

Parte A. DATOS PERSONALES

Fecha del CVA	12-10-2019
----------------------	------------

Nombre y apellidos	Ricardo Antonio Mosquera Castro		
DNI/NIE/pasaporte	76704138N	Edad	58
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	7003651634	
	Código Orcid	0000-0001-8252-9212	

A.1. Situación profesional actual

Organismo	Universidade de Vigo		
Dpto./Centro	Química Física		
Dirección	Campus Lagoas Marcosende s/n		
Teléfono	986813808	correo electrónico	mosquera@uvigo.es
Categoría profesional	Catedrático de Universidad	Fecha inicio	20-05-2009
Espec. cód. UNESCO	2307,2210		
Palabras clave	Química computacional, densidad electrónica, QTAIM, mecánica molecular		

A.2. Formación académica (título, institución, fecha)

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciatura en Química	Universidad de Santiago de Compostela	1984
Doctorado en Química	Universidad de Santiago de Compostela	1988

A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica (véanse instrucciones)

Nº de Sexenios: 5. Fecha del último sexenio: 2018

Nº de Tesis Doctorales dirigidas: 12

Nº de Tesis Doctorales dirigidas en los últimos 10 años: 7 (4 con premio extraordinario de doctorado en la Universidad de Vigo)

Nº de Citas totales: 2242. Promedio de citas por año 2014-2018: 115 (scopus)

Publicaciones totales en el primer cuartil: 60

Publicaciones totales: 152

Índice h: 25 (scopus)

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM (máximo 3500 caracteres, incluyendo espacios en blanco)

Desde 1992 trabajo en química cuántica, dedicándome fundamentalmente al análisis de densidad electrónica. En este campo he estado especialmente activo en desarrollos metodológicos y aplicaciones vinculadas a la teoría cuántica de átomos en moléculas (QTAIM). Las principales aportaciones han sido:

- 1) Introducir estimadores topológicos para la electronegatividad local: uno de ellos basado en la combinación de cuencas QTAIM y ELF y otro en las componentes NLMO de las cuencas QTAIM. Hemos demostrado que ambos tratamientos conducen a resultados equivalentes.
- 2) Interpretar el origen electrónico de preferencias conformacionales y tautoméricas. En especial destaco la interpretación del efecto anomérico, descartando que los efectos hiperconjugativos jueguen un papel importante en él.
- 3) Estudios cuantitativos de transferibilidad aproximada, incluyendo su aplicación a la parametrización de modelos moleculares de disoluciones de no electrolitos.
- 4) Describir las importantes limitaciones del modelo de resonancia para describir distribuciones electrónicas, concluyendo el importante papel jugado por los átomos de hidrógeno cuando se modifican las distribuciones electrónicas.
- 5) Análisis electrónico de interacciones de "stacking", revelando la importancia de los efectos electrostáticos que involucran cuadrupolos.

Previamente, entre 1984 y 2002 trabajé en mecánica molecular. Concretamente, desarrollé campos de fuerzas para peróxidos, hidracinas y β -lactamas en el método de Allinger (programas MM2 y MM3).

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES *(ordenados por tipología)*

C.1. Publicaciones

Autores: F. Teixeira, R.A. Mosquera, A. Melo, C. Freire, M.N.D.S. Cordeiro
Título: Driving Forces in the Sharpless Epoxidation Reaction: A Coupled AIMD/QTAIM Study.
Revista: Inorg. Chem.
Volumen: 56
Páginas: 2124-2134
Fecha: 2017

Autores: D. Ferro-Costas, E. Francisco, A. Martín Pendás, R. A. Mosquera
Título: How electronic excitation can be used to inhibit some mechanisms associated to substituent effects.
Revista: Chem. Phys. Chem.
Volumen: 17
Páginas: 2666-2671
Fecha: 2016

Autores: F. Teixeira, R.A. Mosquera, A. Melo, C. Freire, M.N.D.S. Cordeiro
Título: Roots of acetate-vanadium linkage isomerism: A QTAIM study.
Revista: Inorg. Chem.
Volumen: 55
Páginas 3653-3662
Fecha: 2016

Autores: D. Ferro-Costas, R.A. Mosquera
Título: Excluding hyperconjugation from the Z conformational preference and investigating its origin: formic acid and beyond.
Revista: Phys. Chem. Chem. Phys.
Volumen: 17
Páginas 26946-26954
Fecha: 2015

Autores: D. Ferro-Costas, A. Martín-Pendás, L. González, R. A. Mosquera
Título: Beyond the molecular orbital conception of electronically excited states through the quantum theory of atoms in molecules
Revista: Phys. Chem. Chem. Phys.
Volumen: 16
Páginas: 9249-9258
Fecha: 2014

Autores: D. Ferro-Costas, I. Pérez-Juste, R. A. Mosquera
Título: Electronegativity estimator built on QTAIM-based domains of the bond electron density
Revista: J. Comput. Chem.
Volumen: 35
Páginas: 978-985
Fecha: 2014

Autores: D. Ferro-Costas, R. A. Mosquera
Título: Complementarity of QTAIM and ELF partitions: deeper understanding of the anomeric effect.
Revista: J. Chem. Theory Comput.
Volumen: 9
Páginas: 4816-4824
Fecha: 2013

Autores: L. Estévez, N. Otero, R. A. Mosquera
Título: A Computational Study on the Acidity Dependence of Radical-Scavenging Mechanisms of Anthocyanidins
Revista: J. Phys. Chem. B
Volumen: 114
Páginas: 9706-9712
Fecha: 2010

Autores: W. Ni, R. A. Mosquera, J. Pérez-Juste, L. M. Liz-Marzán
Título: Gold Nanorods: Hydrogen Bonding-Directed Assembly in Aqueous Solutions
Revista: J. Phys. Chem. Lett.
Volumen: 1
Páginas: 1181-1185
Fecha: 2010

Autores: R. A. Mosquera, M. J. González Moa, L. Estévez, M. Mandado, A. M. Graña
Título del capítulo: An Electron Density-Based Approach to the Origin of Stacking Interactions
Título del libro: Quantum Biochemistry
Páginas: 365-387
Fecha: 2009
Editorial Wiley-VCH
Lugar de publicación: Weinheim (Alemania)
ISBN: 978-3-527-32322-7

C.2. Proyectos

Título del proyecto: Estructura molecular y electrónica de compuestos antocianinacopigmento (código CTQ-2010-21500) .
Entidad financiadora: Ministerio de Economía
Entidades participantes: Universidad de Vigo
Duración, desde: 2010 hasta: 2013 (ampliado hasta 2014)
Cuantía de la subvención: 61.000 euros.
Investigador responsable: Ricardo Antonio Mosquera Castro
Número de investigadores participantes: 3 (ampliados a 5)

Título del proyecto: “Efecto anomérico: reinterpretación con la teoría cuántica de átomos en moléculas y otros medios de análisis de la densidad electrónica” (código: INCITE08PXIB314224PR)
Entidad financiadora: Xunta de Galicia
Entidades participantes: Universidad de Vigo
Duración, desde: 2008 hasta: 2011
Cuantía de la subvención: 46.126 €
Investigador responsable: Ricardo A. Mosquera Castro
Número de investigadores participantes: 5

Título del proyecto: Insuficiencia del Modelo de Resonancia para la explicación de procesos químicos básicos
Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación
Entidades participantes: Universidad de Vigo
Duración, desde: 2006 hasta: 2009
Cuantía de la subvención: 45.000 €.
Investigador responsable: Ricardo Antonio Mosquera Castro
Número de investigadores participantes: 9

C.3. Contratos, méritos tecnológicos o de transferencia

Investigador principal de dos ayudas para la consolidación y estructuración de unidades competitivas en el sistema universitario gallego: “Grupo de Referencia Consolidado”

concedida en 2015 y 2019 al grupo de Química Cuántica de la Universidad de Vigo por, respectivamente, los periodos 2015-2018 (GRC-2015/017) y 2019-2022 (ED431C 2019/24). Cuantía de cada una de las subvenciones: 198000 y 190000 €, respectivamente.

C.4. Patentes

C.5. Dirección de tesis doctorales

Título: Application of QTAIM and Other Methods of Computational Chemistry to the Study of Anthocyanidins and Their Complexes

Doctoranda: Laura Estévez Guance

Universidad: Vigo

Facultad / Escuela: Facultad de Química

Fecha: 2009 (Premio Extraordinario de Doctorado de la Universidad de Vigo)

Título: Interpretación AIM del efecto anomérico

Doctorando: Antonio Vila Vilariño

Universidad: Vigo

Facultad / Escuela: Facultad de Química

Fecha: 2009 (Premio Extraordinario de Doctorado de la Universidad de Vigo)

Título: “Aplicación de métodos de análise da densidade electrónica ao estudo da estrutura, estabilidade e reactividade de heterociclos aromáticos nitrogenados”

Doctorando: Nicolás Otero Martínez

Universidad: Vigo

Facultad / Escuela: Facultad de Química

Fecha: 2012 (Premio Extraordinario de Doctorado de la Universidad de Vigo)

Título: Estudio computacional de las posibles interacciones entre los metabolitos de la cocaína y la heroína

Doctorando: David Alejandro Rincón Daza

Universidad: Vigo

Facultad / Escuela: Facultad de Química

Fecha: 2015

Título: “Exploring new applications for QTAIM and its complementarity with other methods”

Doctorando: David Ferro Costas

Universidad: Vigo

Facultad / Escuela: Facultad de Química

Fecha: 2015 (Premio Extraordinario de Doctorado de la Universidad de Vigo)

Título: Efectos electrónicos introducidos por la sustitución, asociación intermolecular y tautomería en algunos procesos de interés químico o biológico.

Doctorando: Luisa Pita Ameneiros

Universidad: Vigo

Facultad / Escuela: Facultad de Química

Fecha: 2016

Título: Estudio QTAIM de nitrilos y compuestos relacionados.

Doctorando: José Luis López Fernández

Universidad: Vigo

Facultad / Escuela: Facultad de Química

Fecha: 2016

C.6, C.7...

Parte A. DATOS PERSONALES

Fecha del CVA	01/12/2023
----------------------	------------

Nombre y apellidos	Ana María Graña Rodríguez		
DNI/NIE/pasaporte	36069182F	Edad	58
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	K-6055-2014	
	Código Orcid	0000-0002-0794-2215	

A.1. Situación profesional actual

Organismo	Universidade de Vigo		
Dpto./Centro	Facultade de Química		
Dirección	Campus Lagoas Marcosende 36310 Vigo		
Teléfono	986812282	correo electrónico	ana@uvigo.es
Categoría profesional	Catedrática de Universidad	Fecha inicio	12/11/20
Espec. cód. UNESCO	2307		
Palabras clave	Química computacional, Análisis de la densidad electrónica, QTAIM, Dinámica molecular, QM/MM		

A.2. Formación académica (título, institución, fecha)

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciatura en Química	Santiago de Compostela	1988
Doctorado en Química	Santiago de Compostela	1993

A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica (véanse instrucciones)

Nº de sexenios: 5

Último sexenio: período 2015-2020

Nº tesis en los últimos 10 años: 1 (2016)

Citas totales: 818

Citas por año en los últimos 5 años: 43

Publicaciones totales Q1:20

Índice h: 17

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

Desde mi incorporación al Departamento de Química Física de la Universidad de Santiago, mi actividad profesional se ha centrado ininterrumpidamente en el área de Química Física, participando en tareas docentes, investigadoras y de gestión, en 3 campus (Santiago, Ourense y Vigo) de 2 universidades. Soy, desde 2020, catedrática de universidad en la Universidad de Vigo.

Mi labor investigadora se ha centrado en el campo de la Química Estructural Teórica. En ella pueden distinguirse tres líneas: "Estudio de compuestos de interés farmacológico", "Análisis de densidad electrónica" y "Métodos híbridos QM/MM". La primera corresponde a la etapa doctoral. Se desarrolló mayoritariamente en la Universidad de Santiago, bajo la dirección del Profesor Miguel Ángel Ríos Fernández. La segunda, iniciada en el período posdoctoral, se consolidó en la Universidad de Vigo. En los dos últimos años he iniciado la tercera línea, que incluye además una colaboración con un grupo experimental de nuestro departamento.

Así, tras mi traslado desde la Universidad de Santiago a la Universidad de Vigo me incorporé a un nuevo grupo de investigación en el que ya había 3 profesores titulares con experiencia en el campo de la Química Computacional. Mi aportación a este grupo permitió el inicio y consolidación de una nueva línea de investigación como consecuencia, esencialmente, de mi trabajo postdoctoral en la Universidad de California en Berkeley con el profesor Martin Head-Gordon, en el que comencé los estudios sobre análisis de densidad electrónica. Estos estudios emplean diversos métodos para el análisis de la densidad electrónica, aunque se basan principalmente en la teoría de átomos en moléculas (QTAIM).

Fruto de este trabajo se obtuvieron los 19 proyectos de investigación que figuran en el currículum (2 como investigadora principal). Además esta trayectoria dio lugar a la publicación de 31 trabajos desde 2002. Aunque todos los artículos en revistas se encuentran indexados en el JCR, en general su calidad ha ido incrementándose con el tiempo y 20 de ellos se encuentran en el primer cuartil dentro de su categoría. Estos trabajos han merecido el reconocimiento de 5 sexenios. Destaca, además, la dirección de 2 tesis doctorales, una de ellas con premio extraordinario de doctorado y mención europea que dio lugar a 11 publicaciones y otra que dio lugar, por el momento, a 3 publicaciones.

He participado de forma continua en congresos científicos, habiendo presentado un total de 45 comunicaciones.

En los últimos años la tarea investigadora, aunque constante, se ha compatibilizado con labores de gestión en el departamento de Química Física (3 años), en la Facultad de Química (5 años) y en el Rectorado de la universidad (8 años) donde he sido coordinadora del equipo de gobierno y Vicerrectora de Organización Académica y Profesorado.

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (*ordenados por tipología*)

C.1. Publicaciones (desde 2012)

Martínez-Senra, T., Losada-Barreiro, S., Hermida-Ramón, J.M., Graña, A.M., Bravo-Díaz, C. Molecular Design of Interfaces of Model Food Nanoemulsions: A Combined Experimental and Theoretical Approach. *Antioxidants* 2023, 12(2), 484.

Álvarez-Pazos, N., Graña, Bravo, J., Talavera, M., A. M., García-Fontán, S. Synthesis of iridaoxaphospholane complexes. *Polyhedron* 2023, 229, 116193.

Queizán, M., Graña, A. M., Hermida-Ramón, J. Achieving S₂⁻ in aqueous Solution: An evaluation using First-Principle molecular dynamics simulations. *J. Mol. Liquids* 2022, 349, 118109.

Álvarez-Pazos, N., Bravo, J., Graña, A. M., García-Fontán, S. Allenylidene and diazoalkane complexes of a half-sandwich mixed phosphine – phosphinite ruthenium. *Inorg. Chim. Acta*. 2021, 519, 120277.

López-Fernández, J. L., Mosquera, R. A. & Graña, A. M. Do one-step mechanisms always involve simultaneous evolution of electron density? QTAIM/IQA analysis of the Curtius rearrangement. *Int. J. Quantum Chem.* 2020, 120, 10-15.

Hermida-Ramón, J. M. & Graña, A. M. Theoretical study of the complexes of light-gated corannulene tweezers with fullerene. *Struct. Chem.* 2020, 31, 1331-1337.

Álvarez-Pazos, N., Bravo, J., Graña, A. M. & García-Fontán, S. Rhenium(I) carbonyl complexes bearing the alkenylphosphinite ligand Ph₂POCH₂CH=CH₂. *Polyhedron* 2020, 176, 114288.

Argibay-Otero, S., Graña, A., Carballo, R. & Vázquez-López, E. M. Synthesis of Novel Dinuclear N-Substituted 4-(Dimethylamino)benzaldehyde Thiosemicarbazones of Rhenium(I): Formation of Four- and/or Five-Membered Chelate Rings, Conformational Analysis, and Reactivity. *Inorg. Chem.* 2020, **59**(19) 14101-14117.

