016/j.trac.2019.07.023

Malek, R., Maj, M., Wnorowski, A., Józwiak, K., Martin, H., Iriepa, I., Moraleda, I., Chabchoub, F., Marco-Contelles, J., Ismaili, L. Multi-target 1,4-dihydropyridines showing calcium channel blockade and antioxidant capacity for Alzheimer's disease therapy. (2019) *Bioorganic Chemistry*, 91, art. no. 103205.

DOI: 10.1016/j.bioorg.2019.103205

Domínguez-Álvarez, E., Łażewska, D., Szabó, Z., Hagenow, S., Reiner, D., Gajdács, M., Spengler, G., Stark, H., Handzlik, J., Kieć-Kononowicz, K. The Search for Histamine H4 Receptor Ligands with Anticancer Activity among Novel (Thio)urea Derivatives. (2019) *ChemistrySelect*, 4 (36), pp. 10943-10952.

DOI: 10.1002/slct.201902747

Tomoni, A., Lees, J., Santana, A.G., Bolanos-Garcia, V.M., Bastida, A. Pseudokinases: From allosteric regulation of catalytic domains and the formation of macromolecular assemblies to emerging drug targets. (2019) *Catalysts*, 9 (9), art. no. 778, .

DOI: 10.3390/catal9090778

Ramos, L. Use of new tailored and engineered materials for matrix solid-phase dispersion. (2019) *TrAC - Trends in Analytical Chemistry*, 118, pp. 751-758.

DOI: 10.1016/j.trac.2019.07.006

Zárate, S.G., Bastida, A., Santana, A.G., Revuelta, J. Synthesis of ring II/III fragment of Kanamycin: A new minimum structural motif for aminoglycoside recognition. (2019) *Antibiotics*, 8 (3), art. no. 109, .

DOI: 10.3390/antibiotics8030109

Monterde, C., Navarro, R., Iglesias, M., Sánchez, F. Adamantyl-BINOL as platform for chiral porous polymer aromatic frameworks.

Multiple applications as recyclable catalysts. (2019) *Journal of Catalysis*, 377, pp. 609-618.

DOI: [10.1016/j.jcat.2019.07.059](https://doi.org/10.1016/j.jcat.2019.07.059)

Montalvillo-Jiménez, L., Santana, A.G., Corzana, F., Jiménez-Osés, G., Jiménez-Barbero, J., Gómez, A.M., Asensio, J.L. Impact of Aromatic Stacking on Glycoside Reactivity: Balancing CH/ π and Cation/ π Interactions for the Stabilization of Glycosyl-Oxocarbenium Ions. (2019) *Journal of the American Chemical Society*, 141 (34), pp. 13372-13384.

DOI: [10.1021/jacs.9b03285](https://doi.org/10.1021/jacs.9b03285)

Sierra, M.A., De La Torre, M.C. 1,2,3-Triazolium-Derived Mesoionic Carbene Ligands Bearing Chiral Sulfur-Based Moieties: Synthesis, Catalytic Properties, and Their Role in Chirality Transfer. (2019) *ACS Omega*, 4 (8), pp. 12983-12994.

DOI: [10.1021/acsomega.9b01285](https://doi.org/10.1021/acsomega.9b01285)

Roscales, J.L., Vicente, A., Ryan, P.G., González-Solís, J., Jiménez, B. Spatial and Interspecies Heterogeneity in Concentrations of Perfluoroalkyl Substances (PFASs) in Seabirds of the Southern Ocean. (2019) *Environmental Science and Technology*, 53 (16), pp. 9855-9865.

DOI: [10.1021/acs.est.9b02677](https://doi.org/10.1021/acs.est.9b02677)

Castellanos, A., Osante, I., Fernández, J., Fernández de la Pradilla, R., Viso, A. Oxidative reactions of sulfinyl dienes as an entry to functionalized carbohydrate-like products and furans. (2019) *Tetrahedron*, 75 (32), pp. 4287-4297.

DOI: [10.1016/j.tet.2019.04.014](https://doi.org/10.1016/j.tet.2019.04.014)

Casal, P., Casas, G., Vila-Costa, M., Cabrerizo, A., Pizarro, M., Jiménez, B., Dachs, J. Snow amplification of persistent organic pollutants at coastal Antarctica. (2019) *Environmental Science and Technology*, 53 (15), pp. 8872-8882.

DOI: [10.1021/acs.est.9b03006](https://doi.org/10.1021/acs.est.9b03006)

Svobodova, B., Mezeiova, E., Hepnarova, V., Hrabínova, M., Muckova, L., Kobrlova, T., Jun, D., Soukup, O., Jimeno, M.L., Marco-Contelles, J., Korabecny, J. Exploring structure-activity relationship in tacrine-squaramide derivatives as potent cholinesterase inhibitors. (2019) *Biomolecules*, 9 (8), art. no. 379.

DOI: [10.3390/biom9080379](https://doi.org/10.3390/biom9080379)

Chioua, M., González-Camuñas, A., Catarozzo, M.T., Alcaro, S., Ortuso, F., Yáñez, M., Marco-Contelles, J. Synthesis, Monoamine Oxidase Inhibition and Computational Analysis of Diversely Substituted N-Propargylated-1,3,5-triazines. (2019) *ChemistrySelect*, 4 (28), pp. 8334-8337.

DOI: [10.1002/slct.201901271](https://doi.org/10.1002/slct.201901271)

Martín-Ortiz, A., Ruiz-Matute, A.I., Sanz, M.L., Moreno, F.J., Herrero, M. Separation of di- and trisaccharide mixtures by comprehensive two-dimensional liquid chromatography. Application to prebiotic oligosaccharides. (2019) *Analytica Chimica Acta*, 1060, pp. 125-132.

DOI: [10.1016/j.aca.2019.01.040](https://doi.org/10.1016/j.aca.2019.01.040)

Gomez, A.M., Lopez, J.C. Carbohydrates and BODIPYs: Access to bioconjugatable and water-soluble BODIPYs. (2019) *Pure and Applied Chemistry*, 91 (7), pp. 1073-1083.

DOI: [10.1515/pac-2019-0204](https://doi.org/10.1515/pac-2019-0204)

Martín-Ortiz, A., Moreno, F.J., Ruiz-Matute, A.I., Sanz, M.L. Selective biotechnological fractionation of goat milk carbohydrates. (2019) *International Dairy Journal*, 94, pp. 38-45.

DOI: [10.1016/j.idairyj.2019.02.012](https://doi.org/10.1016/j.idairyj.2019.02.012)

García-Arellano, H., González-Alfonso, J.L., Ubilla, C., Comelles, F., Alcalde, M., Bernabé, M., Parra, J.-L., Ballesteros, A.O., Plou, F.J. Production and surfactant properties of tert-butyl α -D-glucopyranosides catalyzed by cyclodextrin glucanotransferase. (2019) *Catalysts*, 9 (7), art. no. 575.