Pino-Cuevas, A., Graña, A., Abram, U., Carballo, R., Vázquez-López, E.M., Structural study of mono-, di- and tetranuclear complexes of the {Re(CO)₃}⁺ fragment with thiosemicarbazone/thiosemicarbazone ligands containing benzothiazole or benzoxazole groups, *CrystEngComm* 2018, 20(33), pp. 4781-4792.

Nunez-Montenegro, A.; Argibay-Otero, S; Carballo, R; Grana, A; Vazquez-Lopez, EM, Supramolecular Synthesis and Experimental and Theoretical Studies of Cocrystal Systems Based on Resorcinol-Thiosemicarbazones and N,N'-Divergent Dipyrindines, *Crystal Growth and Design* 2017, 17(6), pp. 3338-3349.

Ramos-Berdullas, N.; Graña, A.M.; Mandado, M., Study of electron transport in polybenzenoid chains covalently attached to gold atoms through unsaturated methylene linkers. *Theoretical Chemistry Accounts* 2015, 134(2):20.

Lorenzo, I.; Graña, A. M., Stacking and hydrogen bond interactions between adenine and gallic acid. *Journal of Molecular Modeling* 2013, 19 (12), 5293-5299.

Ferro-Costas, D.; Otero, N.; Graña, A. M.; Mosquera, R. A., A QTAIM-based energy partitioning for understanding the physical origin of conformational preferences: Application to the Z effect in O=C-X-R and related units. *Journal of Computational Chemistry* 2012, 33 (32), 2533-2543.

C.2. Proyectos (desde 2012)

1. Título del proyecto: Ayudas para la consolidación y estructuración de Grupos de Referencia Competitiva.

Entidad financiadora: Xunta de Galicia. ED431C2019/24

Duración desde: 01-01-2019 hasta: 31-12-2022

Investigador responsable: Ana María Graña Rodríguez

Cuantía de la Subvención: 190000 Euros.

Participación: Investigadora principal

2. Título del proyecto: Ayudas para la consolidación y estructuración de Grupos de Referencia Competitiva.

Entidad financiadora: Xunta de Galicia. GRC2015/17

Duración desde: 01-01-2015 hasta: 31-12-2019

Investigador responsable: Ricardo Antonio Mosquera Castro

Cuantía de la Subvención: 190000 Euros.

Participación: Investigadora

3. Título del proyecto: Radiofármacos basado en complejos metálicos para la obtención de imágenes del receptor de estrógeno y acumulaciones de β -amiloide - RAIREBA

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad - MINECO (CTQ2015-70901-R)

Duración desde: 01/01/16 hasta: 31/12/19

Cuantía de la subvención: 89540 €

Investigador responsable: Ezequiel M. Vázquez López

Participación: Investigadora

4. Título del proyecto: Diseño de circuitos eléctricos unimoleculares

Entidad financiadora: Xunta de Galicia 10TMT314014PR

Duración, desde: 07/08/2010 hasta: 20/09/2013

Cuantía de la subvención: 48357,8€.

Investigador responsable: Marcos Mandado Alonso

Participación: Investigadora

5 Título del proyecto: Estudio computacional de complejos antocianina-copigmento: Estructura molecular y electrónica y actividad antioxidante

Entidad financiadora: Ministerio de educación e ciencia CTQ2010-21500

Duración, desde: enero 2011 hasta: diciembre 2013
Cuantía de la subvención: 73810 €
Investigador responsable: Ricardo Antonio Mosquera Castro
Participación: Investigadora

C.5. Tesis (desde 2012)

Título: Estudio QTAIM de nitrilos y compuestos relacionados.
Doctorando: José Luis López Fernández
Universidad: Universidade de Vigo
Facultad / Escuela: Facultade de Química
Fecha: Febrero 2016

Currículum Vitae de miembros de comisiones de acceso a cuerpos docentes universitarios

Al presente currículum se le dará publicidad en la web de la Universidad de Vigo, a tenor de lo establecido en el art. 62.3 de la LOU y art. 6.4. del RD 1313/2007, de 5 de octubre, a los efectos del correspondiente concurso de acceso a plazas de funcionarios de los cuerpos docentes universitarios.

1.- DATOS PERSONALES / DATOS PERSOAIS			
Apellidos y Nombre <i>Apelidos e nome</i>	Losada Barreiro, Sonia		
Universidad a la que pertenece <i>Universidade á que pertence</i>	Universidade de Vigo		
Cuerpo docente al que pertenece <i>Corpo docente ao que pertence</i>	Titular	Año de ingreso al cuerpo <i>Ano de ingreso no corpo</i>	2021
2. FORMACIÓN ACADÉMICA / FORMACIÓN ACADÉMICA			
Títulos académicos oficiales, salvo doctorado: <i>Títulos académicos oficiais, agás doutoramento:</i>			
-Licenciatura en Ciencias Químicas. Especialidad Química Fundamental. Universidade de Vigo. 2004. -Grado de Licenciada. Modalidad Tesina en Licenciada en Ciencias Químicas. Universidade de Vigo. 2006.			
Formación de doctorado y tesis doctoral, premios y menciones relativos al doctorado y a la tesis doctoral (máximo diez líneas): Formación de doutoramento e tese de doutoramento, premios e mencións relativas ao doutoramento e á tese de doutoramento (máximo dez liñas):			
1. Doctora con acreditación de Doctora Europea por la Universidade de Vigo, dentro del Programa Oficial de Doctorado “Electroquímica: Ciencia y Tecnología”.2009. Premio Extraordinario de Doctorado curso 2008/09. Calificación: Sobresaliente Cum Laude. Dirección: Carlos Daniel Bravo Díaz.			
2. Doctora con la mención de Doctora Internacional por la Universidade de Vigo dentro del Programa Oficial de Doctorado “Ciencia y Tecnología Agroalimentaria”. 2013. Premio Extraordinario de Doctorado curso 2013/14. Calificación: Apto. Cum Laude. Dirección: Carlos Daniel Bravo Díaz.			
Becas y premios obtenidos (los cinco más relevantes): Bolsas e premios obtidos (os cinco máis relevantes):			
1. Beca de colaboración, Ministerio de Educación, Cultura y Deporte. Curso 2003/04. 2. Beca predoctoral Xunta de Galicia, de 01/10/2004 a 01/04/2005. 3. Beca predoctoral FPU, MICINN, de 01/04/2005 a 01/04/2009.			
Premios			
1. Premio de Licenciatura en Ciencias Químicas, curso 2003/04. Nota 9,26 sobre 10. 2. Premio Extraordinario de Doctorado, curso 2008/09. 3. Premio Extraordinario de Doctorado, curso 2013/14.			
Estancias y becas posdoctorales (las dos más relevantes):			

Estadías e bolsas posdoutorais (as dúas máis relevantes):
1. Beca postdoctoral “Ayudas de Apoyo a la etapa inicial a la etapa de formación posdoctoral del plan gallego de investigación, innovación y crecimiento 2011-2015 (Plan I2C)” para el año 2012, POS-A/2012/198. De 29/04/2013 al 30/04/2016. Estancia financiada en la Universidad de Porto (Portugal) de 29/04/2013 al 30/04/2015. 2. Beca postdoctoral. “Axudas de apoio á etapa de formación posdoutoral nas universidades do SUG, nos organismos públicos de investigación de Galicia e noutras entidades do Sistema galego de I+D+i -Modalidade B” (POS-B/2016/012). De 29/07/2016 al 29/12/2018.
Otros méritos (máximo cinco líneas): Outros méritos (máximo cinco liñas):
3. - ACTIVIDAD INVESTIGADORA Y DOCENTE / ACTIVIDADE INVESTIGADORA
Publicaciones y creaciones artísticas profesionales (máximo diez líneas): Publicacións e creacións artísticas profesionais (máximo dez liñas):
1. Olga Mitrus; Malgorzata Zuraw; Sonia Losada Barreiro*; Carlos Bravo Díaz; Fátima Paiva Martins. Targeting antioxidants to interfaces: control of the oxidative stability of lipid-based emulsions. Journal of Agricultural and Food Chemistry. 67 - 11, pp. 3266 - 3274. 2019. Tipo de Producción: Artículo científico. Autor de correspondencia: Si. 2. Emilio A. Raimundez Rodriguez; Sonia Losada Barreiro*; Carlos Bravo Díaz. Enhancing the fraction of antioxidants at the interfaces of oil-in-water emulsions: A kinetic and thermodynamic analysis of their partitioning. Journal of Colloid and Interface Science. 555, pp. 224 - 233. Academic Press Inc Elsevier Science, 2019. Tipo de Producción: Artículo científico. Autor de correspondencia: Si. 3. Mafalda Meireles; Sonia Losada Barreiro*; Marlene Costa; Fátima Paiva Martins; Carlos Bravo Díaz; Luis S Monteiro. Control of antioxidant efficiency of chlorogenates in emulsions: modulation of antioxidant interfacial concentrations. Journal of the Science of Food and Agriculture. 99, pp. 3917 - 3925. DOI 10.1002/jsfa.9615, 2019. Tipo de Producción: Artículo científico. Autor de correspondencia: Si. 4. Marlene Costa; Josefa Freiria Gándara; Sonia Losada Barreiro*; Fátima Paiva Martins; Carlos Bravo Díaz. Effects of droplet size on the interfacial concentrations of antioxidants in fish and olive oil-in-water nanoemulsions and on their oxidative stability. Journal of Colloid and Interface Science, 562 (7), 352-362, 2020. Tipo de Producción: Artículo científico. Autor de correspondencia: Si. 5. Sonia Losada-Barreiro*, Matej Sova, Janez Mravljak, Luciano Saso and Carlos Bravo-Díaz. Synthesis, In Vitro Antioxidant Properties and Distribution of a New Cyanothiophene-Based Phenolic Compound in Olive Oil-In-Water Emulsions. Antioxidants ,9, 623-639, 2020. Tipo de Producción: Artículo científico. Autor de correspondencia: Si.
Congresos, conferencias, seminarios (los diez más relevantes): Congresos, conferencias e seminarios (os dez máis relevantes):
1. Sonia Losada Barreiro; Carlos Bravo Díaz; Fátima Paiva Martins; Laurence Romsted. Enhancement of the antioxidant efficiency of gallates in intact fish oil-in water emulsions. 12th World Congress on Polyphenols Applications. 2018. Bonn (Alemania). Comunicación Oral. Autor de correspondencia: Si. 2. Sonia Losada Barreiro; Josefa Freiria Gándara; Marlene Costa; Carlos Bravo Díaz; Fátima Paiva Martins. The antioxidant efficiency in O/W emulsions can be controlled by modulating

antioxidant interfacial concentrations. Porto (Portugal). XX EuroFoodChem. **2019. Comunicación Oral.** Autor de correspondencia: Si.

3. **Sonia Losada Barreiro**; Josefa Freiría Gándara; Carlos Bravo Díaz; Marlene Costa; Fátima Paiva Martins. Contol of the antioxidant efficiency of gallates in omega-3 enriched oil-in water emulsions. 3rd International Conference on Bio-antioxidants (BIO-ANTIOXIDANTS 2019). Bulgaria. **2019. Comunicación Oral.** Autor de correspondencia: Si.
4. **Sonia Losada Barreiro**, M. Costa, F. Paiva Martins, C. Bravo Díaz. Influence of the temperature on the distribution in oil-in water emulsions. 3rd International Symposium on Lipid Oxidation and Antioxidants. **2020.**Online. **Comunicación Oral.** Autor de correspondencia: Si.
5. **Sonia Losada Barreiro**, J. Freiría-Gándara, M. Costa, F. Paiva Martins, C. Bravo Díaz. Efficiency and distribution of targeted antioxidants at interface of omega-3 rich nanoemulsions with the different reactive molecules. 4th International Symposium on Lipid Oxidation and Antioxidants. **2022.**Vigo. **Comunicación Oral.** Autor de correspondencia: Si.

Proyectos y contratos de investigación (los cinco más relevantes):

Proxectos e contratos de investigación (os cinco máis relevantes):

1. **Título:** Estrategias computacionales y experimentales para el diseño racional de emulsiones, desde convencionales a Pickering, para aplicaciones alimentarias. Referencia: PID2022-136443OB-I00 Entidad financiadora: **MICINN**. Período: 01/09/2023 - 31/08/2026. Investigador principal: Sonia Losada-Barreiro y José Manuel Hermida Ramón
2. **Título:** Contribution of olive and olive oil polyphenolic compounds to the prevention of cardiovascular diseases. Entidad financiadora: **Fundação para a Ciência e a Tecnologia** (Portugal). Financiación: 208234,05. Período: 01/07/2017 - 01/07/2020 Investigador principal: Fátima Paiva Martins
3. **Título:** *Red de Uso Sostenible de Recursos y Residuos*. Entidad financiadora: **Xunta de Galicia** (R2014/019). Financiación: 120.000 €. Período: 2017-2018. Investigador principal: Pedro Pablo Gallego Veiga.
4. **Título:** Correlation between efficiency and distribution of cinnamic acid derivatives antioxidants in model food emulsions. Entidad financiadora: **Xunta de Galicia** (10TAL314003PR). Financiación: 111.032,5 €. Período: 15/02/2011 - 15/02/2014 Investigador principal: Carlos D. Bravo-Díaz
5. **Título:** Partition constants and Distribution of Organic molecules in emulsified systems. Entidad financiadora: **MICINN** (CTQ2006-13969/BQU). Financiación: 55660 €. Período: 01/10/2006 - 31/03/2010. Investigador principal: Carlos D. Bravo-Díaz
6. **Título:** Formation and decomposition of diazo eters in aqueous and hidroalcoholic medium: Mechanism of Reaction. Entidad financiadora: **Xunta de Galicia** (PGIDTT06PXIB314249PR). Financiación: 74800 €. Período: 01/01/2006 - 01/12/2009. Investigador principal: Carlos D. Bravo-Díaz

Transferencia de resultados y proyectos de colaboración con el sector productivo (los cinco más relevantes):

Transferencia de resultados e proxectos de colaboración co sector produtivo (os cinco máis relevantes):

Estancias en otros centros (máximo cinco estancias): Estadias noutros centros (máximo cinco estadias):
-Institución: Universidad de Porto (Portugal). Centro: Departamento de Química y Bioquímica Supervisor: Fátima Paiva Martins. Período: 6 meses curso 2011/12. Programa de doctorado en Ciencia y Tecnología Agroalimentaria. -Institución: Universidad de Porto (Portugal). Centro: Facultad de Ciencias - Departamento de Química y Bioquímica. Supervisor: Carlos D. Bravo Díaz y Fátima Paiva Martins. Período: 30/04/2013-29/04/2015, financiada por POS-A/2012/198 – Xunta de Galicia -Institución: Universidad de Porto (Portugal). Centro: Departamento de Química y Bioquímica. Supervisor: Fátima Paiva Martins. Período: 31/08/2020-11/09/2020, financiada por Programa IACOBUS -Institución: Universidad de Porto (Portugal) Centro: Departamento de Química y Bioquímica. Supervisor: Fátima Paiva Martins Período: 01/09/2022-15/09/2022, financiada por Programa IACOBUS
Dirección de tesis doctorales y otros trabajos de investigación (los cinco más relevantes): Dirección de teses de doutoramento e outros traballos de investigación (os cinco máis relevantes):
Tesis Doctoral. Título: <i>Estrategias para la optimización de la eficacia antioxidante en emulsiones alimentarias enriquecidas con omega 3</i> . Doctoranda: María Josefa Freiría Gándara. Universidad: Universidade de Vigo. Dirección: Carlos D. Bravo Díaz y Sonia Losada Barreiro. Fecha: 09/07/2018. Calificación: Sobresaliente cum Laude y la mención de Doctor Internacional
Trabajos Fin de Grado 1. Título: Efectos de antioxidantes sobre la estabilidad oxidativa de emulsiones aceite en agua. Autor: Lucía Fernández Ventoso. Universidad: Universidade de Vigo. Facultad de Química Dirección: Sonia Losada Barreiro. Fecha: curso 2020/21. Calificación: 9 2. Título: Optimización de la concentración de antioxidante presente en la interfase de sistemas emulsionados. Autor: Tamara Martínez Senra. Universidad: Universidade de Vigo. Facultad de Química. Dirección: Sonia Losada Barreiro y Carlos Bravo Díaz. Fecha: curso 2021/22. Calificación: 9,3 3. Título: Empleo de antioxidantes como estrategia para inhibir la oxidación lipídica en emulsiones O/A. Autor: Leonor da Conceição Póvoa Coutinho. Universidad. Universidade de Vigo. Facultad de Química. Dirección: Sonia Losada Barreiro y Carlos Bravo Díaz. Fecha: curso 2021/22. Calificación: 9,3 4. Título: Emulsiones lipídicas: distribución de compuestos bioactivos. Autor: Laura Hernández Fernández. Universidad: Universidade de Vigo. Facultad de Química. Dirección: Sonia Losada Barreiro y Carlos Bravo Díaz. Fecha: curso 2021/22. Calificación: 9,0
Material docente original y publicaciones docentes (máximo cinco líneas): Material docente orixinal e publicacións docentes (máximo cinco liñas):
1. Sienkiewicz; Chemii Wydzial; I. Rusinek; A. Siatecka; Sonia Losada Barreiro . Flower colour change demonstration as a visualization of potential harmful effects of ammonia gas on living creatures. J. Chem. Educ. 96 - 9, pp. 1982 - 1987. 2019 . Tipo de Producción: Artículo científico. Autor de correspondencia: No.
Proyectos de innovación docente (los dos más relevantes): Proxectos de innovación docente (os dous máis relevantes):