DOI: [10.3390/catal9070575](https://doi.org/10.3390/catal9070575)

Chioua, M., Salgado-Ramos, M., Diez-Iriepa, D., Escobar-Peso, A., Iriepa, I., Hadjipavlou-Litina, D., Martínez-Alonso, E., Alcázar, A., Marco-Contelles, J. Novel Quinolylnitrones Combining Neuroprotective and Antioxidant Properties. (2019) *ACS Chemical Neuroscience*, 10 (6), pp. 2703-2706.

DOI: 10.1021/acscchemneuro.9b00152

Sánchez-Moreno, I., Benito-Arenas, R., Montero-Calle, P., Hermida, C., García-Junceda, E., Fernández-Mayoralas, A. Simple and Practical Multigram Synthesis of d-Xylonate Using a Recombinant Xylose Dehydrogenase. (2019) *ACS Omega*, 4 (6), pp. 10593-10598.

DOI: 10.1021/acsomega.9b01090

Alcaide, B., Almendros, P., Lázaro-Milla, C. Convenient Access to 2,3-Disubstituted-cyclobut-2-en-1-ones under Suzuki Conditions and Their Synthetic Utility. (2019) *Chemistry - A European Journal*, 25 (31), pp. 7547-7552.

DOI: 10.1002/chem.201900690

Méndez-Líter, J.A., Tundidor, I., Nieto-Domínguez, M., De Toro, B.F., González Santana, A., De Eugenio, L.I., Prieto, A., Asensio, J.L., Cañada, F.J., Sánchez, C., Martínez, M.J. Transglycosylation products generated by *Talaromyces amestolkiae* GH3 β -glucosidases: Effect of hydroxytyrosol, vanillin and its glucosides on breast cancer cells. (2019) *Microbial Cell Factories*, 18 (1), art. no. 97, .

DOI: 10.1186/s12934-019-1147-4

Sierra, M.A., Casarrubios, L., de la Torre, M.C. Bio-Organometallic Derivatives of Antibacterial Drugs. (2019) *Chemistry - A European Journal*, 25 (30), pp. 7232-7242.

DOI: 10.1002/chem.201805985

Piotrowska, D.G., Mediavilla, L., Cuarental, L., Głowacka, I.E., Marco-Contelles, J., Hadjipavlou-Litina, D., López-Muñoz, F., Oset-Gasque, M.J. Synthesis and Neuroprotective Properties of N-Substituted C-Dialkoxyphosphorylated Nitrones. (2019) *ACS*

Omega, 4 (5), pp. 8581-8587.

DOI: 10.1021/acsomega.9b00189

Bartolini, M., Marco-Contelles, J. Tacrines as Therapeutic Agents for Alzheimer's Disease. IV. The Tacripyrines and Related Annulated Tacrines. (2019) *Chemical Record*, 19 (5), pp. 927-937.

DOI: 10.1002/tcr.201800155

Jiménez-Almarza, A., Diez-Iriepa, D., Chioua, M., Chamorro, B., Iriepa, I., Martínez-Murillo, R., Hadjipavlou-Litina, D., Oset-Gasque, M.J., Marco-Contelles, J. Synthesis, neuroprotective and antioxidant capacity of PBN-related indanonitrones. (2019) *Bioorganic Chemistry*, 86, pp. 445-451.

DOI: 10.1016/j.bioorg.2019.01.071

Ramos, E., Palomino-Antolín, A., Bartolini, M., Iriepa, I., Moraleda, I., Diez-Iriepa, D., Samadi, A., Cortina, C.V., Chioua, M., Egea, J., Romero, A., Marco-Contelles, J. Quinoxalinetacrine QT78, a cholinesterase inhibitor as a potential ligand for Alzheimer's disease therapy. (2019) *Molecules*, 24 (8), art. no. 1503, .

DOI: 10.3390/molecules24081503

Mosolygó, T., Kincses, A., Csonka, A., Tönki, Á.S., Witek, K., Sanmartín, C., Marć, M.A., Handzlik, J., Kieć-Kononowicz, K., Domínguez-Álvarez, E., Spengler, G. Selenocompounds as novel antibacterial agents and bacterial efflux pump inhibitors. (2019) *Molecules*, 24 (8), art. no. 1487, .

DOI: 10.3390/molecules24081487

Carrero-Carralero, C., Escobar-Arnanz, J., Ros, M., Jiménez-Falcao, S., Sanz, M.L., Ramos, L. An untargeted evaluation of the volatile and semi-volatile compounds migrating into food simulants from polypropylene food containers by comprehensive two-dimensional gas chromatography-time-of-flight mass spectrometry. (2019) *Talanta*, 195, pp. 800-806.

DOI: 10.1016/j.talanta.2018.12.011

Benito-Arenas, R., Zárate, S.G., Revuelta, J., Bastida, A. Chondroitin sulfate-degrading enzymes as tools for the development of new pharmaceuticals. (2019) *Catalysts*, 9 (4), art. no. 322, .

DOI: 10.3390/catal9040322

Benchekroun, M., Pachón-Angona, I., Luzet, V., Martin, H., Oset-Gasque, M.-J., Marco-Contelles, J., Ismaili, L. Synthesis, antioxidant and A β anti-aggregation properties of new ferulic, caffeic and lipoic acid derivatives obtained by the Ugi four-component reaction. (2019) *Bioorganic Chemistry*, 85, pp. 221-228.

DOI: 10.1016/j.bioorg.2018.12.029

Marco-Contelles, J. Facts, Results, and Perspectives of the Current Alzheimer's Disease Research. (2019) *ACS Chemical Neuroscience*, 10 (3), pp. 1127-1128.

DOI: 10.1021/acschemneuro.9b00034

de los Ríos, C., Marco-Contelles, J. Tacrines for Alzheimer's disease therapy. III. The PyridoTacrines. (2019) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 166, pp. 381-389.

DOI: 10.1016/j.ejmech.2019.02.005

Hernáiz-Izquierdo, M., Galindo-Iranzo, P., García-Armada, M.P., Saiz-López, A., Gómara, B., Quintanilla-López, J.E., Lebrón-Aguilar, R. Direct quantification of inorganic iodine in seawater by mixed-mode liquid chromatography-electrospray ionization-mass spectrometry. (2019) *Journal of Chromatography A*, 1588, pp. 99-107.

DOI: 10.1016/j.chroma.2018.12.046

Compañión, I., Guerreiro, A., Mangini, V., Castro-López, J., Escudero-Casao, M., Avenoza, A., Busto, J.H., Castellón, S., Jiménez-Barbero, J., Asensio, J.L., Jiménez-Osés, G., Boutureira, O., Peregrina, J.M., Hurtado-Guerrero, R., Fiammengo, R., Bernardes, G.J.L., Corzana, F. Structure-Based Design of Potent Tumor-Associated Antigens: Modulation of Peptide Presentation by Single-Atom O/S or O/Se Substitutions at the Glycosidic Linkage. (2019) *Journal of the*

American Chemical Society, 141 (9), pp. 4063-4072.

DOI: 10.1021/jacs.8b13503

Alcaide, B., Almendros, P., Fernández, I., del Campo, T.M., Palop, G., Toledano-Pinedo, M., Delgado-Martínez, P. Chemoselectivity Switching in the Rhodium-Catalyzed Reactions of 4-Substituted-1-sulfonyl-1,2,3-triazoles with Allenols: Noticeable Differences between 4-Acyl- and 4-Aryl-Triazoles. (2019) *Advanced Synthesis and Catalysis*, 361 (5), pp. 1160-1165.