Participación en congresos orientados a la formación docente universitaria (los cinco más relevantes):
Participación en congresos orientados á formación docente universitaria (os cinco máis relevantes):

1. **Sonia Losada Barreiro**; Carlos Bravo Díaz; Ignacio Pérez Juste, Ricardo A. Mosquera. A physical chemistry experiment determining partition constants and distribution of antioxidants in edible oil-water mixtures. **EDULEARN15 Proceedings**. pp. 709 - 717. **2015**. ISSN 2340-1117, ISBN: 978-84-606-8243-1. Tipo de Producción: Proceeding. Autor de correspondencia: No.
2. **Sonia Losada Barreiro**; Carlos Bravo Díaz; Ricardo A. Mosquera; Ángeles Peña Gallego; Ignacio Pérez Juste. Partition coefficients of antioxidants between oils and water. A measure of the hydrophobicity of molecule. **EDULEARN18 Proceedings**. pp. 9756 - 9761. **2018**. ISSN 2340-1117, ISBN 978-84-09-02709-5. Tipo de Producción: Proceeding. Autor de correspondencia: No.
3. Carlos Bravo Díaz, **Sonia Losada Barreiro**, Cristina Bravo Fernández, Carolina Fernández. Scientific method canvas to Foster scientific thinking and stem vocations through visual thinking strategies. **EDULEARN19 Proceedings**. pp. 3473 - 3478. **2019**. ISSN 2340-1117, ISBN 978-84-09-12031-4. Tipo de Producción: Proceeding. Autor de correspondencia: No.
4. **Sonia Losada-Barreiro**, Carlos Bravo-Díaz, Ángeles Peña-Gallego, Ricardo A. Mosquera-Castro, Ana Graña-Rodríguez. A visual thinking, evidence-based kinetic laboratory experiment: determining the rate law for the bleaching of crystal violet dye by hydroxide ions. **EDULEARN 20 Proceedings**. 2020. Pp 3017-3021. ISSN: 2340-1117. ISBN: 978-84-09-17979-4. Tipo de Producción: Proceeding. Autor de correspondencia: No.
5. **Sonia Losada-Barreiro**, Carlos Bravo-Díaz. A visual spatial skills in teaching and learning chemistry. **EDULEARN 21 Proceedings**. 2021. Tipo de Producción: Proceeding. Autor de correspondencia: Si. doi:10.21125/edulearn.2021.0945.

Evaluación positiva de su actividad docente (nº de quinquenios y fecha del último reconocimiento):
Avaliación positiva da súa actividade docente (nº de quinquenios e data do último recoñecido):

2 Quinquenios (evaluados hasta 15/07/2019)

Evaluación positiva de su actividad investigadora (nº de sexenios y fecha del último reconocimiento):
Avaliación positiva da súa actividade investigadora (nº de sexenios e data do último recoñecido):

2 Sexenios (tramos evaluados 2011-2016; 2017-2022)

Otros méritos (máximo cinco líneas):
Outros méritos (máximo cinco liñas):

Publicaciones: 62 (> 50% Q1)
 Capítulos de libro: 4
 H index: 24 (Scopus), 1165 citations(Scopus) (<https://orcid.org/0000-0002-9447-5626>)
 Tesis doctorales co-dirigidas en la Universidad de Vigo: 1 y 1(en progreso)
 Trabajos fin de Máster y de Grado co-dirigidos en la Universidad de Vigo: 2 (TFM) y 14 (TFG)
 Trabajos fin de Máster y tesis de Licenciatura co-dirigidos en la Universidad de Porto: 4 (TFM) y 3 (TL)
 Co-editora de un número especial “Advances in Controlling Lipid Peroxidation in Bulk and in Emulsified Oils” de la revista “Antioxidants”, 2022-2023.

Co-editora de un número especial “Interfacial Chemistry” de la revista “Molecules”, 2020-2021.

4.- ACTIVIDAD PROFESIONAL / ACTIVIDADE PROFESIONAL (máximo diez líneas / máximo dez liñas)

- 2021 (diciembre) - actualidad – Profesora Titular, Universidade de Vigo
- 2021(abril) – 2021(diciembre) – Profesora Titular Interina, Universidade de Vigo
- 2019-2021 – Investigadora distinguida, Plan de Retención de Talento Universidade de Vigo 2018
- 2013-2019 – Investigadora postdoctoral, Xunta de Galicia (Plan I2C, POS-A/2012/198 and POS-B/2016/012.
- 2011-2013 – Investigadora a cargo de Proyecto de Investigación, Universidade de Vigo, (10TAL314003PR, Xunta de Galicia)

5.- EXPERIENCIA EN GESTIÓN Y ADMINISTRACIÓN EDUCATIVA, CIENTÍFICA O TECNOLÓGICA / EXPERIENCIA EN XESTIÓN E ADMINISTRACIÓN EDUCATIVA, CIENTÍFICA OU TECNOLÓXICA.

Desempeño de cargos unipersonales de responsabilidad en gestión universitaria recogidos en los estatutos de las universidades o que hayan sido asimilados, o en organismos públicos de investigación durante al menos un año (los tres más relevantes):

Desenvolvemento de cargos unipersoais de responsabilidade en xestión universitaria recollidos nos estatutos das universidades ou que teñan sido asimilados, ou en organismos públicos de investigación durante polo menos un ano (os tres máis relevantes):

Desempeño de puestos en el entorno educativo, científico o tecnológico dentro de la administración general del Estado o de las comunidades autónomas durante al menos un año (los dos más relevantes):

Desenvolvemento de postos na contorna educativa, científica ou tecnolóxica dentro da administración xeral do Estado ou das comunidades autónomas durante polo menos un ano (os tres máis relevantes):

Otros méritos (máximo cinco líneas):

Outros méritos (máximo cinco liñas):



CURRICULUM VITAE (CVA)

AVISO IMPORTANTE – El Curriculum Vitae no podrá exceder de 4 páginas. Para rellenar correctamente este documento, lea detenidamente las instrucciones disponibles en la web de la convocatoria.

IMPORTANT – The Curriculum Vitae cannot exceed 4 pages. Instructions to fill this document are available in the website

Fecha del CVA

01-12-2023

Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre	Jose Manuel		
Apellidos	Hermida Ramón		
Sexo (*)	Hombre	Fecha de nacimiento (dd/mm/yyyy)	08/09/1970
DNI, NIE, pasaporte	36104135T		
Dirección email	jose_hermida@uvigo.es	URL Web	
Open Researcher and Contributor ID (ORCID) (*)	0000-0002-5354-2386		

* datos obligatorios

A.1. Situación profesional actual

Puesto	Catedrático de Universidad		
Fecha inicio	16-11-2021		
Organismo/ Institución	Universidade de Vigo		
Departamento/ Centro	Química Física		
País	España	Teléfono	986812298
Palabras clave	Interacciones intermoleculares; efecto disolvente; estados excitados. Modelos QM/MM; SERS. Reactividad Química.		

A.2. Situación profesional anterior (incluye interrupciones en la carrera investigadora, de acuerdo con el Art. 14. 2.b) de la convocatoria, indicar meses totales)

Periodo	Puesto/ Institución/ País / Motivo interrupción
10/1995-4/1998	Becario Predoctoral "Xunta Galicia". Universidade de Santiago de Compostela. España
5/1999-7/2000	Contratado Postdoctoral. University of Lund. Suecia
8/2000-7/2002	Becario Postdoctoral del Programa Sectorial de Formación del Profesorado y Personal Investigador. University of Lund. Suecia
8/2002-9/2003	Profesor Asociado T3-P6. Universidade de Vigo. España
10/2003-9/2007	Investigador Contratado "Isidro Parga Pondal". Universidade de Vigo. España.
10/2007-9/2010	Profesor Contratado Doctor. Universidade de Vigo. España.
9/2010-11/2021	Profesor Titular de Universidad. Universidade de Vigo. España.

(Incorporar todas las filas que sean necesarias)

A.3. Formación Académica

Grado/Master/Tesis	Universidad/País	Año
Licenciatura en Química	Universidade de Santiago de Compostela	1993

Parte B. RESUMEN DEL CV

Durante mi tesis doctoral comencé a trabajar en el estudio de diversos aspectos relacionados con las interacciones no covalentes. En esa primera etapa mis principales intereses fueron el desarrollo de funciones analíticas para reproducir las características de la interacción en sistemas simples con presencia de enlace de hidrógeno. Como resultado se mostró la posibilidad de obtener descripciones apropiadas de la interacción a bajo coste computacional, y la importancia de efectos inductivos en la interacción de agregados de más de dos moléculas y en la representación de fases condensadas.

Durante mi estancia postdoctoral en el grupo del profesor Karlström en la Universidad de Lund (Suecia) continué mi trabajo en el campo de las interacciones intermoleculares, más concretamente en la elaboración de modelos teóricos para su representación. Dichos estudios se convirtieron en un proyecto más ambicioso que buscaba la creación de un modelo discreto de disolvente de tipo QM/MM (o más específicamente Químico Cuántico-Químico Estadístico) para una representación de sus efectos en cálculos cuánticos. Esta colaboración se mantuvo a lo largo del tiempo, adquiriendo el modelo construido una mayor extensión tanto en los tipos de sistemas como en las propiedades estudiadas. Así se ha pasado del estudio de moléculas pequeñas a moléculas de tamaño medio o a especies radicalarias, también de estudios del estado fundamental al análisis de estados excitados.

Al final de mi estancia postdoctoral comienzo una colaboración con los profesores Jesús Rodríguez Otero y Enrique M. Cabaleiro Lago, trabajando en el campo de la reactividad química. A lo largo de esta colaboración me dedico al estudio de parámetros que permitan discernir reacciones pericíclicas y pseudopericíclicas, una cuestión íntimamente ligada al estudio de la aromaticidad. Como resultado de estas investigaciones ha habido modificaciones en los criterios que hasta entonces se empleaban para distinguir ambos tipos de reacciones.

A continuación me introduje en el estudio de sistemas supramoleculares, orientado principalmente hacia el diseño de pinzas y grúas moleculares para la captación de sistemas iónicos. Los resultados obtenidos indican que pinzas moleculares formadas por anillos aromáticos son útiles para captar especies aniónicas. Además, es posible mediante distintos substituyentes modelar la intensidad de la interacción, creando pinzas específicas para determinadas condiciones y necesidades.

También he establecido colaboraciones con grupos experimentales en dos vertientes principales. Por un lado, en reactividad de compuestos inorgánicos con presencia de Iridio y por otro en el desarrollo y aplicación de metodologías teóricas para dilucidar y complementar la interpretación de resultados obtenidos mediante espectroscopía SERS. En este último campo colaboré con el grupo del profesor Luis Líz Marzán y se generaron diferentes publicaciones.

En los últimos años he trabajado en diferentes líneas de investigación. Por lo que respecta a líneas con una vertiente más metodológica, he participado en la extensión y aplicación a sistemas de mayor tamaño de la metodología Químico Cuántico-Químico Estadística desarrollada junto con el profesor Karlström. Esto supone la paralelización del método, así como el desarrollo de aproximaciones al modelo ya existente que permitan por un lado evaluar la interacción entre el disolvente y el soluto a un menor coste computacional y por otro incluir interacciones de más difícil modelización, como los efectos de penetración electrostáticos. Así mismo también estoy trabajando en el uso de las novedosas técnicas DMRG, las cuales permiten el estudio de sistemas en estado excitado empleando espacios activos en metodología CAS que previamente eran inabordables. Este aumento del espacio activo posible ha permitido el análisis de sistemas que eran inaccesibles. Por otra parte, desde un punto de vista más aplicado, he empleado metodologías QM/MM con dinámica molecular para estudiar distintos sistemas químicos. Además, estoy empleando métodos de dinámica molecular con modelos clásicos para estudiar procesos en sistemas de gran tamaño, como pueden ser el proceso de oxidación en emulsiones oleosas, o la interacción de sustratos con proteínas para el estudio de herbicidas naturales o receptores asociados a patologías humanas.

Durante mi carrera he dirigido los cuatro trabajos de fin de máster del Máster "Química Teórica y Modelización Computacional". También he dirigido la tesis doctoral titulada: "Computational Design of Molecular Tweezers and Cranes with Enhanced Ion- π Interactions" presentada por Dña. Marta Sanchez Lozano. Año 2014. Así mismo estoy dirigiendo la tesis doctoral de Dña Marta Queizán Cores, titulada "Computational Study of Reactions of solvated Low Energy Electrons with Components of Nucleic Acids"

Soy coordinador del Master Interuniversitario "Química Teórica y Modelización Computacional". Desde 2014 hasta la actualidad. He sido Vicedecano Facultad de Química. Universidad de Vigo desde 01/04/2011 hasta 02/10/2013.

Soy miembro del equipo de desarrolladores del paquete del programa MOLCAS desde el 2013.

Soy "Topic Editor" en la revista "The International Journal of Molecular Science".

Parte C. LISTADO DE APORTACIONES MÁS RELEVANTES (últimos 10 años).

C.1. Publicaciones más importantes en libros y revistas con "peer review" y conferencias (ver instrucciones).