DOI: 10.1002/adsc.201801424

Zárate, S.G., Morales, P., Swiderek, K., Bolanos-Garcia, V.M., Bastida, A. A molecular modeling approach to identify novel inhibitors of the major facilitator superfamily of efflux pump transporters. (2019) *Antibiotics*, 8 (1), art. no. 25, .

DOI: 10.3390/antibiotics8010025

Chioua, M., Martínez-Alonso, E., Gonzalo-Gobernado, R., Ayuso, M.I., Escobar-Peso, A., Infantes, L., Hadjipavlou-Litina, D., Montoya, J.J., Montaner, J., Alcázar, A., Marco-Contelles, J. New Quinolylnitrones for Stroke Therapy: Antioxidant and Neuroprotective (Z)- N- tert-Butyl-1-(2-chloro-6-methoxyquinolin-3-yl) methanimine Oxide as a New Lead-Compound for Ischemic Stroke Treatment. (2019) *Journal of Medicinal Chemistry*, 62 (4), pp. 2184-2201.

DOI: 10.1021/acs.jmedchem.8b01987

Bartalini, A., Muñoz-Arnanz, J., Marsili, L., Mazzariol, S., Fossi, M.C., Jiménez, B. Evaluation of PCDD/Fs, dioxin-like PCBs and PBDEs in sperm whales from the Mediterranean Sea. (2019) *Science of the Total Environment*, 653, pp. 1417-1425.

DOI: 10.1016/j.scitotenv.2018.10.436

Muñoz-Arnanz, J., Chirife, A.D., Galletti Vernazzani, B., Cabrera, E., Sironi, M., Millán, J., Attard, C.R.M., Jiménez, B. First assessment of persistent organic pollutant contamination in blubber of Chilean blue whales from Isla de Chiloé southern Chile. (2019) *Science of the Total Environment*, 650, pp. 1521-1528.

DOI: 10.1016/j.scitotenv.2018.09.070

González-Gaya, B., Martínez-Varela, A., Vila-Costa, M., Casal, P., Cerro-Gálvez, E., Berrojalbiz, N., Lundin, D., Vidal, M., Mompeán, C., Bode, A., Jiménez, B., Dachs, J. Biodegradation as an important sink of aromatic hydrocarbons in the oceans. (2019) *Nature Geoscience*, 12 (2), pp. 119-125.

DOI: 10.1038/s41561-018-0285-3

Ruiz-Aceituno, L., Carrero-Carralero, C., Ramos, L., Sanz, M.L. Selective fractionation of sugar alcohols using ionic liquids. (2019) *Separation and Purification Technology*, 209, pp. 800-805.

DOI: 10.1016/j.seppur.2018.09.026

Monterde, C., Navarro, R., Iglesias, M., Sánchez, F. Fluorine-Phenanthroimidazole Porous Organic Polymer: Efficient Microwave Synthesis and Photocatalytic Activity. (2019) *ACS Applied Materials and Interfaces*, 11 (3), pp. 3459-3465.

DOI: 10.1021/acsami.8b18053

Spengler, G., Gajdács, M., Marć, M.A., Domínguez-Álvarez, E., Sanmartín, C. Organoselenium compounds as novel adjuvants of chemotherapy drugs—a promising approach to fight cancer drug resistance. (2019) *Molecules*, 24 (2), art. no. 336, .

DOI: 10.3390/molecules24020336

Megías-Pérez, R., Ruiz-Matute, A.I., Corno, M., Kuhnert, N. Analysis of minor low molecular weight carbohydrates in cocoa beans by chromatographic techniques coupled to mass spectrometry. (2019) *Journal of Chromatography A*, 1584, pp. 135-143.

DOI: 10.1016/j.chroma.2018.11.033

Farina-Gomez, N., Navarro-Calderon, D., Puerta, A., Gonzalez, M., Diez-Masa, J.C., de Frutos, M. Capillary electrophoresis analysis of prostate-specific antigen (PSA). (2019) *Methods in Molecular Biology*, 1972, pp. 221-234.

DOI: 10.1007/978-1-4939-9213-3_16

Martí, S., Bastida, A., Świderek, K. Theoretical studies on mechanism

of inactivation of kanamycin a by 4'-O-Nucleotidyltransferase. (2019) *Frontiers in Chemistry*, 7 (JAN), art. no. 660, .

DOI: 10.3389/fchem.2018.00660

Alcaide, B., Almendros, P., Martínez Del Campo, T., Martín, L., Palop, G., Toledano-Pinedo, M. Oxidative selenofunctionalization of allenes: Convenient access to 2-(phenylselanyl)-but-2-enals and 4-oxo-3-(phenylselanyl)pent-2-enoates. (2019) *Organic Chemistry Frontiers*, 6 (14), pp. 2447-2451.

DOI: 10.1039/c9qo00561g

Fernández-Cervantes, M., Pérez-Alonso, M.J., Blanco-Salas, J., Soria, A.C., Ruiz-Téllez, T. Analysis of the essential oils of *Chamaemelum fuscatum* (Brot.) Vasc. from Spain as a contribution to reinforce its ethnobotanical use. (2019) *Forests*, 10 (7), art. no. 539.

DOI: 10.3390/f10070539

Uriel, C., Sola-Llano, R., Bañuelos, J., Gomez, A.M., Lopez, J.C. A malonyl-based scaffold for conjugatable multivalent carbohydrate-bodipy presentations. (2019) *Molecules*, 24 (11), art. no. 2050, .

DOI: 10.3390/molecules24112050

Barrios-Romero, M.M., Crevillén, A.G., Puerta, A., de Frutos, M., Diez-Masa, J.C. Monitorization of α 1-acid glycoprotein deglycosylation using SU-8 microchips electrophoresis with LIF detection. (2019) *Methods in Molecular Biology*, 1972, pp. 25-39.

DOI: 10.1007/978-1-4939-9213-3_3

Mascareñas, J.L., Varela, I., López, F. Allenes and Derivatives in Gold(I)- and Platinum(II)-Catalyzed Formal Cycloadditions. (2019) *Accounts of Chemical Research*. Article in Press.

DOI: 10.1021/acs.accounts.8b00567

Destito, P., Sousa-Castillo, A., Couceiro, J.R., López, F., Correa-Duarte, M.A., Mascareñas, J.L. Hollow nanoreactors for Pd-catalyzed Suzuki-Miyaura coupling and O-propargyl cleavage

reactions in bio-relevant aqueous media. (2019) *Chemical Science*, 10 (9), pp. 2598-2603.

DOI: [10.1039/C8SC04390F](https://doi.org/10.1039/C8SC04390F)

Malek, R., Refouvelet, B., Benchekroun, M., Iriepa, I., Moraleda, I., Andrys, R., Musilek, K., Marco-Contelles, J., Ismaili, L. Synthesis and biological evaluation of novel chromone+donepezil hybrids for alzheimer's disease therapy. (2019) *Current Alzheimer Research*, 16 (9), pp. 815-820.

DOI: [10.2174/1567205016666191011112624](https://doi.org/10.2174/1567205016666191011112624)

Kharm, A., Grman, M., Misak, A., Domínguez-Álvarez, E., Nasim, M.J., Ondrias, K., Chovanec, M., Jacob, C. Inorganic polysulfides and related reactive sulfur selenium species from the perspective of chemistry. (2019) *Molecules*, 24 (7), art. no. 1359.

DOI: [10.3390/molecules24071359](https://doi.org/10.3390/molecules24071359)

Grman, M., Misak, A., Kurakova, L., Brezova, V., Cacanyiova, S., Berenyiova, A., Balis, P., Tomasova, L., Kharm, A., Domínguez-Álvarez, E., Chovanec, M., Ondrias, K. Products of sulfide/selenite interaction possess antioxidant properties, scavenge superoxide-derived radicals, react with DNA, and modulate blood pressure and tension of isolated thoracic aorta. (2019) *Oxidative Medicine and Cellular Longevity*, 2019, art. no. 9847650.

DOI: [10.1155/2019/9847650](https://doi.org/10.1155/2019/9847650)

Piatkowski, P., Moreno, M., Liras, M., Sánchez, F., Douhal, A. Optical characterization of a two-dimensional BODIPY-based polymer material and its related chromophores. (2019) *Journal of Materials Chemistry C*, 7 (26), pp. 7872-7884.

DOI: [10.1039/c9tc02137j](https://doi.org/10.1039/c9tc02137j)

Csonka, A., Kincses, A., Nové, M., Vadas, Z., Sanmartín, C., Domínguez-Álvarez, E., Spengler, G. Selenoesters and selenoanhydrides as novel agents against resistant breast cancer. (2019) *Anticancer Research*, 39 (7), pp. 3777-3783.

DOI: [10.21873/anticancer.13526](https://doi.org/10.21873/anticancer.13526)

Martínez, C., Roscales, J.L., Sanz-Aguilar, A., González-Solís, J. Inferring the wintering distribution of the Mediterranean populations of European storm-petrels *hydrobates pelagicus melitensis* from stable isotope analysis and observational field data. (2019) *Ardeola*, 66 (1), pp. 13-32.

DOI: [10.13157/arla.66.1.2019.ra2](https://doi.org/10.13157/arla.66.1.2019.ra2)

Kharm, A., Misak, A., Grman, M., Brezova, V., Kurakova, L., Baráth, P., Jacob, C., Chovanec, M., Ondrias, K., Domínguez-Álvarez, E. Release of reactive selenium species from phthalic selenoanhydride in the presence of hydrogen sulfide and glutathione with implications for cancer research. (2019) *New Journal of Chemistry*, 43 (29), pp. 11771-11783.

DOI: [10.1039/c9nj02245g](https://doi.org/10.1039/c9nj02245g)

Pachón-Angona, I., Refouvelet, B., Andrys, R., Martin, H., Luzet, V., Iriepa, I., Moraleda, I., Diez-Iriepa, D., Oset-Gasque, M.-J., Marco-Contelles, J., Musilek, K., Ismaili, L. Donepezil + chromone + melatonin hybrids as promising agents for Alzheimer's disease therapy. (2019) *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry*, 34 (1), pp. 479-489.

DOI: [10.1080/14756366.2018.1545766](https://doi.org/10.1080/14756366.2018.1545766)

Dgachi, Y., Martin, H., Malek, R., Jun, D., Janockova, J., Sepsova, V., Soukup, O., Iriepa, I., Moraleda, I., Maalej, E., Carreiras, M.C., Refouvelet, B., Chabchoub, F., Marco-Contelles, J., Ismaili, L. Synthesis and biological assessment of KojoTacrines as new agents for Alzheimer's disease therapy. (2019) *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry*, 34 (1), pp. 163-170.

DOI: [10.1080/14756366.2018.1538136](https://doi.org/10.1080/14756366.2018.1538136)

2020

Herrera, F., Luna, A., Almendros, P. Visible-Light-Mediated Ru-Catalyzed Synthesis of 3-(Arylsulfonyl)but-3-enals via Coupling of α -Allenols with Diazonium Salts and Sulfur Dioxide. (2020) *Organic Letters*, 22 (24), pp. 9490-9494.

DOI: [10.1021/acs.orglett.0c03482](https://doi.org/10.1021/acs.orglett.0c03482)

Baini, M., Panti, C., Fossi, M.C., Tepsich, P., Jiménez, B., Coomber, F., Bartalini, A., Muñoz-Arnanz, J., Moulins, A., Rosso, M. First assessment of POPs and cytochrome P450 expression in Cuvier's beaked whales (*Ziphius cavirostris*) skin biopsies from the Mediterranean Sea. (2020) *Scientific reports*, 10 (1), p. 21891.

DOI: [10.1038/s41598-020-78962-3](https://doi.org/10.1038/s41598-020-78962-3)

Maclás-León, J., Bermejo, I.A., Asín, A., García-García, A., Compañón, I., Jiménez-Moreno, E., Coelho, H., Mangini, V., Albuquerque, I.S., Marcelo, F., Asensio, J.L., Bernardes, G.J.L., Joshi, H.J., Fiammengo, R., Blixt, O., Hurtado-Guerrero, R., Corzana, F. Structural characterization of an unprecedented lectin-like antitumoral anti-MUC1 antibody. (2020) *Chemical Communications*, 56 (96), pp. 15137-15140.

DOI: [10.1039/d0cc06349e](https://doi.org/10.1039/d0cc06349e)

Casas, G., Martínez-Varela, A., Roscales, J.L., Vila-Costa, M., Dachs, J., Jiménez, B. Enrichment of perfluoroalkyl substances in the sea-surface microlayer and sea-spray aerosols in the Southern Ocean. (2020) *Environmental Pollution*, 267, art. no. 115512.

DOI: [10.1016/j.envpol.2020.115512](https://doi.org/10.1016/j.envpol.2020.115512)

Nieto-Domínguez, M., Fernández de Toro, B., de Eugenio, L.I., Santana, A.G., Bejarano-Muñoz, L., Armstrong, Z., Méndez-Líter, J.A., Asensio, J.L., Prieto, A., Withers, S.G., Cañada, F.J., Martínez, M.J. Thioglycoligase derived from fungal GH3 β -xylosidase is a multi-glycoligase with broad acceptor tolerance. (2020) *Nature Communications*, 11 (1), art. no. 4864.

DOI: [10.1038/s41467-020-18667-3](https://doi.org/10.1038/s41467-020-18667-3)

Szemerédi, N., Kincses, A., Rehorova, K., Hoang, L., Salardón-Jiménez, N., Sevilla-Hernández, C., Viktorová, J., Domínguez-Álvarez, E., Spengler, G. Ketone- and cyano-selenoesters to overcome efflux pump, quorum-sensing, and biofilm-mediated resistance. (2020) *Antibiotics*, 9 (12), art. no. 896, pp. 1-17.