1. Título: Ultrafast Ring-Opening/Closing and Deactivation Channels for a Model Spiropyran-Merocyanine System. Autores: Sanchez-Lozano, Marta; Manuel Estevez, Carlos; Hermida-Ramon, Jose M.; Serrano-Andrés, Luis. Journal of Physical Chemistry A, Volumen: 115 Páginas: 9128-9138, año 2011. DOI10.1021/jp2062095 (34 citas)
2. Título: Electron Density Based Partitioning Scheme of Interaction Energies. Autores: Mandado ,Marcos; Hermida-Ramón, Jose M.; Serrano-Andrés, Luis. Journal of Chemical Theory and Computation, Volumen: 7 Páginas: 633-641, año 2011. DOI10.1021/ct100730a (19 citas)
3. Título: Simultaneous SERS detection of copper and cobalt at ultratrace levels. Autores: Tsoutsis, Dionysia; Guerrini, Luca; Hermida-Ramon, Jose M.; Giannini, V.; Liz-Marzán Luis. M.; Wei, A.; Alvarez-Puebla Ramón A. Nanoscale, Volumen: 5 Páginas: 5841-5846, año 2013. DOI10.1039/c3nr01518a (70 citas)
4. Título: A computational study of the protonation of simple amines in water clusters. Autores: Sanchez-Lozano, Marta; Cabaleiro-Lago, Enrique M.; Hermida-Ramon, Jose M.; Estevez, Carlos M. Journal of Physical Chemistry A, Volumen: 117 Páginas: 4584-4590, año 2013. DOI10.1039/c3cp51668g (10 citas)
5. Título: Formation of Indanone from an Iridanaphthalene Complex-. Autores: Talavera, María; Bolaño, Sandra; Bravo, Jorge; Castro, Jesús; García-Fontán, Soledad; Hermida-Ramón, Jose Manuel. ORGANOMETALLICS. Volumen: 32 Páginas: 4058-4060, año 2013. DOI10.1021/om400702b (22 citas)
6. Título: Electronic effects of substituents on the stability of the iridanaphthalene compound $[\text{IrCp}^*\{\text{C}(\text{OMe})\text{CH}=\text{C}(\text{o-C}_6\text{H}_4)(\text{Ph})\}(\text{PMe}_3)]\text{PF}_6$. Autores: Talavera, María; Bravo, Jorge; Castro, Jesús; García-Fontán, Soledad; Hermida-Ramón, Jose Manuel; Bolaño, Sandra. DALTON TRANSACTIONS. Volumen: 43 Páginas: 17366-17374, año 2014. DOI10.1039/c4dt02744b (16 citas)
7. Título: Method for Slater-Type Density Fitting for Intermolecular Electrostatic Interactions with Charge Overlap. I. The Model. Autores: Öhrn, Anders; Hermida-Ramon, Jose M.; Karlström, Gunnar. Journal of Chemical Theory and Computation. Volumen: 12 Páginas: 2298-2311, año 2016. DOI10.1021/acs.jctc.5b01155 (8 citas)
8. Título: Structure and spectrum of the hydrated electron. A combined quantum chemical statistical mechanical simulation. Autores: Hermida-Ramon, Jose M.; Öhrn, Anders; Karlström, Gunnar. Journal of Molecular Liquids. Volumen: 292 Páginas: 111300:1-14, año 2019. DOI10.1016/j.molliq.2019.111300
9. Título: A Highly Efficient Neutral Anion Receptor in Polar Environments by Synergy of Anion - π Interactions and Hydrogen Bonding. Autores: Queizan, Marta; Sanchez-Lozano, Marta; Mandado, Marcos; Hermida-Ramon, Jose M. Journal of Chemical Information and Modelling. Volumen: 61 Páginas: 4455-4461, año 2021. DOI: 10.1021/acs.jcim.1c00595
10. Título: Achieving S^{2-} in Aqueous Solution: An evaluation using First-Principle Molecular Dynamics Simulations. Autores: Queizan, Marta; Graña, Ana M.; Hermida-Ramon, Jose M. Journal of Molecular Liquids. Volumen: 349 Páginas: 118109, año 2022. DOI: 10.1016/j.molliq.2021.118109

C.2. Congresos.

1. Carlos M. Estévez, Marta Sánchez-Lozano, Jose M. Hermida-Ramón. Ring-opening/closing and deactivation channels for a model spiropyran-merocyanine system. *Excited States and non-adiabatic processes in complex systems. Theoretical approaches*. Sant Feliu de Guíxols (España), 2011. Póster.
2. Jose M. Hermida-Ramón, Anders Öhrn, Gunnar Karlström. A method for slater-type density fitting of intermolecular electrostatic interactions with charge overlap. *Electronic Structure Theory for Strongly Correlated Systems*. Palermo (Italia), 2012. Póster.
3. "A Combined Quantum Mechanical/Statistical Mechanical Method to Simulate Solvated Systems in Ground and Excited State". Ciclo Seminarios 2014, Donostia International Physics Center. Septiembre 2014. Conferencia por invitación.
4. Jose M. Hermida-Ramón. Modelling electrostatic penetration in QM/MM calculations through slater functions: Describing a solvated electron using a QM/statistical mechanics method. *Novel Computational Methods for Quantitative Electronic Structure Calculations*. Kobe (Japón), 2015. Póster.
5. Jose M. Hermida-Ramón. Solvated electron in water. A highly coupled system for a QM/MM method. *4th Molcas Developers' Workshop*. Viena (Austria), 2016. Comunicación Oral.
6. Jose M. Hermida-Ramón. Describing a solvated electron using a QM/Statistical mechanic method with explicit charge penetration. *6th International Advances in Applied Physics and Materials Science Congress and Exhibition*. Estambul (Turquía), 2016. Comunicación Oral.
7. Jose M. Hermida-Ramón. Modelling explicit solvent in excited state calculations. *1st International Vigo Meeting on Advanced Computational Chemistry, IViMACC*. Vigo, 2017. Ponente por Invitación.
8. Jose M. Hermida-Ramón. Liquid phase of highly coupled solute-solvent systems with qm/mm calculations with explicit charge penetration: Solvated electron. *Joint Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER)*. Barcelona, 2017. Comunicación Oral.
9. Iría Bolaño Losada, Jose M. Hermida-Ramón. Solvent effects in the photochemical mechanism of a desactivation process in urocanic acid. *11th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2018)*. Toledo, 2018. Póster.

C.3. Proyectos o líneas de investigación en los que ha participado

1. REFERENCIA: ED431C2019/24. TÍTULO DEL PROYECTO: Ayudas para la consolidación y estructuración de Grupos de Referencia Competitiva. ENTIDAD FINANCIADORA: Xunta de Galicia. ENTIDADES PARTICIPANTES: Universidade de Vigo
DURACIÓN DESDE: 01-01-2019 HASTA: 31-12-2022. PARTICIPACIÓN: Investigador.
Cuantía de la Subvención: 190000 Euros.
2. REFERENCIA: GRC2015/17. TÍTULO DEL PROYECTO: Ayudas para la consolidación y estructuración de Grupos de Referencia Competitiva. ENTIDAD FINANCIADORA: Xunta de Galicia. ENTIDADES PARTICIPANTES: Universidade de Vigo
DURACIÓN DESDE: 01-01-2015 HASTA: 31-12-2019. PARTICIPACIÓN: Investigador.
Cuantía de la Subvención: 200000 Euros.
3. REFERENCIA: CTQ2008-06767/BQU. TÍTULO DEL PROYECTO: Diseño estructural de Gruas Moleculares. ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia e Innovación. ENTIDADES PARTICIPANTES: Universidade de Vigo
DURACIÓN DESDE: 01-01-2009 HASTA: 31-12-2011 PARTICIPACIÓN: Investigador Principal. Cuantía de la Subvención: 36300 Euros.

C.4. Participación en actividades de transferencia de tecnología/conocimiento y explotación de resultados

Currículum Vitae de miembros de comisiones de acceso a cuerpos docentes universitarios

Al presente currículum se le dará publicidad en la web de la Universidad de Vigo, a tenor de lo establecido en el art. 62.3 de la LOU y art. 6.4. del RD 1313/2007, de 5 de octubre, a los efectos del correspondiente concurso de acceso a plazas de funcionarios de los cuerpos docentes universitarios.

1.- DATOS PERSONALES / DATOS PERSOAIS				
Apellidos y Nombre <i>Apelidos e nome</i>	Tojo Suárez, M ^a de la Concepción			
Universidad a la que pertenece <i>Universidade á que pertence</i>	Universidade de Vigo			
Cuerpo docente al que pertenece <i>Corpo docente ao que pertence</i>	Catedrática de Universidad	Año de ingreso al cuerpo <i>Ano de ingreso no corpo</i>	2021	
2. FORMACIÓN ACADÉMICA / FORMACIÓN ACADÉMICA				
Títulos académicos oficiales, salvo doctorado: <i>Títulos académicos oficiais, agás doutoramento:</i>				
Licenciada en Química				
Formación de doctorado y tesis doctoral, premios y menciones relativos al doctorado y a la tesis doctoral (máximo diez líneas): <i>Formación de doutoramento e tese de doutoramento, premios e mencións relativas ao doutoramento e á tese de doutoramento (máximo dez liñas):</i>				
Doctora por la Universidad de Santiago de Compostela. Julio de 1991. Título: <i>Análisis fractal de movimientos markovianos y no markovianos en medios euclídeos y desordenados</i> . Calificación: Apto "Cum Laude". Dirección: Manuel Arturo López Quintela.				
Becas y premios obtenidos (los cinco más relevantes): <i>Bolsas e premios obtidos (os cinco máis relevantes):</i>				
1. Beca predoctoral Segundo Gil Dávila, 1987-89. 2. Beca Predoctoral de la Xunta de Galicia, 1989-1991. 3. Beca de movilidad <i>Bolsa de Investigación para estancias en otros Centros de Investigación</i> para financiar la estancia en la Universidad de Tesalónica (Grecia). Universidad de Santiago de Compostela. 1990 4. Beca de movilidad <i>Estadías en centros de investigación</i> para financiar la estancia en la Universidad Complutense de Madrid. Vicerrectorado de Investigación da Universidade de Vigo. 1993. 5. Beca de movilidad <i>Estadías en centros de investigación</i> para financiar la estancia en la Universidad de Tesalónica (Grecia). Vicerrectorado de Investigación da Universidade de Vigo. 1994.				
Estancias y becas posdoctorales (las dos más relevantes): <i>Estadías e bolsas posdoutorais (as dúas máis relevantes):</i>				
• Universidad de Bielefeld (Alemania). Supervisor: Wilhem Knoche, Facultad de Química, Dpto. Química Física. 1987. <i>Estudio teórico de reacciones controladas por difusión en medios microcompartimentalizados</i> • Universidad de Tesalónica (Grecia), Supervisor: Panos Argyrakis, Centro: Department of Physics, 1991 y 1994. <i>Computational approaches on transport in disordered systems</i>				
Otros méritos (máximo cinco líneas): <i>Outros méritos (máximo cinco liñas):</i>				

3. - ACTIVIDAD INVESTIGADORA Y DOCENTE / ACTIVIDADE INVESTIGADORA

Publicaciones y creaciones artísticas profesionales (máximo diez líneas):

Publicacións e creacións artísticas profesionais (máximo dez liñas):

- C. Tojo*, M.C. Blanco, y M.A. López Quintela, *Langmuir* 13, 4527-4534 (1997). **Nº citas: 107**
 C. Tojo*, M.C. Blanco, F. Rivadulla y M.A. López Quintela, *Langmuir* 13, 1970-1977 (1997). **Nº citas: 117**
 S. Quintillán, C. Tojo*, M.C. Blanco y M.A. López Quintela, , *Langmuir* 17, 7251-7254 (2001). **Nº citas: 72**
 M.A. López Quintela*, C. Tojo, et al, , *Curr. Opin. Coll. & Interface Sci.* 9, 264-278 (2004). **Nº citas: 501**
 C.Tojo*, M. de Dios, y M.A. López Quintela, *J. Phys.Chem. C* 113, 19145-19154 (2009).
 F. Barroso y C. Tojo*, *J. Coll. Interface Sci.* 363, 73-83 (2011).
 F. Barroso y C. Tojo*, *J. Phys.Chem. C* 117, 17801-17813 (2013).
 C. Tojo*, M. de Dios, D. Buceta y M.A. López-Quintela, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 16, 19720 – 19731 (2014).
 D. Buceta, C. Tojo, M. B. Vukmirovic, F. L. Deepak y M. A. López-Quintela, *Langmuir* 31, 7435-7439 (2015).
 C. Tojo*, D. Buceta y M. A. López-Quintela, *J. Coll. Interface Sci.*, 602, 367-375 (2021).

Congresos, conferencias, seminarios (los diez más relevantes):

Congresos, conferencias e seminarios (os dez máis relevantes):

1. C. Tojo, M.C. Blanco y M.A. López Quintela. *Synthesis of nanoparticles in microemulsions: A comparison study between experimental and simulation results*. **V International Workshop on Non-Crystalline Solids**. Santiago de Compostela. 1997. Comunicación oral.
2. M. de Dios, F. Barroso y C. Tojo. *Bimetallic nanoparticle formation in microemulsions: mechanism and Monte Carlo simulation*. **9th Workshop Nanoscience and Nanotechnology**. Sofía (Bulgaria).2007. Conferencia invitada.
3. M. de Dios, F. Barroso y C. Tojo. *A simulation study of bimetallic nanoparticles synthesized in microemulsions*. **24th Conference of the European Colloid and Interface Science**. Praga (República Checa). 2010. Comunicación oral.
4. M. de Dios, C. Tojo y M.A. López-Quintela. *Modelling of bimetallic nanoparticles synthesis in microemulsions: mechanism and structure*. **Colloids and Materials. The 1st International Symposium on Colloids and Materials**. Amsterdam. 2011. Comunicación oral.
5. C. Tojo y F. Barroso. *Microemulsions as reaction media for the synthesis of bimetallic nanoparticles*. **Trends in Nanotechnology**. Madrid. 2012. Comunicación oral.
6. C. Tojo y F. Barroso. *A simulation study on the metal segregation of bimetallic nanoparticles obtained via microemulsion route*. **XIX Encontro galego portugués de Química**. Vigo. 2013. Comunicación oral.
7. C. Tojo, D. Buceta, M. B. Vukmirovic, F. L. Deepak y M. A. López-Quintela. *Sub-nanometer control in the synthesis of bimetallic nanoparticles using microemulsions*. **15th IACIS (International Association Colloids and Interface Science)**. Mainz (Alemania). 2015. Comunicación oral.
8. C. Tojo, D. Buceta y M. A. López-Quintela. *Understanding the metal distribution in core-shell nanoparticles prepared in micellar media*. **2015 EMN (Energy, Materials Nanotechnology)**. Estambul (Turquía). 2015. Conferencia invitada.
9. C. Tojo, D. Buceta y M. A. López-Quintela. *One-pot synthesis of Au-Pt core-shell nanoparticles in microemulsions: a simulation study on the cage-like effect*. **12th International Conference on Nanosciences and Nanotechnologies**. Tesalónica (Grecia). 2015. Conferencia invitada.
10. C. Tojo. *Slowing-down of Pt reduction kinetics in microemulsions: A computer simulation study*. **5th International Conference on Physical and Theoretical Chemistry**. Edimburgo (Escocia). 2018. Conferencia invitada.

Proyectos y contratos de investigación (los cinco más relevantes):

Proxectos e contratos de investigación (os cinco máis relevantes):

1. *Películas auto-organizadas de nanopartículas magnéticas con y sin recubrimientos de sílice con aplicaciones en almacenamiento magnético de alta densidad.* Entidad financiadora: **Ministerio de Educación y Ciencia**, PB98-1088. Financiación: 4.500.000 pts = 30.291,01€. Periodo: 01/12/1999 - 01/12/2001. Investigador principal: Luis Manuel Liz Marzán. Nº participantes: 6
2. *Síntesis y propiedades de nanomateriales magnéticos 1D, 2D y 3D.* Entidad financiadora: **Ministerio de Educación y Ciencia**, MAT200200824. Financiación: 212.750 €. Periodo: 1-11-2002- 31-10-2005. Investigador principal: Manuel Arturo López Quintela. Nº participantes: 12
3. *Nanoestructuras magneto-plasmónicas para biosensores de alta sensibilidad.* Entidad financiadora: **Ministerio de Educación y Ciencia**, NAN2004-09195-C04-01. Financiación: 142.600 €. Periodo: 31/12/2005 - 31/12/2008. Investigador principal: José Rivas Rey. Nº participantes: 6
4. *Interacción de péptidos amiloides con modelos in vitro de membrana: estudio del efecto de diferentes interfases lipídicas sobre el proceso de agregación de los péptidos.* Entidad financiadora: **Ministerio de Ciencia e Innovación** (referencia: CTQ2009-08676, subprograma BQU). Financiación: 10.890 €. Periodo: 01/01/2010 - 31/12/2012. Investigador principal: Nuria Vila Romeu. Nº participantes: 6
5. *Modelización de la síntesis de nanopartículas bimetálicas en microemulsiones.* Entidad financiadora: **Ministerio de Ciencia e Innovación** (MAT2011-28673-C02-02). Financiación: 9.917 €. Periodo: 01-10-2011 - 31-12-2012. Investigador principal: María Concepción Tojo Suárez. Nº participantes: 3

Transferencia de resultados y proyectos de colaboración con el sector productivo (los cinco más relevantes):

Transferencia de resultados e proxectos de colaboración co sector produtivo (os cinco máis relevantes):

Estudio de aditivos de carácter hidrófugo en materiales de construcción. Entidad financiadora: **Industria Química Río Blanco S.L.**, CO-0112-05. Financiación: 92.820 €. Periodo: 01/03/2005 - 01/03/2008. Investigador principal: José Enrique Tojo Suárez (Ángeles Domínguez de Santiago desde 08/06/2006). Nº participantes: 3

Estancias en otros centros (máximo cinco estancias):

Estadías noutros centros (máximo cinco estadías):

- Universidad de Bielefeld (Alemania). Supervisor: Wilhem Knoche, Facultad de Química, Dpto. Química Física, 1988.
- Universidad de Tesalónica (Grecia), Supervisor: Panos Argyrakakis, Department of Physics, 1991 y 1994.
- Universidad Complutense de Madrid. Supervisor: Juan José Freire Gómez. Dpto. Química Física, 1993
- Universidad Nacional de Rosario (Argentina) Supervisor: Diego Moreno, Dpto Química Física, 2019.

Dirección de tesis doctorales y otros trabajos de investigación (los cinco más relevantes):

Dirección de teses de doutoramento e outros traballos de investigación (os cinco máis relevantes):

- **Tesis Doctoral: Síntesis de nanopartículas en microemulsiones. Estudio por simulación.** Doctorando: Miguel Ángel de Dios Álvarez. Universidade de Vigo. Dirección: M^a Concepción Tojo Suárez. 18/12/2009. Calificación: Sobresaliente cum Laude
- **Tesis Doctoral: Modelo de simulación de la formación de nanopartículas en microemulsiones. Influencia del núcleo crítico.** Doctorando: Fernando Andrés Barroso Sanjurjo. Universidade de Vigo. Dirección: M^a Concepción Tojo Suárez. 15/06/2010. Calificación: Sobresaliente cum Laude
- **Trabajo Fin de Máster: Síntesis de nanopartículas bimetálicas en microemulsiones.** Autor: Elena González Domínguez. Master Universitario: Ciencia y Tecnología de coloides. Universidade de Vigo. Dirección: M^a Concepción Tojo Suárez. 06/2012
- **Trabajo Fin de Grado: Optimización da síntese de nanocatalizadores Au/Pt en microemulsions.** Autor: Jorge Pérez Álvarez. Universidade de Vigo. Dirección: M^a Concepción Tojo Suárez. 23/10/2019
- **Tesis de Licenciatura: Influencia de la constante de intercambio en el mecanismo de formación de nanopartículas en microemulsiones.** Autor: Silvia Quintillán Rivera. Universidade de Vigo. Dirección: M^a Concepción Tojo Suárez. 24/09/1999. Calificación: Sobresaliente

Material docente original y publicaciones docentes (máximo cinco líneas):

Material docente orixinal e publicacións docentes (máximo cinco liñas):

1. C.Tojo y A. Domínguez, <i>Estudio comparativo de las calificaciones antes y después del EEES</i>, Colección Formación e Innovación Educativa en la Universidad, 389-393 Servicio de Publicaciones de la Universidad de Vigo (2010) 2. . C.Tojo, <i>Adaptación de la Espectroscopía al Espacio Europeo de Educación Superior</i>, Evaluación de la Calidad de la Educación Superior y de la Investigación, 268-268 (2010)
Proyectos de innovación docente (los dos más relevantes): Proxectos de innovación docente (os dous máis relevantes):
1. Proyecto piloto de adaptación al EEES en la Universidade de Vigo. Curso 2007-08 2. Proyecto de Implantación de un Modelo Tutorial basado en la Mentoría (MEET-UVigo), financiado por la Universidad de Vigo (36000 €). Curso 2016-17. 3. Proyecto de Implantación de un Modelo Tutorial basado en la Mentoría (MEET-UVigo), financiado por la Universidad de Vigo (43000 €). Curso 2017-18. 4. Programa Campus científicos de verano, financiado por el Ministerio de Educación, Cultura y Deporte. Campus de Excelencia Internacional Do Mar de la Universidad de Vigo. Duración: 20h. Vigo, 2013.
Participación en congresos orientados a la formación docente universitaria (los cinco más relevantes): Participación en congresos orientados á formación docente universitaria (os cinco máis relevantes):
1. C. Tojo. <i>Guía docente de Espectroscopía</i>. II Reunión INnovación DOcente en QUIMica 2007. Vigo, 2007. Póster. 2. C. Tojo y A. Domínguez. <i>Estudio comparativo de las calificaciones antes y después del EEES</i>. I Congreso de Docencia Universitaria. Vigo, 2009. Póster. 3. C. Tojo. <i>Adaptación de la Espectroscopía al Espacio Europea de Educación Superior</i>. VI Foro Evaluación de la Calidad de la Educación Superior y de la Investigación. Vigo, 2009. Póster.
Evaluación positiva de su actividad docente (nº de quinquenios y fecha del último reconocimiento): Avaliación positiva da súa actividade docente (nº de quinquenios e data do último recoñecido):
6 quinquenios, último 2019
Evaluación positiva de su actividad investigadora (nº de sexenios y fecha del último reconocimiento): Avaliación positiva da súa actividade investigadora (nº de sexenios e data do último recoñecido):
4 sexenios, último 2020
Otros méritos (máximo cinco líneas): Outros méritos (máximo cinco liñas):
Calificación promedio de las encuestas docentes realizadas por los alumnos: 4.2 sobre 5 Elegida MADRINA por los alumnos de la licenciatura en Química de la promoción 2005-2010 y 2006-2011. Elegida MADRINA por los alumnos del Máster Universitario en Investigación Química y Química Industrial en Química de la promoción 2020-2021. 8 tramos de complementos Autonómicos de la ACSUG Evaluación DOCENTIA (2003-2010): MUY FAVORABLE
4.- ACTIVIDAD PROFESIONAL / ACTIVIDADE PROFESIONAL (máximo diez líneas / máximo dez liñas)

5.- EXPERIENCIA EN GESTIÓN Y ADMINISTRACIÓN EDUCATIVA, CIENTÍFICA O TECNOLÓGICA / EXPERIENCIA EN XESTIÓN E ADMINISTRACIÓN EDUCATIVA, CIENTÍFICA OU TECNOLÓXICA.

Desempeño de cargos unipersonales de responsabilidad en gestión universitaria recogidos en los estatutos de las universidades o que hayan sido asimilados, o en organismos públicos de investigación durante al menos un año (los tres más relevantes):

Desenvolvemento de cargos unipersoais de responsabilidade en xestión universitaria recollidos nos estatutos das universidades ou que teñan sido asimilados, ou en organismos públicos de investigación durante polo menos un ano (os tres máis relevantes):

Directora del departamento de Química Física de la Universidad de Vigo desde Septiembre de 2006 hasta la Septiembre de 2012.

Desempeño de puestos en el entorno educativo, científico o tecnológico dentro de la administración general del Estado o de las comunidades autónomas durante al menos un año (los dos más relevantes):

Desenvolvemento de postos na contorna educativa, científica ou tecnolóxica dentro da administración xeral do Estado ou das comunidades autónomas durante polo menos un ano (os tres máis relevantes):

Otros méritos (máximo cinco líneas):

Outros méritos (máximo cinco liñas):

1. Miembro electo por el sector de Personal Docente e Investigador del Claustro Universitario de la Universidade de Vigo, desde 1998 hasta 2010.
2. Miembro de la Comisión permanente del Departamento de Química Física la Facultad de Química de la Universidade de Vigo desde el curso 2007-08 hasta la actualidad.

Fecha del CVA

14/03/2021

Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre y Apellidos	Francisco Jesús Rey Losada		
DNI	32626115V	Edad	61
Núm. identificación del investigador	Researcher ID		
	Scopus Author ID		
	* Código ORCID	0000-0001-7666-7061	

* Obligatorio

A.1. Situación profesional actual

Organismo	Universidade de Vigo		
Dpto. / Centro			
Dirección	Vigo		
Teléfono	645047388	Correo electrónico	frej@uvigo.es
Categoría profesional	TITULAR DE UNIVERSIDAD	Fecha inicio	1992
Palabras clave	Electrodos; Mecanismos de reacción; Reacciones en disolución; Disoluciones; Química industrial		

A.2. Formación académica (título, institución, fecha)

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Programa Oficial de Doctorado en Química Física	Universidad de Santiago de Compostela	1986
Lienciado en Quimica	Universidad de Santiago de Compostela	1982

A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica

+40 publicaciones

6 Quinquenios docentes

2 sexenios investigacion

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

+ 40 trabajos de investigacion

+ 80 Congresos

+ 150 Tesinas / Proyectos Fin de Carrera / Proyectos fin de Grado dirigidos

Referee (Journal of Chemical Engineering Data, Journal of chemical Education, Sociedad Iberoamericana de Física y Química Ambiental, Interciencia)

Director del Departamento de Química Física 09/2002/09/2003

Secretario del Departamento de Química Física de la Universidad de Vigo

Editor Asociado de Mediterranean Journal of Chemistry

Evaluador de la ANEP

Evaluador de la Agencia Andaluza del conocimiento - Direccion de evaluación y acreditación

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (ordenados por tipología)

C.1. Publicaciones

AC: Autor de correspondencia; (nº x / nº y): posición firma solicitante / total autores

- Artículo científico.** E Barrado; Al Herrero. (3/3). 2002. Characterization of acidic hums-like extracts obtained from leave grapa-vines and skingrapes Agrochimica. 46, pp.304-309.
- Artículo científico.** RA Bidegain; MA Kaemmerer; M Guiresse; M Hafidi; F Rey; P Morard; JC Revel. (5/7). 2000. Effects of humic substances from composted or chemically decomposed poplar sawdust on mineral nutrition of ryegrass Journal of Agricultural Science. 134, pp.259-267.

- 3 **Artículo científico.** (AC); AASC Machado. (1/2). 2000. INFLUENCE OF THE TEMPERATURE ON THE VISCOSITY MEASUREMENTS OF SOLUTIONS OF A SOIL FULVIC ACID Canadian Journal of Chemistry. 78, pp.1013-1018.
- 4 **Artículo científico.** Al Herrero; E Barrado; F. Rey; AASC Machado. (3/4). 2000. Influence of the ligand concentration and pH on the complexation of Cu(II) by a soil fulvic acid analisis. 28, pp.127-131.
- 5 **Artículo científico.** E Calle; J Casado; F Rey. (3/3). 1999. Concentration and pH influences on the Fe(II)-Fulvic acid dissociation kinetics International Journal of chemical kinetics. 30, pp.63-67.
- 6 **Artículo científico.** O Iglesias-Fernandez; P Facal; M González-González; (AC). (4/4). 1999. Conductimetric analysis of the interaction of Cu(II) ions and an humic-like natural polyelectrolyte (Laurel, Laurus Nobilis) mixture Analytica chimica Acta. 401, pp.251-255.
- 7 **Artículo científico.** M Kaemmerer; M Guirese; JC Revel; P Koetz; F Rey. (5/5). 1999. Conductimetric behaviour of humic acids with Cu(II) ions Analisis. 401, pp.421-423.
- 8 **Artículo científico.** E Barrado; E Villanueva; R Pardo; F Rey. (4/4). 1999. Determination of the acidity and metallic-ion complexation constants of laurel (Laurus Nobilis) extracts by differential pulse anodic stripping voltammetry (DPASV) Anales de Química - International Edition. RSEQ. 94, pp.31-35.
- 9 **Artículo científico.** JL Carballeira; JM Antelo; F Arce; F Rey. (4/4). 1999. Modelling the effects of ionic strength on ionization parameters for a soil fulvic acid at low concentration Analytica Chimica Acta. 401, pp.243-249.
- 10 **Artículo científico.** JCGE Silva; AASC Machado; MA Ferreira; F Rey. (4/4). 1998. Method for the differentiation of leaf litter extracts and study of their interaction with Cu(II) by molecular fluorescence Canadian Journal of chemistry. 76, pp.1197-1209.
- 11 **Artículo científico.** JCGE Silva; AASC Machado; MA Ferreira. (4/4). 1998. Study of the acid-base properties of leaf litter extracts Fresenius Journal of analytical Chemistry. 361, pp.479-486.
- 12 **Artículo científico.** MTSD Vasconcelos; AASC Machado; (AC). (3/3). 1997. Effect of the ligand concentration on the complexation of Cu(II) by a soil fulvic acid Anales de Química - International Edition. RSEQ. 92, pp.243-248.
- 13 **Artículo científico.** (AC); M Pérez-Asenjo; AASC Machado; P Facal; MA Ferreira. (1/1). 1997. Influence of small alcohol concentrations on the conductimetric behaviour of a natural polyelectrolyte (Laurel, Laurus Nobilis) Journal of Electroanalytical Chemistry. 431, pp.77-79.
- 14 **Artículo científico.** JCGE Silva; AASC Machado; MA Ramos; F Arce; F Rey. (5/5). 1997. Variation of the stability of complexes of Al(III) with a fulvic acid extracted from a humic cambisol soil in the pH range three to five Environmental Toxicology and Chemistry. 16, pp.1845-1850.
- 15 **Artículo científico.** JCGE Silva; MA Ferreira; AASC Machado; F Rey. (4/4). 1996. Classification of binding sites for Al(III) in fulvic acids extracted from leaf litters and soils by synchronous fluorescence spectroscopy and multidimensional chemometric analysis Analytica chimica Acta. Elsevier. 333, pp.71-82.
- 16 **Artículo científico.** (AC); MA Ferreira; P Facal; AASC Machado. (1/4). 1996. Effect of the concentration, pH and ionic strength on the viscosity of solutions of a soil fulvic acid Canadian Journal of chemistry. 74, pp.295-299.
- 17 **Artículo científico.** JCGE Silva; AASC Machado; F Arce; MA Ramos; F Rey. (5/5). 1996. Quantitative study of Be(II) complexation by soil fulvic acids by molecular fluorescence spectroscopy Environmental Science and Technology. 30, pp.3155-3160.
- 18 **Artículo científico.** F Rey; AASC Machado; F Arce; MA Ferreira; ana Toja. (/5). 1995. Influence of the concentration on the conductimetric properties of a fulvic acid system Talanta. Elsevier. 304, pp.375-379.
- 19 **Artículo científico.** E Barrado; MH Vela; R Pardo. (4/4). 1995. Ionization and metallic-ion complexation constants of Eucalyptus (Eucalyptus Globulus) and Oak (Quercus Robur) extracts Communications in soil science and plant analysis. 26, pp.2067-2078.
- 20 **Artículo científico.** A Arevalo; F Rey; MC Arevalo. (2/3). 1991. Contribution to experimental calorimetry School Science Review. 71, pp.82-92.