DOI: [10.3390/antibiotics9120896](https://doi.org/10.3390/antibiotics9120896)

Marć, M.A., Kincses, A., Rácz, B., Nasim, M.J., Sarfraz, M., Lázaro-Milla, C., Domínguez-álvarez, E., Jacob, C., Spengler, G., Almendros, P. Antimicrobial, anticancer and multidrug-resistant reversing activity of novel oxygen-, sulfur-and selenoflavones and bioisosteric analogues.(2020) *Pharmaceuticals*, 13 (12), art. no. 453, pp. 1-11.

DOI: [10.3390/ph13120453](https://doi.org/10.3390/ph13120453)

Chamorro, B., Diez-Iriepa, D., Merás-Sáiz, B., Chioua, M., García-Vieira, D., Iriepa, I., Hadjipavlou-Litina, D., López-Muñoz, F., Martínez-Murillo, R., González-Nieto, D., Fernández, I., Marco-Contelles, J., Oset-Gasque, M.J. Synthesis, antioxidant properties and neuroprotection of α -phenyl-tert-butylNitron derived HomoBisNitrones in in vitro and in vivo ischemia models. (2020) *Scientific Reports*, 10 (1), art. no. 14150.

DOI: [10.1038/s41598-020-70690-y](https://doi.org/10.1038/s41598-020-70690-y)

Saini, A., Harner, T., Chinnadurai, S., Schuster, J.K., Yates, A., Sweetman, A., Aristizabal-Zuluaga, B.H., Jiménez, B., Manzano, C.A., Gaga, E.O., Stevenson, G., Falandysz, J., Ma, J., Miglioranza, K.S.B., Kannan, K., Tominaga, M., Jariyasopit, N., Rojas, N.Y., Amador-Muñoz, O., Sinha, R., Alani, R., Suresh, R., Nishino, T., Shoeib, T. GAPS-megacities: A new global platform for investigating persistent organic pollutants and chemicals of emerging concern in urban air. (2020) *Environmental Pollution*, 267, art. no. 115416.

DOI: [10.1016/j.envpol.2020.115416](https://doi.org/10.1016/j.envpol.2020.115416)

Marco-Contelles, J. Recent Advances on Nitrones Design for Stroke Treatment. (2020) *Journal of Medicinal Chemistry*, 63 (22), pp. 13413-13427.

DOI: [10.1021/acs.jmedchem.0c00976](https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.0c00976)

Więckowska, A., Szałaj, N., Góral, I., Bucki, A., Latacz, G., Kiec-Kononowicz, K., Bautista-Aguilera, Ò.M., Romero, A., Ramos, E., Egea, J., Farré Alíns, V., González-Rodríguez, Á., López-Muñoz, F., Chioua, M., Marco-Contelles, J. In Vitro and in Silico ADME-Tox Profiling and Safety Significance of Multifunctional Monoamine Oxidase Inhibitors Targeting Neurodegenerative Diseases. (2020) *ACS Chemical Neuroscience*, 11 (22), pp. 3793-3801.

DOI: 10.1021/acschemneuro.0c00489

Avello, M.G., de la Torre, M.C., Guerrero-Martínez, A., Sierra, M.A., Gornitzka, H., Hemmert, C. Chiral-at-Metal BODIPY-Based Iridium(III) Complexes: Synthesis and Luminescence Properties. (2020) *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2020 (42), pp. 4045-4053.

DOI: 10.1002/ejic.202000745

Marco-Contelles, J., Zhang, Y. From Seeds of *Apium graveolens* Linn. To a Cerebral Ischemia Medicine. To Long Journey of 3-n-Butylphthalide. (2020) *Journal of Medicinal Chemistry*, 63 (21), pp. 12485-12510.

DOI: 10.1021/acs.jmedchem.0c00887

González, J.A., Verdugo, F., Mascareñas, J.L., López, F., Nevado, C. [C^N]-Alkenyl Gold(III) Complexes by Proximal Ring-Opening of (2-Pyridyl)alkylidenecyclopropanes: Mechanistic Insights. (2020) *Angewandte Chemie - International Edition*, 59 (45), pp. 20049-20054.

DOI: 10.1002/anie.202007371

Marco, J.L. Isolation, reactivity, pharmacological activities and total synthesis of hispanolone and structurally related diterpenes from Labiatae plants. (2020) *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 30 (21), art. no. 127498.

DOI: 10.1016/j.bmcl.2020.127498

Zuluaga, A.M., Mena-García, A., Soria Monzón, A.C., Rada-Mendoza, M., Chito, D.M., Ruiz-Matute, A.I., Sanz, M.L. Microwave

assisted extraction of inositols for the valorization of legume by-products. (2020) *LWT*, 133, art. no. 109971.

DOI: 10.1016/j.lwt.2020.109971

Lázaro-Milla, C., Busto, E., Burgos, I., Nieto Faza, O., Almendros, P. Gold-catalyzed reaction of alkynes with diazonium salts under photoirradiation revisited: New alkoxyarylation variant leading to enol ethers. (2020) *Journal of Catalysis*, 391, pp. 48-55.

DOI: 10.1016/j.jcat.2020.07.029

Diez-Iriepa, D., Chamorro, B., Talaván, M., Chioua, M., Iriepa, I., Hadjipavlou-Litina, D., López-Muñoz, F., Marco-Contelles, J., Oset-Gasque, M.J. Homo-tris-nitrones derived from α -phenyl-n-tert-butyl nitron: Synthesis, neuroprotection and antioxidant properties (2020) *International Journal of Molecular Sciences*, 21 (21), art. no. 7949, pp. 1-18.

DOI: 10.3390/ijms21217949

Fernández, D.F., Mascareñas, J.L., López, F. Catalytic addition of C-H bonds across C-C unsaturated systems promoted by iridium(i) and its group IX congeners. (2020) *Chemical Society Reviews*, 49 (20), pp. 7378-7405.

DOI: 10.1039/d0cs00359j

Sousa-Castillo, A., Couceiro, J.R., Tomás-Gamasa, M., Mariño-López, A., López, F., Baaziz, W., Ersen, O., Comesaña-Hermo, M., Mascareñas, J.L., Correa-Duarte, M.A. Remote Activation of Hollow Nanoreactors for Heterogeneous Photocatalysis in Biorelevant Media. (2020) *Nano Letters*, 20 (10), pp. 7068-7076.

DOI: 10.1021/acs.nanolett.0c02180

Angona, I.P., Martín, H., Daniel, S., Moraleda, I., Bonet, A., Wnorowski, A., Maj, M., Jozwiak, K., Iriepa, I., Refouvelet, B., Marco-Contelles, J., Ismaili, L. Synthesis of hantzsch adducts as cholinesterases and calcium flux inhibitors, antioxidants and neuroprotectives. (2020) *International Journal of Molecular Sciences*, 21 (20), art. no. 7652, pp. 1-19.

DOI: 10.3390/ijms21207652

Zuluaga, A.M., Mena-García, A., Chito-Trujillo, D., Rada-Mendoza, M., Sanz, M.L., Ruiz-Matute, A.I. Development of a microwave-assisted extraction method for the recovery of bioactive inositols from lettuce (*Lactuca sativa*) byproducts. (2020) *Electrophoresis*, 41 (20), pp. 1804-1811.

DOI: [10.1002/elps.202000201](https://doi.org/10.1002/elps.202000201)

Bartalini, A., Muñoz-Arnanz, J., Bains, M., Panti, C., Galli, M., Giani, D., Fossi, M.C., Jiménez, B. Relevance of current PCB concentrations in edible fish species from the Mediterranean Sea (2020) *Science of the Total Environment*, 737, art. no. 139520.

DOI: [10.1016/j.scitotenv.2020.139520](https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.139520)

Luna, A., Herrera, F., Higuera, S., Murillo, A., Fernández, I., Almendros, P. AgNO₃·SiO₂: Convenient AgNPs source for the sustainable hydrofunctionalization of allenyl-indoles using heterogeneous catalysis (2020) *Journal of Catalysis*, 389, pp. 432-439.

DOI: [10.1016/j.jcat.2020.06.002](https://doi.org/10.1016/j.jcat.2020.06.002)

Mukhopadhyay, M., Sampath, S., Muñoz-Arnanz, J., Jiménez, B., Chakraborty, P. Plasticizers and bisphenol A in Adyar and Cooum riverine sediments, India: occurrences, sources and risk assessment. (2020) *Environmental Geochemistry and Health*, 42 (9), pp. 2789-2802.

DOI: [10.1007/s10653-020-00516-3](https://doi.org/10.1007/s10653-020-00516-3)

Isca, V.M.S., Andrade, J., Fernandes, A.S., Paixão, P., Uriel, C., Gómez, A.M., Duarte, N., Rijo, P. In vitro antimicrobial activity of Isopimarane-type Diterpenoids. (2020) *Molecules*, 25 (18), art. no. 4250.

DOI: [10.3390/molecules25184250](https://doi.org/10.3390/molecules25184250)

Morales, P., Curtis, N.L., Zárate, S.G., Bastida, A., Bolanos-Garcia, V.M. Interfering with mRNA methylation by the 2' O-methyltransferase (Nsp16) from SARS-CoV-2 to tackle the COVID-19 disease. (2020) *Catalysts*, 10 (9), art. no. 1023, pp. 1-13.

DOI: [10.3390/catal10091023](https://doi.org/10.3390/catal10091023)

Gajdács, M., Nové, M., Csonka, Á., Varga, B., Sanmartín, C., Domínguez-Álvarez, E., Spengler, G. Phenothiazines and selenocompounds: A potential novel combination therapy of multidrug resistant cancer. (2020) *Anticancer Research*, 40 (9), pp. 4921-4928.

DOI: [10.21873/anticancer.14495](https://doi.org/10.21873/anticancer.14495)

Quintanilla-López, J.E., Galindo-Iranzo, P., Lebrón-Aguilar, R., Gómara, B. Congener-specific determination of hydroxylated polychlorinated biphenyls by polar-embedded reversed-phase liquid chromatography-tandem mass spectrometry. (2020) *Journal of Chromatography A*, 1626, art. no. 461353.

DOI: [10.1016/j.chroma.2020.461353](https://doi.org/10.1016/j.chroma.2020.461353)

Fueyo-González, F., Fernández-Gutiérrez, M., García-Puentes, D., Orte, A., González-Vera, J.A., Herranz, R. Naphthalimide-based macrophage nucleus imaging probes. (2020) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 200, art. no. 112407.

DOI: [10.1016/j.ejmech.2020.112407](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2020.112407)

Lázaro-Milla, C., Macicior, J., Yanai, H., Almendros, P. Trifluorosulfonylation Cascade in Allenols: Stereocontrolled Synthesis of Bis(triflyl)enones. (2020) *Chemistry - A European Journal*, 26 (41), pp. 8983-8989.

DOI: [10.1002/chem.202001236](https://doi.org/10.1002/chem.202001236)

Verdugo, F., Da Concepción, E., Rodiño, R., Calvelo, M., Mascareñas, J.L., López, F. Pd-Catalyzed (3 + 2) Heterocycloadditions between Alkylidenecyclopropanes and Carbonyls: Straightforward Assembly of Highly Substituted Tetrahydrofurans. (2020) *ACS Catalysis*, 10 (14), pp. 7710-7718.

DOI: [10.1021/acscatal.0c01827](https://doi.org/10.1021/acscatal.0c01827)

Santana, A.G., Montalvillo-Jiménez, L., Díaz-Casado, L., Corzana, F., Merino, P., Cañada, F.J., Jiménez-Osés, G., Jiménez-Barbero, J., Gómez, A.M., Asensio, J.L. Dissecting the Essential Role of Anomeric β -Triflates in Glycosylation Reactions. (2020) *Journal of*

the American Chemical Society, 142 (28), pp. 12501-12514.

DOI: 10.1021/jacs.0c05525

Capanni, F., Muñoz-Arnanz, J., Marsili, L., Fossi, M.C., Jiménez, B. Assessment of PCDD/Fs, dioxin-like PCBs and PBDEs in Mediterranean striped dolphins. (2020) *Marine Pollution Bulletin*, 156, art. no. 111207.

DOI: 10.1016/j.marpolbul.2020.111207

Zribi, L., Pachón-Angona, I., Bautista-Aguilera, O.M., Diez-Iriepa, D., Marco-Contelles, J., Ismaili, L., Iriepa, I., Chabchoub, F. Triazolopyridopyrimidine: A new scaffold for dual-target small molecules for Alzheimer's disease therapy. (2020) *Molecules*, 25 (14), art. no. 3190.

DOI: 10.3390/molecules25143190

Méndez-Líter, J.A., Nieto-Domínguez, M., Fernández De Toro, B., González Santana, A., Prieto, A., Asensio, J.L., Cañada, F.J., De Eugenio, L.I., Martínez, M.J. A glucotolerant β -glucosidase from the fungus *Talaromyces amestolkiae* and its conversion into a glycosynthase for glycosylation of phenolic compounds. (2020) *Microbial Cell Factories*, 19 (1), art. no. 127.

DOI: 10.1186/s12934-020-01386-1

Revuelta, J., Aranaz, I., Aranaz, I., Acosta, N., Acosta, N., Civera, C., Bastida, A., Peña, N., Monterrey, D.T., Doncel-Pérez, E., Garrido, L., Heras, Á., Heras, Á., García-Junceda, E., Fernández-Mayoralas, A. Unraveling the Structural Landscape of Chitosan-Based Heparan Sulfate Mimics Binding to Growth Factors: Deciphering Structural Determinants for Optimal Activity. (2020) *ACS Applied Materials and Interfaces*, 12 (23), pp. 25534-25545.

DOI: 10.1021/acsami.0c03074

Bautista-Aguilera, Ó.M., Ismaili, L., Chioua, M., Iriepa, I., Ángeles Martínez-Grau, M., Beadle, C.D., Vetman, T., López-Muñoz, F., Marco-Contelles, J. Automated Synthesis of New Quinoxalinetacridines. (2020) *ChemistrySelect*, 5 (21), pp. 6491-6493.