- 21 **Artículo científico.** (AC); JM Antelo; F Arce; FJ Penedo. (1/4). 1990. Equilibrium constants of metal-aminoacide complexes Polyhedron. Elsevier. 9, pp.665-668.
- 22 **Artículo científico.** F Rey; a Varela; JM Antelo; F Arce. (1/4). 1989. Influence of the ionic strength on the ionization of aminoacides J. chemical Engineering Data. ACS. 34, pp.35-37.
- 23 **Artículo científico.** MTSD Vasconcelos; AASC Machado; (AC). (3/3). 1988. Effect of the temperature on the response characteristics of "all solid state" ISEs based on mercury salts applied to electrically conductive supports Portugaliae Electrochimica Acta. SPE. 6, pp.167-182.
- 24 **Artículo científico.** JM Antelo; F. Arce; (AC). (3/4). 1987. Ligand complexes of Ni(II) with alcoholamines Polyhedron. Elsevier. 6, pp.1279-1282.
- 25 **Artículo científico.** (AC); JM Antelo; F Arce. (1/4). 1987. Mechanism of the reduction of Ni(II)-alcoholamine complexes on the dropping mercury electrode. Portugaliae Electrochimica Acta. SPE. 5, pp.125-134.
- 26 **Artículo científico.** F Arce; F Arce; (AC); M Sastre. (3/5). 1986. Estudio potenciométrico de la protonación de alco-hol-aminas en disolución acuosa Anales de Química. 82, pp.301-303.
- 27 **Artículo científico.** F Rey; F Arce; ; M Sastre; Jaun Antelo. 1985. A polarographic study of 2,2'-dithiodipiridine. The me-cha-nism of the electrode process Electrochimica Acta. Elsevier. 30, pp.927-930.
- 28 **Artículo científico.** JM Antelo; F Arce; (AC). (3/4). Polarographic studies of mixed complexes of Cd(II) with mo-noethanolamine and OH in water-methanol media Bulletin societie chimie Francaise. pp.435-437.
- 29 **Artículo científico.** A Arevalo; F Rey; MC Arevalo. (2/3). Contribution to experimental calorimetry School Science Review. Association for Science Education (ASE). 71, pp.88-92.
- 30 **Artículo científico.** (AC); F Rey; E Varela. (1/3). La corrosión del aluminio como reacción base para la enseñanza de la cinética química experimental Anuario Latinoamericano de Educacion Química. 14.
- 31 **Artículo de divulgación.** E Barrado; R Pardo. (3/3). 1992. Especiación: un problema químico Química e Industria. ANQUE. 4, pp.66-71.
- 32 **Capítulo de libro.** (AC); AASC Machado. (1/2). 1999. Conductimetric studies of natural (humic and humic-like) substances Recent Research Developments in Electroanalytical Chemistry. Transworld Research Network. 1/1999, pp.165-178.
- 33 **Capítulo de libro.** (1/4). Temperature influence on the conductimetric behaviour of solutions of acidic hunic-like natural polyelectrolyte obtained from eucalyptus Trends in electrochemistry and corrosion at the begining of the 21st century. Professor J.M. Costa. UBA. pp.549.
- 34 **Reseña.** (AC). (1/1). 2013. Review of Physical Chemistry: A Modern Introduction, 2nd Edition Journal of chemical education. 90, pp.1583-1584.
- 35 **Reseña.** (AC). (1/1). 2012. Review of Chemistry for Engineering Students, 2nd Edition Journal of chemical Education. 89, pp.1100-1100.
- 36 **Reseña.** (AC). (1/1). 2011. Book Review of Physical Chemistry, 3rd Edition Journal of chemical Education. 88, pp.21-21.

C.2. Proyectos

C.3. Contratos

C.4. Patentes

AVISO IMPORTANTE – El Curriculum Vitae no podrá exceder de 4 páginas. Para rellenar correctamente este documento, lea detenidamente las instrucciones disponibles en la web de la convocatoria.

IMPORTANT – The Curriculum Vitae cannot exceed 4 pages. Instructions to fill this document are available in the website.

Fecha del CVA 04/12/2023

Part A. DATOS PERSONALES

Nombre	Marcos		
Apellidos	Mandado Alonso		
Sexo (*)	Masculino	Fecha de nacimiento	07/03/1975
DNI, NIE, pasaporte	36112908X		
Dirección email	mandado@uvigo.es	URL Web	MARCOS MANDADO ALONSO R&D&i FINDER (uvigo.gal)
Open Researcher and Contributor ID (ORCID) (*)	0000-0001-9688-2658		

* datos obligatorios

A.1. Situación profesional actual

Puesto	Professor		
Fecha inicio	29/12/2011		
Organismo/ Institución	University of Vigo		
Departamento/ Centro	Dept. Physical Chemistry/Faculty of Chemistry		
País	España	Teléfono	986813809
Palabras clave	Química Computacional, Química Cuántica, Química Física		

A.2. Situación profesional anterior (incluye interrupciones en la carrera investigadora, de acuerdo con el Art. 14. b) de la convocatoria, indicar meses totales)

Periodo	Puesto/ Institución/ País / Motivo interrupción
---------	---

(Incorporar todas las filas que sean necesarias)

A.3. Formación Académica

Grado/Master/Tesis	Universidad/País	Año
Licenciado en Química	Universidad de Vigo	1999
Doctor en Química	Universidad de Vigo	2004

(Incorporar todas las filas que sean necesarias)

Parte B. RESUMEN DEL CV (máx. 5000 caracteres, incluyendo espacios): **MUY IMPORTANTE:** se ha modificado el contenido de este apartado para progresar en la adecuación a los principios DORA. Lea atentamente las "Instrucciones para cumplimentar el CVA"

Mi actividad investigadora en los últimos diez años se ha centrado tanto en el desarrollo de nuevas metodologías dentro del campo de la Química Cuántica como en aplicaciones específicas de la Química Computacional. He desarrollado mi investigación en diferentes temas; como las interacciones intermoleculares no covalentes, reactividad y estabilidad de compuestos orgánicos aromáticos, propiedades ópticas y SERS o conductancia eléctrica en cadenas de hidrocarburos aromáticos.

A lo largo de mi carrera investigadora he colaborado en catorce proyectos de investigación diferentes, procedentes de convocatorias regionales, nacionales o internacionales, tres de ellos como investigador principal. Soy autor o coautor de más de 90 artículos de investigación publicados en revistas internacionales, todos ellos indexados por el JCR. La mayoría de estas

revistas están o estuvieron posicionadas dentro del primer cuartil de su categoría en el momento en el que se publicaron los artículos, y diez de estos artículos fueron publicados en revistas incluidas en el primer decil. Además de artículos de investigación, soy coautor de siete capítulos de libros y un libro completo, publicados por diversas editoriales de prestigio como Taylor & Francis o Wiley & Sons. En la actualidad mi índice H es 25.

También he colaborado en el desarrollo de software específico para el análisis de enlaces intramoleculares e intermoleculares, propiedades de respuesta eléctrica e índices de reactividad. Cuatro de estas utilidades de software se incluyeron recientemente en el Registro de Propiedad Intelectual y se añadieron en repositorios públicos, de modo que en estos momentos son accesibles para la comunidad científica.

En cuanto a colaboraciones con empresas, he trabajado activamente con el departamento de I+D de TimacAgro España, empresa filial del Grupo Rollier, especializada en el desarrollo de productos para suelos, nutrición vegetal y animal. He publicado cuatro artículos en revistas especializadas de nutrición vegetal y química verde durante los últimos diez años en colaboración con miembros de su departamento de I+D. El tema de estas publicaciones fue la caracterización de complejos de fosfato y sulfato cálcico en presencia de sustancias orgánicas (ácidos húmicos), que están presentes en la familia de fertilizantes TOP-PHOS desarrollados y comercializados por TimacAgro. Los resultados presentados en nuestro trabajo colaborativo contribuyeron a la obtención de la patente europea para la familia de fertilizantes TOP-PHOS (EP2521703).

En cuanto a la capacidad formativa, cabe destacar la dirección de cuatro tesis doctorales en los últimos diez años, defendidas en febrero de 2012, diciembre de 2014, diciembre de 2017 y febrero de 2021. Tres de estas tesis recibieron el premio extraordinario en Ciencias, debido al número y calidad de los artículos publicados. Actualmente estoy dirigiendo otras dos tesis doctorales, una de ellas será defendida en los próximos días. También he dirigido cinco tesis de master. Prueba de que la formación obtenida bajo mi supervisión ha sido valiosa es que todos mis estudiantes de doctorado continúan su carrera investigadora en la universidad o en el sector privado.

Soy revisor habitual de artículos de investigación para revistas científicas de primer nivel, como Nature Chemistry, ACS Nano, Chemical Reviews y Journal of Chemical Theory and Computation.

He sido recientemente co-chair del congreso ESPA2022, el congreso de Química Teórica y Computacional más importante de España, que atrae también a numerosos investigadores de renombre internacional.

Part C. LISTADO DE APORTACIONES MÁS RELEVANTES (últimos 10 años)- Pueden incluir publicaciones, datos, software, contratos o productos industriales, desarrollos clínicos, publicaciones en conferencias, etc. Si estas aportaciones tienen DOI, por favor inclúyalo.

C.1. Publicaciones más importantes en libros y revistas con “peer review” y conferencias (ver instrucciones).

-N. Otero, S. Fias, S. Radenkovic, P. Bultinck, A. M. Graña, M. Mandado, “How does aromaticity rule the thermodynamic stability of hydroporphyrins?”, Chemistry-A European Journal, 17, 3274-3286, 2011

-M. Mandado, J. M. Hermida-Ramón, “Electron density based partitioning scheme of interaction energies”, Journal of Chemical Theory and Computation, 7, 633-641, 2011

-N. Otero, M. Mandado, “Chemical reactivity in the framework of pair density functional theories”, Journal of Computational Chemistry, 33, 1240-1251, 2012

-N. Ramos-Berdullas, M. Mandado, “Electronic properties of p-xylylene and p-phenylene chains subjected to finite bias voltages: A new highly conducting oligophenyl structure”, Chemistry-A European Journal, 9, 3646-3654, 2013

-R. Baigorri, O. Urrutia, J. Erro, M. Mandado, I. Pérez-Juste, J. M. García-Mina, “Structural characterization of anion-Ca-humate complexes in phosphate-based fertilizers by the complementary use of ³¹P NMR, computational chemistry and traditional analysis”, CHEMSUSCHEM, 6, 1245-1251, 2013

-N. Ramos-Berdullas, I. Pérez-Juste, C. Van Alsenoy, M. Mandado, “Theoretical study of the adsorption of aromatic units on carbon allotropes including explicit (empirical) DFT dispersion

corrections and implicitly dispersion-corrected functionals: The pyridine case”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17, 575-587, 2015.

-S. Gil-Guerrero, A. Peña-Gallego, N. Ramos-Berdullas, A. Martín-Pendás, M. Mandado, “Assesing the reversed exponential decay of the electrical conductance in molecular wires: The undeniable effect of static electron correlation”, *Nano Letters*, 19, 7394-7399, 2019.

-S. Gil-Guerrero, M. Melle-Franco, A. Peña-Gallego, M. Mandado, “Clar Goblet and Aromaticity Driven Multiradical Nanographenes”, *Chemistry-A European Journal*, 26, 16138-16143, 2020.

-G. Cardenas, A. Pérez-Bárcenas, M. Mandado, J. J. Nogueira, “Characterization of cisplatin/membrane interactions by QM/MM energy decomposition analysis”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 23, 20533-20540, 2021.

-A. Pérez-Bárcenas, G. Cardenas, J. J. Nogueira, M. Mandado, “Effect of the QM Size, Basis Set, and Polarization on QM/MM Interaction Energy Decomposition Analysis”, *J. Chem. Info. Model.*, doi.org/10.1021/acs.jcim.2c01184, 2023.

C.2. Congresos, indicando la modalidad de su participación (conferencia invitada, presentación oral, póster)

Título: Predicting electron transport in molecular electronic devices from electron deformation orbitals

Tipo de contribución: Presentation oral Autores: M. Mandado

Congreso, fechas y lugar: XVI Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics, from 21/09/2022 to 23/09/2022, Malaga (España)

Título: Detecting plasmons at molecular scale by means of detachment/attachment electron density analysis

Tipo de contribución: Presentation oral Autores: M. Mandado

Congreso, fechas y lugar: CURRENT TOPICS IN THEORETICAL CHEMISTRY (CTTC) – QUITO2019, from 01/07/2019 to 05/07/2019, Quito (Ecuador)

Título: Analysis of electrical and optical properties using electron deformation functions

Tipo de contribución: Conferencia invitada Autores: M. Mandado, N. Otero, S. Gil-Guerrero

Congreso, fechas y lugar: Second European Symposium on Chemical Bonding, from 03/09/2018 to 07/09/2018, Oviedo (España)

Título: Design of highly conducting molecular wires assisted by aromaticity

Tipo de contribución: Conferencia invitada Autores: M. Mandado

Congreso, fechas y lugar: IC3TC2017: 2nd International Caparica Christmas Conference on Translational Chemistry, from 04/12/2017 to 07/12/2017, Lisboa (Portugal)

Título: Electron Transport Through Molecular Junctions

Tipo de contribución: Conferencia invitada Autores: M. Mandado

Congreso, fechas y lugar: IVIMACC: 1st International Vigo Meeting on Advanced Computational Chemistry, from 01/06/2017 to 02/06/2017, Vigo (España)

Título: Understanding surface enhanced Raman scattering using computational chemistry: An example using Graphene substrates

Tipo de contribución: Conferencia invitada Autores: M. Mandado

Congreso, fechas y lugar: APMAS2016: 6th International Advances in Applied Physics and Materials Science Congress & Exhibition, from 01/06/2016 to 03/06/2016, Estambul (Turquía)

Título: The role of bond resonance in the electron transport through polybenzenoid chains

Tipo de contribución: Conferencia invitada Autores: M. Mandado

Congreso, fechas y lugar: CHEMBOND2016: Chemical bonding in position space, from 27/11/2016 to 01/12/2016, Dresden (Alemania)

Título: Computational Chemistry Techniques for Detection of Biomolecules on Graphene Substrates Using SERS

Tipo de contribución: Conferencia invitada Autores: M. Mandado

Congreso, fechas y lugar: IC3TC2015: 1st International Caparica Christmas Conference on Translational Chemistry, from 07/12/2015 to 10/12/2015, Lisboa (Portugal)

Título: Reactivity Descriptors from Exchange-Correlation Densities

Tipo de contribución: Conferencia invitada Autores: M. Mandado, N. Otero
Congreso, fechas y lugar: IC3TC: Prague Workshop on Theoretical and Computational Chemistry, from 26/09/2011 to 29/09/2011, Praga (República Checa)

Título: Electron density based partitioning scheme of intermolecular interaction energies

Tipo de contribución: Presentation oral Authors: Marcos Mandado, J. M. Hermida Ramón
Congreso, fechas y lugar: ESPA 2010: Electronic Structure: Principles and Applications, from 29/06/2010 to 02/07/2010, Oviedo (España).

C.3. Proyectos o líneas de investigación en los que ha participado, indicando su contribución personal. En el caso de investigadores jóvenes, indicar líneas de investigación de las que hayan sido responsables.

Título: Efecto anómérico: reinterpretación con la teoría cuántica de átomos en moléculas y otros medios de análisis de la densidad electrónica Referencia: INCITE08PXIB314224PR

Entidad: Xunta de Galicia Afiliación: Universidad de Vigo
Desde: 01-01-2008 Hasta: 31-10-2011 Cantidad: 46.126,00 €.

Investigador principal: Ricardo A. Mosquera Castro

Título: Diseño de circuitos eléctricos unimoleculares Referencia: 10TMT314014PR

Entidad: Xunta de Galicia Afiliación: Universidad de Vigo
Desde: 15-12-2010 Hasta: 14-12-2013 Cantidad: 48.357,50 €.

Investigador principal: Marcos Mandado Alonso

Título: Espectroscopía Raman amplificada (SERS) sobre superficies de carbono

Referencia: CTQ2010-20229

Entidad: Ministerio de Ciencia e Innovación Afiliación: Universidad de Vigo
Desde: 01-01-2011 Hasta: 30-09-2014 Cantidad: 79.860,00 €.

Investigador principal: Marcos Mandado Alonso

Título: Axudas para a consolidación e estruturación de unidades de investigación competitivas do Sistema universitario de Galicia Referencia: GRC2015/17

Entidad: Xunta de Galicia Afiliación: Universidad de Vigo
Desde: 01-01-2015 Hasta: 31-12-2018 Cantidad: 200.000,00 €.

Investigador principal: Ricardo A. Mosquera Castro

Título: Axudas para a consolidación e estruturación de unidades de investigación competitivas do Sistema universitario de Galicia Referencia: ED431C 2019/24

Entidad: Xunta de Galicia Afiliación: Universidad de Vigo
Desde: 01-01-2019 Hasta: 31-12-2022 Cantidad: 190.000,00 €.

Investigador principal: Ana Graña Rodríguez

Título: Transferencia y valorización de NANOTecnologías a PYMEs innovadoras de la Eurorregión (early adopters) NANO EATERS Referencia: 0181_NANO EATERS_01_E

Entidad: INTERREG Afiliación: Universidad de Vigo
Desde: 01-04-2017 Hasta: 30-09-2021 Cantidad: 555.544,69 €.

Investigador principal: María Asunción Longo González

Título: BioEDA: Un software científico para el análisis de interacciones intermoleculares en sistemas biológicos (BioEDA)

Referencia: PID2022-138023NB-I00

Entidad: Ministerio de Ciencia e Innovación Afiliación: Universidad de Vigo
Desde: 01-09-2023 Hasta: 31-08-2026 Cantidad: 112.500,00 €.