DOI: 10.1002/slct.202001593

Lázaro-Milla, C., Quirós, M.T., Cárdenas, D.J., Almendros, P. Triflyl-assisted reductive Pd-catalyzed Tsuji-Trost type reaction. (2020) *Chemical Communications*, 56 (45), pp. 6070-6073.

DOI: 10.1039/d0cc02146f

Gutiérrez, M., Duplouy-Armani, L., Angiolini, L., Pintado-Sierra, M., Sánchez, F., Douhal, A. Femto-to millisecond time-resolved photodynamics of a double-functionalized push-pull organic linker: Potential candidate for optoelectronically active MOFS. (2020) *International Journal of Molecular Sciences*, 21 (12), art. no. 4366, pp. 1-19.

DOI: 10.3390/ijms21124366

Abbruzzese, G., Morón-Oset, J., Díaz-Castroverde, S., García-Font, N., Roncero, C., López-Muñoz, F., Contelles, J.L.M., Oset-Gasque, M.J. Neuroprotection by phytoestrogens in the model of deprivation and resupply of oxygen and glucose in vitro: The contribution of autophagy and related signaling mechanisms. (2020) *Antioxidants*, 9 (6), art. no. 545, pp. 1-20.

DOI: 10.3390/antiox9060545

Bautista-Aguilera, Ó.M., Ismaili, L., Chioua, M., Andrys, R., Schmidt, M., Bzonek, P., Martínez-Grau, M.Á., Beadle, C.D., Vetman, T., López-Muñoz, F., Iriepa, I., Refouvelet, B., Musilek, K., Marco-Contelles, J. Acetylcholinesterase inhibition of diversely functionalized quinolinones for alzheimer's disease therapy (2020) *International Journal of Molecular Sciences*, 21 (11), art. no. 3913, pp. 1-20.

DOI: 10.3390/ijms21113913

Toledano-Pinedo, M., Martínez Del Campo, T., Tiemblo, M., Fernández, I., Almendros, P. Organoseleno-catalyzed synthesis of α,β -unsaturated α' -Alkoxy ketones from allenes enabled by secondary interactions. (2020) *Organic Letters*, 22 (10), pp. 3979-3984.

DOI: 10.1021/acs.orglett.0c01288

Nelson, R., Calvelo, M., García-Fandiño, R., Lledós, A., Ujaque, G.,

Mascareñas, J.L., López, F. Skeletal diversity in Pt- And Au-catalyzed annulations of allenedienes: dissecting unconventional mechanistic pathways. (2020) *Chemical Science*, 11 (16), pp. 4209-4220.

DOI: [10.1039/d0sc00650e](https://doi.org/10.1039/d0sc00650e)

Uriel, C., Permingeat, C., Ventura, J., Avellanal-Zaballa, E., Bañuelos, J., García-Moreno, I., Gómez, A.M., Lopez, J.C. BODIPYs as Chemically Stable Fluorescent Tags for Synthetic Glycosylation Strategies towards Fluorescently Labeled Saccharides. (2020) *Chemistry - A European Journal*, 26 (24), pp. 5388-5399.

DOI: [10.1002/chem.201905780](https://doi.org/10.1002/chem.201905780)

Vargas, E.L., Velázquez, J.A., Rodrigo, E., Reinecke, H., Rodríguez-Hernández, J., Fernández-Mayoralas, A., Gallardo, A., Cid, M.B. P Ka Modulation of Pyrrolidine-Based Catalytic Polymers Used for the Preparation of Glycosyl Hydrazides at Physiological pH and Temperature. (2020) *ACS Applied Bio Materials*, 3 (4), pp. 1955-1967.

DOI: [10.1021/acsabm.9b01123](https://doi.org/10.1021/acsabm.9b01123)

Escobar-Arnanz, J., Sanz, M.L., Ros, M., Sanz, J., Ramos, L. Potential of topological descriptors to model the retention of polychlorinated biphenyls in different gas chromatography stationary phases, including ionic liquid-based columns. (2020) *Journal of Chromatography A*, 1616, art. no. 460844.

DOI: [10.1016/j.chroma.2019.460844](https://doi.org/10.1016/j.chroma.2019.460844)

Colomer, I., Ureña, M., Viso, A., Fernández de la Pradilla, R. Sulfinyl-Mediated Stereoselective Functionalization of Acyclic Conjugated Dienes. (2020) *Chemistry - A European Journal*, 26 (20), pp. 4620-4632.

DOI: [10.1002/chem.201905742](https://doi.org/10.1002/chem.201905742)

Bastida, A. Biocatalysis: Chemical biosynthesis. (2020) *Catalysts*, 10 (4), art. no. 390, .

DOI: [10.3390/catal10040390](https://doi.org/10.3390/catal10040390)

Monterde, C., Pintado-Sierra, M., Navarro, R., Sánchez, F., Iglesias, M. Effective Approach toward Conjugated Porous Organic Frameworks Based on Phenanthrene Building Blocks: Metal-Free Heterogeneous Photocatalysts. (2020) *ACS Applied Materials and Interfaces*, 12 (13), pp. 15108-15114.

DOI: [10.1021/acsami.9b22419](https://doi.org/10.1021/acsami.9b22419)

Nové, M., Kincses, A., Szalontai, B., Rácz, B., Blair, J.M.A., González-Prádena, A., Benito-Lama, M., Domínguez-Álvarez, E., Spengler, G. Biofilm eradication by symmetrical selenoesters for food-borne pathogens. (2020) *Microorganisms*, 8 (4), art. no. 566, .

DOI: [10.3390/microorganisms8040566](https://doi.org/10.3390/microorganisms8040566)

Martínez-Alonso, E., Escobar-Peso, A., Ayuso, M.I., Gonzalo-Gobernado, R., Chioua, M., Montoya, J.J., Montaner, J., Fernández, I., Marco-Contelles, J., Alcázar, A. Characterization of a cholesteronitron (ISQ-201), a novel drug candidate for the treatment of ischemic stroke. (2020) *Antioxidants*, 9 (4), art. no. 291, pp. 1-21.

DOI: [10.3390/antiox9040291](https://doi.org/10.3390/antiox9040291)

Silva, D., Mendes, E., Summers, E.J., Neca, A., Jacinto, A.C., Reis, T., Agostinho, P., Bolea, I., Jimeno, M.L., Mateus, M.L., Oliveira-Campos, A.M.F., Unzeta, M., Marco-Contelles, J., Majekova, M., Ramsay, R.R., Carreiras, M.C. Synthesis, biological evaluation, and molecular modeling of nitrile-containing compounds: Exploring multiple activities as anti-Alzheimer agents. (2020) *Drug Development Research*, 81 (2), pp. 215-231.

DOI: [10.1002/ddr.21594](https://doi.org/10.1002/ddr.21594)

Cerro-Gálvez, E., Roscales, J.L., Jiménez, B., Sala, M.M., Dachs, J., Vila-Costa, M. Microbial responses to perfluoroalkyl substances and perfluorooctanesulfonate (PFOS) desulfurization in the Antarctic marine environment. (2020) *Water Research*, 171, art. no. 115434.

DOI: [10.1016/j.watres.2019.115434](https://doi.org/10.1016/j.watres.2019.115434)

Angona, I.P., Daniel, S., Martin, H., Bonet, A., Wnorowski, A., Maj,

M., Jóźwiak, K., Silva, T.B., Refouvelet, B., Borges, F., Marco-Contelles, J., Ismaili, L. Design, synthesis and biological evaluation of new antioxidant and neuroprotective multitarget directed ligands able to block calcium channels. (2020) *Molecules*, 25 (6), art. no. 25061329.

DOI: 10.3390/molecules25061329

Mena-García, A., Rodríguez-Sánchez, S., Ruiz-Matute, A.I., Sanz, M.L. Exploitation of artichoke byproducts to obtain bioactive extracts enriched in inositols and caffeoylquinic acids by Microwave Assisted Extraction. (2020) *Journal of Chromatography A*, 1613, art. no. 460703.

DOI: 10.1016/j.chroma.2019.460703

Martín-Mejías, I., Aragoncillo, C., Yanai, H., Hoshikawa, S., Fujimoto, Y., Matsumoto, T., Almendros, P. A catalyst-free bis(triflyl) ethylation/benzannulation reaction: Rapid access to carbazole-based superacidic carbon acids from alkynols. (2020) *Chemical Communications*, 56 (12), pp. 1795-1798.

DOI: 10.1039/c9cc08930f

Martín-Ortiz, A., Carrero-Carralero, C., Hernández-Hernández, O., Lebrón-Aguilar, R., Moreno, F.J., Sanz, M.L., Ruiz-Matute, A.I. Advances in structure elucidation of low molecular weight carbohydrates by liquid chromatography-multiple-stage mass spectrometry analysis. (2020) *Journal of Chromatography A*, 1612, art. no. 460664.

DOI: 10.1016/j.chroma.2019.460664

Galmés, M.À., García-Junceda, E., Świderek, K., Moliner, V. Exploring the Origin of Amidase Substrate Promiscuity in CALB by a Computational Approach. (2020) *ACS Catalysis*, 10 (3), pp. 1938-1946.

DOI: 10.1021/acscatal.9b04002

do Carmo Carreiras, M., Ismaili, L., Marco-Contelles, J. Propargylamine-derived multi-target directed ligands for Alzheimer's

disease therapy. (2020) *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 30 (3), art. no. 126880.

DOI: 10.1016/j.bmcl.2019.126880

Sanz, M.L., Ramos, L. Chapter 2: Sample preparation for the gas chromatography analysis of semi-volatiles and non-volatile compounds in food samples. (2020) *Food Chemistry, Function and Analysis*, 2020-January (17), pp. 38-80.

DOI: 10.1039/9781788015752-00038

Destito, P., Vidal, C., López, F., Mascareñas, J.L. Transition Metal-Promoted Reactions in Aqueous Media and Biological Settings. (2020) *Chemistry - A European Journal*.

DOI: 10.1002/chem.202003927

Ramos, L. Chapter 5: Greening sample preparation: New solvents, new sorbents. (2020) *RSC Green Chemistry*, 2020-January (66), pp. 114-153.

DOI: 10.1039/9781788016148-00114

Megías-Pérez, R., Hahn, C., Ruiz-Matute, A.I., Behrends, B., Albach, D.C., Kuhnert, N. Changes in low molecular weight carbohydrates in kale during development and acclimation to cold temperatures determined by chromatographic techniques coupled to mass spectrometry. (2020) *Food Research International*, 127, art. no. 108727.

DOI: 10.1016/j.foodres.2019.108727

Romero, A., Marco-Contelles, J., Ramos, E. Highlights of ASS234: A novel and promising therapeutic agent for Alzheimer's disease therapy. (2020) *Neural Regeneration Research*, 15 (1), pp. 30-35.

DOI: 10.4103/1673-5374.262679

Oset-Gasque, M.J., Marco-Contelles, J.L. Tacrine-natural-product hybrids for alzheimer's disease therapy. (2020) *Current Medicinal Chemistry*, 27 (26), pp. 4392-4400.

DOI: 10.2174/0929867325666180403151725

Díaz-Casado, L., Serrano-Chacón, I., Montalvillo-Jiménez, L., Corzana, F., Bastida, A., Santana, A.G., González, C., Asensio, J.L. De Novo Design of Selective Quadruplex–Duplex Junction Ligands and Structural Characterisation of Their Binding Mode: Targeting the G4 Hot-Spot. (2020) *Chemistry - A European Journal*.

DOI: [10.1002/chem.202005026](https://doi.org/10.1002/chem.202005026)

Santana, A.G., Montalvillo-Jiménez, L., Díaz-Casado, L., Mann, E., Jiménez-Barbero, J., Gómez, A.M., Asensio, J.L. Single-Step Glycosylations with ¹³C-Labelled Sulfoxide Donors: A Low-Temperature NMR Cartography of the Distinguishing Mechanistic Intermediates. (2021) *Chemistry - A European Journal*, 27 (6), pp. 2030-2042.

DOI: [10.1002/chem.202003850](https://doi.org/10.1002/chem.202003850)

Herrera, F., Luna, A., Fernández, I., Almendros, P. Transition metal-free cyclobutene rearrangement in fused naphthalen-1-ones: Controlled access to functionalized quinones. (2020) *Chemical Communications*, 56 (8), pp. 1290-1293.

DOI: [10.1039/c9cc08628e](https://doi.org/10.1039/c9cc08628e)

Al-Muntaser, A.A., Varfolomeev, M.A., Suwaid, M.A., Yuan, C., Chemodanov, A.E., Feoktistov, D.A., Rakhmatullin, I.Z., Abbas, M., Domínguez-Álvarez, E., Akhmediyarov, A.A., Klochkov, V.V., Amerkhanov, M.I. Hydrothermal upgrading of heavy oil in the presence of water at sub-critical, near-critical and supercritical conditions. (2020) *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 184, art. no. 106592.

DOI: [10.1016/j.petrol.2019.106592](https://doi.org/10.1016/j.petrol.2019.106592)

Blázquez-Moraleja, A., Sáenz-De-Santa María, I., Chiara, M.D., Álvarez-Fernández, D., García-Moreno, I., Prieto-Montero, R., Martínez-Martínez, V., López Arbeloa, I., Chiara, J.L. Shedding light on the mitochondrial matrix through a functional membrane transporter. (2020) *Chemical Science*, 11 (4), pp. 1052-1065.

DOI: [10.1039/c9sc04852a](https://doi.org/10.1039/c9sc04852a)

Corsolini, S., Metzdorff, A., Baroni, D., Roscales, J.L., Jiménez, B., Cerro-Gálvez, E., Dachs, J., Galbán-Malagón, C., Audy, O., Kohoutek, J., Přibylova, P., Poblete-Morales, M., Avendaño-Herrera, R., Bergami, E., Pozo, K. Legacy and novel flame retardants from indoor dust in Antarctica: Sources and human exposure. (2020) *Environmental Research*, art. no. 110344.

DOI: [10.1016/j.envres.2020.110344](https://doi.org/10.1016/j.envres.2020.110344)