Investigador principal: Marcos Mandado Alonso

C.4. Participación en actividades de transferencia de tecnología/conocimiento y explotación de resultados Incluye las patentes y otras actividades de propiedad industrial o intelectual (contratos, licencias, acuerdos, etc.) en los que haya colaborado. Indique: a) el orden de firma de autores; b) referencia; c) título; d) países prioritarios; e) fecha; f) entidad y empresas que explotan la patente o información similar, en su caso.

Título: EDA-NCI Energy Decomposition Analysis of Non-Covalent Interactions

Tipo de registro: Software científico Referencia: SC-137-2022



Autores: Marcos Mandado, Christian Van Alsenoy

Derechos de Explotación: University of Vigo Fecha: 28/12/2022

Título: FIOs-EDOs - A Program to Calculate Electron Transport and Electric Response Properties from Electron Deformation Orbitals

Tipo de registrato: Software científico Referencia: SC-138-2022

Autores: Marcos Mandado, Nicolás Otero, Nicolás Ramos, Sara Gil Guerrero

Derechos de explotación: University of Vigo Fecha: 28/12/2022

Título: FUKUI - A Program to Compute Fukui Indices and Atomic Overlap Matrices

Tipo de registrato: Software científico Referencia: SC-139-2022

Autores: Nicolás Otero, Ricardo A. Mosquera, Marcos Mandado

Derechos de explotación: University of Vigo Fecha: 28/12/2022

Título: NDELOC - A Program to Compute Multicenter Electron Delocalization Indices

Tipo de registro: Software científico Referencia: SC-140-2022

Autores: Marcos Mandado, Nicolás Otero

Derechos de explotación: University of Vigo Fecha: 28/12/2022

Parte A. DATOS PERSONALES

Fecha del CVA 16/02/2021

Nombre y apellidos	María de los Angeles Peña Gallego		
DNI/NIE/pasaporte	36124053T	Edad	46
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	6603572575	
	Código Orcid	0000-0002-6898-8305	

A.1. Situación profesional actual

Organismo	Universidad de Vigo		
Dpto./Centro	Departamento de Química Física		
Dirección	As Lagoas s/n		
Teléfono	647534362	correo electrónico	mpena@uvigo.es
Categoría profesional	Profesor titular de universidad	Fecha inicio	
Espec. cód. UNESCO	2210, 2307		
Palabras clave	Química Física, Química computacional		

A.2. Formación académica (título, institución, fecha)

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciatura en Química	Universidad de Santiago de Compostela	1997
Doctorado en Química	Universidad de Santiago de Compostela	2002

A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica (véanse instrucciones)

Tengo tres sexenios de investigación. Autora de más de 40 artículos que han recibido 563 citas totales, con un promedio en los últimos años de 34 citas/año. La mayor parte de estas publicaciones están en revistas del primer cuartil dentro de su correspondiente categoría.

El índice h, obtenido a partir de estas publicaciones es 14.

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM (máximo 3500 caracteres, incluyendo espacios en blanco)

Mi carrera investigadora comenzó el último año de mi licenciatura gracias a una beca de colaboración que disfruté en el departamento de Química Física de la Universidad de Santiago de Compostela. Durante ese curso realicé labores de investigación en el grupo de Química Teórica que culminaron en noviembre de 1997 con la presentación de mi tesina de licenciatura.

La tesis doctoral la realicé en ese mismo grupo en la Universidad de Santiago de Compostela bajo la dirección de los profesores Saulo A. Vázquez Rodríguez y Emilio Martínez Núñez. La temática desarrollada se centra en la dinámica de reacciones unimoleculares. Debe indicarse que durante ese tiempo estuve 15 meses en el grupo del profesor Varandas en la Universidad de Coimbra, grupo especializado en la construcción de superficies de energía potencial. Los resultados se mostraron en la tesis doctoral de título "Superficies de energía potencial y dinámica de reacciones unimoleculares" presentada el 24 de mayo de 2002 y obteniendo la máxima calificación (sobresaliente cum laude) y el premio extraordinario de tesis.

Durante los seis meses siguientes a la lectura de mi tesis realicé una estancia posdoctoral en la Universidad de Vigo bajo la dirección del profesor Jesús R. Flores encaminada a adentrarme en la dinámica de reacciones bimoleculares.

Desde noviembre de 2003 realicé labores investigadoras contratada como investigadora "Isidro Parga Pondal" en la Universidad de Santiago de Compostela en el grupo de investigación dirigido por el profesor Jesús Rodríguez Otero. Este grupo de química teórica y computacional está especializado en el estudio de reacciones pericíclicas y pseudopericíclicas. El programa "Isidro Parga Pondal" es un programa competitivo de la Xunta de Galicia para la contratación de doctores.

En junio de 2010, obtuve la plaza de profesora titular de universidad en la Universidad de Santiago de Compostela, después de un año como profesora contratada doctora. Desde septiembre de 2013 soy profesora titular en la Universidad de Vigo

Toda esta labor de investigación ha dado lugar a más de 50 artículos en revistas de prestigio

internacional en nuestro campo como "Nano Letters", "Chemical Communications", "Chemistry. A European Journal", "Journal of Organic Chemistry", "Journal of Physical Chemistry A" o "Journal of Chemical Physics".

La mayor parte de las investigaciones han sido financiadas a través de proyectos del Ministerio de Educación y Ciencia o de la Xunta de Galicia.

La investigación se ha desarrollado diferentes temáticas: desde el estudio de superficies de energía potencial y dinámica de reacciones unimoleculares y bimoleculares a estudios sobre aromaticidad, reacciones pericíclicas y formación de complejos con moléculas aromáticas. Esta diversificación se observa también en las revistas de prestigio internacional donde se han publicado los resultados: en mi etapa de tesis, revistas claramente de Química Física como "Journal of Physical Chemistry A" o "Journal of Chemical Physics" hasta revistas de interés más general en Química y en particular para la Química Orgánica y Sintética como "Journal of Organic Chemistry" o "Tetrahedron". Esta es una prueba de la multidisciplinaridad de mis investigaciones y de la aplicabilidad de la Química Computacional.

También he participado en la "Red Gallega de Bioinformática" y en la "Red de Ciencias y Materiales Moleculares".

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES *(ordenados por tipología)*

C.1. Publicaciones

Las últimas diez publicaciones son:

Distinct Helical Molecular Orbitals through Conformational Lock
Ozcelik, A., Aranda, D., Gil-Guerrero, S., Pereira-Cameselle, R., Alonso-Gómez, J.L.
Chemistry - A European Journal 2020, 26(72), pp. 17342–17349.

Clar Goblet and Aromaticity Driven Multiradical Nanographenes
Gil-Guerrero, S., Melle-Franco, M., Peña-Gallego, Á., Mandado, M.
Chemistry - A European Journal 2020, 26(68), pp. 16138–16143.

Unimolecular Electrical Rectification Understood through Electron Deformation Orbitals
Gil-Guerrero, S., Otero, N., Peña-Gallego, Á., Mandado, M.
Journal of Physical Chemistry C 2020, 124(33), pp. 17924–17931.

Design and synthesis of chiral spirobifluorenes
Ozcelik, A., Peña-Gallego, M.D.L.Á., Pereira-Cameselle, R., Alonso-Gómez, J.L.
Chirality 2020, 32(4), pp. 464–473.

Detecting Molecular Plasmons by Means of Electron Density Descriptors
Gil-Guerrero, S., Peña-Gallego, Á., Mandado, M.
Journal of Physical Chemistry C 2020, 124(2), pp. 1585–1593.

Assessing the Reversed Exponential Decay of the Electrical Conductance in Molecular Wires: The Undeniable Effect of Static Electron Correlation
Gil-Guerrero, Sara; Peña-Gallego, Ángeles; Ramos-Berdullas, Nicolás; Martín Pendás, Ángel; Mandado, Marcos
Nano Letters 2019 DOI: 10.1021/acs.nanolett.9b03063

Spirobifluorene Metallaaromatics
Arias-Coronado, Vanessa C.; Pereira-Cameselle, Raquel; Ozcelik, Ani; Talavera, María; Peña-Gallego, Angeles, Alonso-Gómez, Lorenzo
Chemistry, A European Journal 2019 DOI: 10.1002/chem.201903213

Chiroptical symmetry analysis: Exciton chirality-based formulae to understand the chiroptical responses of C_n and D_n symmetric systems
Castro-Fernández, Silvia; Peña-Gallego, Ángeles; Mosquera, Ricardo; Alonso-Gómez, J. Lorenzo
Molecules 2019 DOI: 10.3390/molecules24010141

NMR spectroscopy for assessing cocaine-functional monomer interactions when preparing molecularly imprinted polymers

Sánchez-González, Juan; Peña-Gallego, Ángeles; Sanmartín, Jesús; Bermejo, Ana; Bermejo-Barrera, Pilar; Moreda-Piñeiro, Antonio

Microchemical Journal **2019**, DOI 10.1016/j.microc.2019.03.088.

Metalloaromatic Biaryl Atropisomers

Talavera, María; Peña-Gallego, Angeles; Alonso-Gómez, J. Lorenzo; Bolaño, Sandra

Chem. Commun. **2018**, DOI 10.1039/C8CC06443A.

C.2. Proyectos

He participado activamente como investigadora en los siguientes proyectos durante los últimos 10 años:

TÍTULO DEL PROYECTO: QF3-GRC 2019 código ED431C 2019/24

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Ana María Graña Rodríguez

ENTIDAD FINANCIADORA: Xunta de Galicia

ENTIDADES PARTICIPANTES: Universidad de Vigo

DURACIÓN: 01/01/2019-03/11/2020

TÍTULO DEL PROYECTO: QF3-GRC 2015 código GRC2015/017

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Ricardo A. Mosquera Castro

ENTIDAD FINANCIADORA: Xunta de Galicia

ENTIDADES PARTICIPANTES: Universidad de Vigo

DURACIÓN: 16/06/2016-30/11/2018

TÍTULO DEL PROYECTO: Estudio computacional de la modulación catión-pi por medio del entorno.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Enrique M. Cabaleiro Lago

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia e Innovación

ENTIDADES PARTICIPANTES: Universidad de Santiago de Compostela

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 82120 Euros

DURACIÓN: 01/01/2010-31/12/2012.

REFERENCIA: INCITE09PXIB209103

TÍTULO DEL PROYECTO: Estudio teórico de la interacción intermolecular con hidrocarburos policíclicos aromáticos que poseen superficies curvas (Buckybowls),

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Jesús Rodríguez Otero

ENTIDAD FINANCIADORA: Xunta de Galicia.

ENTIDADES PARTICIPANTES: Universidad de Santiago de Compostela

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 81800 Euros

DURACIÓN: 13/07/2009-01/12/2012.

Fecha del CVA	08/12/2023
---------------	------------

Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre	Inmaculada		
Apellidos	Prieto Jiménez		
Sexo	Mujer	Fecha de Nacimiento	17/01/1970
DNI/NIE/Pasaporte	30791115A		
URL Web			
Dirección Email	iprieto@uvigo.gal		
Open Researcher and Contributor ID (ORCID)	0000-0002-8279-3774		

A.1. Situación profesional actual

Puesto	Profesora Titular del Departamento de Química Física		
Fecha inicio	2003		
Organismo / Institución	Universidade de Vigo		
Departamento / Centro	Physical Chemistry / Faculty of Chemistry		
País	España	Teléfono	(0034) 986813807
Palabras clave			

A.2. Situación profesional anterior (incluye interrupciones en la carrera investigadora - indicar meses totales, según texto convocatoria-)

Periodo	Puesto / Institución / País
2000 - 2003	Profesora Titular Dpto. Química Física (Interina) / Universidade de Vigo
1998 - 2000	Ayudante Doctora Dpto. Química Física (2ª Etapa) / Universidade de Vigo
1998 - 1998	Ayudante Doctora Dpto. Química Física (1ª Etapa) / Universidade de Vigo
1998 - 1998	Becaria Postdoctoral / Universidad de Córdoba
1994 - 1997	Becaria Predoctoral (FPI) / Ministerio de Educación y Ciencia

A.3. Formación académica

Grado/Master/Tesis	Universidad / País	Año
Doctorado en Química	Universidad de Córdoba	1997
Grado en Licenciatura en Química	Universidad de Córdoba	1994
Licenciatura en Química	Universidad de Córdoba	1993

Parte B. RESUMEN DEL CV

09/1988 al 06/1993: Licenciatura en Química en la Universidad de Córdoba

06/1993 al 06/1994: Grado de Licenciatura en Química en la Universidad de Córdoba

01/1994 a 12/1997: Beca predoctoral en el Departamento de Química Física de la Universidad de Córdoba

07/1997: Doctorado en Química

Tesis Doctoral: "Organización de porfirinas en la interfase aire-agua y en películas de Langmuir-Blodgett: Caracterización electroquímica y espectroscópica", bajo la supervisión del Prof. Luis Camacho Delgado y la Profa. María Teresa Martín Romero. Departamento de Química Física de la Universidad de Córdoba.

12-09/1995 y 12-09/1997: Estancias de investigación predoctorales en el grupo del Prof. Dietmar Möbius, en el Max Planck Institut für Biophysikalische Chemie, Göttingen, Alemania.

04/1998 al 11/2001: Profesora Ayudante de Química Física en la Universidad de Vigo (1ª y 2ª etapa).

08/1999 a 09/2000: Beca postdoctoral en el Departamento de Química y Bioquímica de la Universidad de Texas en Austin, bajo la supervisión del Prof. Allen J. Bard. El tema de la investigación fue el estudio de nuevas moléculas orgánicas para su análisis mediante electroquimioluminiscencia y dispositivos electroluminiscentes.

12/2001: Profesora Titular de Química Física de la Universidad de Vigo (interina).

07/2003 a la actualidad: Profesora Titular de Química Física de la Universidad de Vigo

06/2006-06/2010: Directora del Área de Adaptación al Espacio Europeo de Educación Superior (EEES)

07/20010-06/2014: Directora del Área de Docencia y Calidad

Desarrolla la actividad investigadora en el campo de la electroquímica y la química de superficies. El trabajo se ha centrado principalmente en el estudio electroquímico de compuestos en solución, y el análisis de la relación entre organización molecular y propiedades de sistemas supramoleculares.

Se han estudiado moléculas de diferente naturaleza, utilizando diversas técnicas y estrategias en la construcción de sistemas macromoleculares estables en las interfaces aire-agua y aire-sólido. En la interfase aire-agua se utilizaron técnicas de superficie y espectroscópicas (mediciones de presión superficial, espectroscopia de reflexión y microscopía de ángulo de Brewster (BAM)). Las películas transferidas a sustratos sólidos se estudiaron mediante espectroscopía UV-visible e IR (con luz polarizada y no polarizada) y BAM.

Asimismo, se estudió el comportamiento electroquímico de los sistemas moleculares depositados sobre electrodos sólidos (electrodos de carbono vítreo, oro, indio y óxido de estaño -ITO-) con el fin de determinar los cambios estructurales que experimenta la película superficial, y su comportamiento en presencia de moléculas de interés. También se utilizaron mediciones de voltamperometría cíclica, capacidad y espectroscopia.

Tras un tiempo trabajando en la dirección universitaria (2006-2014), actualmente es investigadora en QI5, grupo de investigación especializado en síntesis de compuestos inorgánicos, y perteneciente al Instituto de Investigación Sanitaria Galicia Sur.

Los estudios se centran especialmente en la caracterización y fabricación de estructuras metalorgánicas, cuyas propiedades pueden modularse en función de los iones metálicos y ligandos orgánicos coordinados, y muestran una gran aplicabilidad como sistemas de separación, liberación de fármacos, catálisis heterogénea y como sensores.

Sus conocimientos en electroquímica han permitido a Inmaculada Prieto trabajar satisfactoriamente en muy diversos proyectos en los que ha conseguido estudiar numerosos compuestos con diversidad estructural.

El trabajo ha dado lugar a la publicación de artículos en revistas internacionales y un capítulo de libro. En cuanto a la actividad formativa, ha dirigido una Tesis Doctoral y varias Tesis de Grado y Máster.

Parte C. LISTADO DE APORTACIONES MÁS RELEVANTES

C.1. Publicaciones más importantes en libros y revistas con “peer review” y conferencias

AC: Autor de correspondencia; (nº x / nº y): posición firma solicitante / total autores. Si aplica, indique el número de citaciones

- 1 **Artículo científico.** Gómez-Paz, O.; Carballo, R.; Lago, A. B.; Prieto, I.; Vázquez-López, E. M. 2023. From Cu(I) and Cu(I)–Cu(II) mixed-valence clusters to 2D Cu(II) and Cu(I) coordination polymers supported by a flexible bis-tetrazole organosulfur ligand. Dalton Trans. 52, pp.10975-10986.
- 2 **Artículo científico.** Talavera, M.; Pereira-Cameselle, R.; Peña-Gallego, I.; Vázquez-Carballo, I.; Prieto, I.; Alonso-Gómez, J.L.; Bolaño, S. 2023. “Optical and electrochemical properties of spirobifluorene iridanaphthalene complexes”. Dalton Trans. 52, pp.487-493.

- 3 Artículo científico.** Martínez-Estévez, M.; García-Fontán, S.; Argibay-Otero, S.; Prieto, I.; Vázquez-López, E.M.2022. "Synthesis, Characterization, and Cytotoxicity Studies of N-(4-Methoxybenzyl) Thiosemicarbazone Derivatives and Their Ruthenium(II)-p-cymene Complexes".Molecules. 27-22, pp.7976.
- 4 Artículo científico.** Carballo, R.; Castiñeiras, A.; Covelo, B.; Lago, A.B; Vázquez-López, E.M; Gómez-Paz, O.; Balboa, S.; Prieto, I.2018. "Chiral and achiral 1D copper (II) coordination polymers based on glycolato and chelating aromatic diamine ligands". CrystEngComm.20, pp.2455-2464.
- 5 Artículo científico.** Barbazán, P.; Carballo, R.; Prieto, I.; Turnes, M.; Vázquez-López, E. M.2009. "Synthesis and characterization of several rhenium (I) complexes of 2-acetylpyridine and ferrocenyl carbaldehyde derivatives of 2-hydroxybenzoic acid hydrazide". Journal of Organometallic Chemistry 2009, 694, 3102-3111.DOI: 10.1016/j.jorganchem.2009.05.032. 694, pp.3102-3111.
- 6 Artículo científico.** Nieto-Suarez, Marina; Vila-Romeu, Nuria; Prieto, Inmaculada.2008. "Behaviour of insulin Langmuir monolayers at the air-water interface under various conditions". Thin Solid Films. 516, pp.8873-8879.
- 7 Artículo científico.** Nieto-Suarez, Marina; Vila-Romeu, Nuria; Prieto, Inmaculada.2005. "Influence of different factors on the phase transitions of non-ionic Langmuir monolayers". Applied Surface Science. 246-4, pp.387-391.
- 8 Artículo científico.** Nieto-Suárez, M.; Vila-Romeu, N.; Dynarowicz-Latka, P.; Prieto, I.2004. "The influence of inorganic ions on the properties of nonionic Langmuir monolayers.".Colloids and Surfaces A. 249-1-3, pp.11-14.
- 9 Artículo científico.** Pedrosa, J. M.; Pérez, M.; Prieto, I.; Martín-Romero, M. T.; Möbius, D.; Camacho, L.2002. "Aggregate formation in mixed monolayers at the air-water interface of metal-complex tetracationic porphyrins attached to a phospholipid matrix".Phys. Chem. Chem. Phys.4, pp.2329-2336.
- 10 Artículo científico.** Vila-Romeu, N; Nieto-Suárez, M.; Dynarowicz-Latka, P.; Prieto, I.2002. "Mixed Langmuir monolayers of gramicidin A and ethyl palmitate: pressure-area isotherms and Brewster angle microscopy". J. Phys. Chem. B. 106, pp.9820-9824.
- 11 Artículo científico.** Pedrosa, J. M.; Prieto, I.; Martín-Romero, M. T.; Camacho, L.; Möbius, D.2002. "Molecular organization and electrochemical reduction of a Ni(II)Porphyrin complex in LB films". Electrochem. Comm.4, pp.639-643.

C.2. Congresos

- 1** M. Martínez; S. Argibay; I. Prieto; S. García-Fontán; E. M. Vázquez-López. "Actividad antitumoral de areno complejos de Ru(II) con ligandos tiosemicarbazona". XII Reunión Científica de Bioinorgánica. Asociación Española de Bioinorgánica (AEBIN). 2022. España.
- 2** A. Davila; S. Argibay; I. Prieto; S. García-Fontán; E. M. Vázquez-López. "Areño complejos de Ru(II) con ligandos auxiliares diimina como potenciales agentes antitumorales". XII Reunión Científica de Bioinorgánica. Asociación Española de Bioinorgánica (AEBIN). 2022. España.
- 3** "Estudio electroquímico de ligandos y complejos de salicilaldehído y 2,3-dihidroxibenzaldehído y películas autoensambladas". XXXVI Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química. Universidade de Vigo. 2015. España.
- 4** G. Pereiras-Gabián; I. Prieto; E. M. Vázquez-López. "Estudio electroquímico de complejos de renio con tiosemicarbazonas sobre electrodo de platino". VII Iberic Meeting of Electrochemistry. Universidad de Córdoba. 2004. España. Congreso.

C.3. Proyectos o líneas de investigación

- 1 Proyecto.** "Estrategias basadas en complejos para el diagnóstico y tratamiento del cancer de pulmón de célula no pequeña" (PID2019-110218RB-I00). Ministerio de Ciencia e Innovación. Ezequiel M. Vázquez López. (Universidade de Vigo). 06/2020-06/2023. 96.800 €.

- 2 **Proyecto.** “Radiofármacos basado en complejos metálicos para la obtención de imágenes del receptor de estrógeno y acumulaciones de β -amiloide” (RAIREBA). Ministerio de Economía y Competitividad (CTQ2015-70901-R). Ezequiel M. Vázquez López. (Universidade de Vigo). 01/2016-09/2019. 89.540 €.
- 3 **Proyecto.** “Complexos Metálicos en Radiodiagnosis” COMERA (CTQ2010-19386/BQU). Ministerio de Ciencia e Innovación. Ezequiel M. Vázquez López. (Universidade de Vigo y Freie Universitat Berlin). 01/01/2011-31/12/2014. 89.873,42 €.
- 4 **Proyecto.** “Polímeros Metalosupramoleculares Dinámicos” POMEDIN (10TMT314002PR). CENTRO DE ACUSTICA APLICADA Y EVALUACION NO DESTRUCTIVA; Xunta de Galicia, Dirección Xeral de I+D+i. Rosa Carballo Rial. (Universidade de Vigo). 08/2011-09/2013. 56.024,55 €.
- 5 **Proyecto.** “Caracterización químico-física de sistemas supramoleculares organizados para el diseño de modelos de sensores destinados a la detección de pesticidas”. Ministerio de Ciencia y Tecnología; Xunta de Galicia.. Nuria Vila Romeu. (Universidade de Vigo). 15/11/2003-14/11/2006.
- 6 **Proyecto.** “Caracterización químico-física de sistemas supramoleculares organizados para el diseño de modelos de sensores destinados a la detección de pesticidas”.. Xunta de Galicia. (Universidade de Vigo). 14/07/2003-13/07/2006.
- 7 **Proyecto.** “Diseño y caracterización químico-física de sistemas supramoleculares organizados como modelos de sensores para la detección de pesticidas”. Universidade de Vigo. Nuria Vila Romeu. (Universidade de Vigo). 07/2003-07/2004.
- 8 **Proyecto.** “Diseño y caracterización químico-física de sistemas supramoleculares organizados como modelos de sensores”.. Ministerio de Ciencia y Tecnología.. Nuria Vila Romeu. (Universidade de Vigo). 10/2002-10/2003.

Fecha del CVA	01/12/2023
---------------	------------

Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre	Carlos Daniel		
Apellidos	Bravo Díaz		
Sexo	No Contesta	Fecha de Nacimiento	
DNI/NIE/Pasaporte	32630557C		
URL Web			
Dirección Email	cbravo@uvigo.es		
Open Researcher and Contributor ID (ORCID)	0000-0002-9468-0881		

A.1. Situación profesional actual

Puesto	Catedrático de Universidad		
Fecha inicio	2009		
Organismo / Institución	Universidade de Vigo		
Departamento / Centro	Química Física / Facultad de Química		
País		Teléfono	
Palabras clave	230700 - Química física		

A.2. Situación profesional anterior (incluye interrupciones en la carrera investigadora - indicar meses totales, según texto convocatoria-)

Periodo	Puesto / Institución / País
1996 - 2009	Profesor Titular / Universidade de Vigo
1991 - 1995	Profesor Ayudante / Universidade de Vigo
1991 - 1993	Becario Postdoctoral / MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA
1986 - 1991	Becario Predoctoral / Conselleria de Educación, Xunta de Galicia

A.3. Formación académica

Grado/Master/Tesis	Universidad / País	Año
Programa Oficial de Doctorado en Química Física	Universidad de Santiago de Compostela	1991
Licenciado en Química	Universidad de Santiago de Compostela	1986

Parte B. RESUMEN DEL CV Catedrático de Química Física de la Universidad de Vigo, Research ID L-7582-2014, Research ID L-7582-2014 Honorary Professor, Marie Curie Skłodowska University, Lublin, Poland Más de 130 artículos publicados, incluyendo reviews, "feature articles" y capítulos de libros. h-index: 29 (Scopus, Web of Science), 38 (Research gate), 9 tesis doctorales dirigidas, 15 tesis de máster o equivalentes.

Palabras clave: mecanismos cinéticos, modelado cinético, cinética interfacial, asociación coloidal, emulsiones antioxidantes,

Nuestro grupo estudia, por una parte, los efectos que la agregación de surfactantes y sistemas macromoleculares tienen sobre la reactividad química y también, utiliza este conocimiento para obtener información sobre la estructura de los agregados. Para ello usamos distintas técnicas espectroscópicas (Visible /UV, Fluorescencia, FTIR, RMN 1H y 13C), cromatográficas (HPLC con detección, por fluorescencia, electroquímica o visible-UV) y electroquímicas (DPP, CV, etc.). Nuestra actividad científica puede incluirse en la interpretación y desarrollo de métodos de control de la reactividad química de sistemas coloidales y macromoleculares en procesos biotecnológicos útiles en la industria alimentaria.

En los últimos años hemos utilizado métodos típicos de la química física orgánica para resolver problemas del campo de la tecnología alimentaria. Se han sintetizado detectores químicos para determinar la distribución de antioxidantes utilizados en emulsiones alimentarias para minimizar la oxidación lipídica. A modo de ejemplo se ha demostrado que: 1) la reacción entre antioxidantes y radicales peroxilo tiene lugar en la región interfacial de los sistemas emulsionados, 2) el tamaño de las gotas de la emulsión no afecta a la eficacia antioxidante, y 3) se ha analizado el efecto de varios parámetros (acidez, temperatura, HLB de antioxidante y emulsionador, etc.) sobre la distribución de antioxidantes en emulsiones alimentarias para optimizar el uso de conservantes.

Parte C. LISTADO DE APORTACIONES MÁS RELEVANTES

C.1. Publicaciones más importantes en libros y revistas con “peer review” y conferencias

AC: Autor de correspondencia; (nº x / nº y): posición firma solicitante / total autores. Si aplica, indique el número de citaciones

1 Artículo científico. Tamara; Sonia; Carlos. 2023. Efficiency of α -Tocopherol in Inhibiting Lipid Oxidation in Emulsions: Effects of Surfactant Charge and of Surfactant Concentration. Antioxidants. MDPI. 12, pp.1158.

2 Artículo científico. Tamara; Sonia; José M.; Ana; Carlos. 2023. Molecular Design of Interfaces of Model Food Nanoemulsions: A Combines Experimental and Theoretical Approach. ANTIOXIDANTS. MDPI. 12, pp. 484

3 Artículo científico. 2022. Advances in the control of lipid peroxidation in oil-in-water emulsions: kinetic approaches. Critical Reviews in Food Science and Nutrition. Taylor @ Francis. pp.1-33.

4 Artículo científico. Sonia Losada-Barreiro; Zerrin Sezgin-Bayindir; Fátima Paiva-Martins; Carlos Bravo-Díaz. 2022. Biochemistry of Antioxidants: Mechanisms and Pharmaceutical Applications. Biomedicines.

5 Artículo científico. Marlene Costa; Antonio Vicente; Sonia Losada-Barreiro; Carlos Bravo-Díaz; Fátima Paiva-Martins. 2022. Unexpected Antioxidant Efficiency of Chlorogenic Acid Phenolipids in Fish Oil-in-Water Nanoemulsions: An Example of How Relatively Low Interfacial Concentrations Can Make Antioxidants to Be Inefficient. Molecules. MDPI. 27-3, pp.861.

6 Artículo científico. Carlos; Sonia; Fátima; Marlene. 2021. Effects of Surfactant Volume Fraction on the Antioxidant Efficiency and on The Interfacial Concentrations of Octyl and Tetradecyl p-Coumarates in Corn Oil-in-Water Emulsions. Molecules. 26-19, pp.6058.

7 Artículo científico. Marlene; Sonia; Julia; Luis; Carlos; Fátima. 2021. Effects of the reactive moiety of phenolipids on their antioxidant efficiency in model emulsified systems. Foods. MDPI. 10-5.

- 8 **Artículo científico.** Marlene; Josefa; Sonia; Fátima; Carolina; Carlos. 2021. Interfacial kinetics in olive oil-in-water nanoemulsions: Relationships between rates of initiation of lipid peroxidation, induction times and effective interfacial antioxidant concentrations. *Journal of Colloid and Interface Science*. 604, pp.248-259.
- 9 **Artículo científico.** Marlene; Fátima; Sonia; Carlos. 2021. Modeling Chemical Reactivity at the Interfaces of Emulsions: Effects of Partitioning and Temperature. *Molecules*. MDPI. 26-15, pp.4703.
- 10 **Artículo científico.** Zerrin; Sonia; Carlos; Matej; Juliana; Luciano. 2021. Nanotechnology-based drug delivery to improve the therapeutic benefits of NRF2 modulators in cancer therapy. *Antioxidants*. 10-5, pp.685.
- 11 **Artículo científico.** Marlene; Sonia; Fátima; Carlos. 2021. Polyphenolic antioxidants in lipid emulsions: partitioning effects and interfacial phenomena. *Foods*. 10-3, pp.539.
- 12 **Artículo científico.** Marlene Costa; Zerrin Sezgin-Bayindir; Sonia Losada-Barreiro; Fátima Paiva-Martins; Luciano Saso; Carlos Bravo-Díaz. 2021. Polyphenols as Antioxidants for Extending Food Shelf-Life and in the Prevention of Health Diseases: Encapsulation and Interfacial Phenomena. *Biomedicines*. 9-1909, pp.1-38.
- 13 **Artículo científico.** Marlene Costa; Josefa Freiría-Gándara; Sonia Losada-Barreiro; Fátima Paiva-Martins; Carlos Bravo-Díaz. 2020. Effects of droplet size on the interfacial concentrations of antioxidants in fish and olive oil-in-water nanoemulsions and on their oxidative stability. *J. Colloid Interface Sci.* 562-7, pp.352-362.
- 14 **Artículo científico.** Pascual García-Pérez; Sonia Losada-Barreiro; Carlos Bravo-Díaz; Pedro P. Gallego. 2020. Exploring the use of Bryophyllum as natural source of bioactive compounds with antioxidant activity to prevent lipid oxidation of fish oil-in-water emulsions. *Plants*. 9-8, pp.1012.
- 15 **Artículo científico.** Marlene Costa; Sonia Losada-Barreiro; Carlos Bravo-Díaz; António A. Vicente; Luis S. Monteiro; Fatima Paiva-Martins. 2020. Influence of AO chain length, droplet size and oil to water ratio on the distribution and on the activity of gallates in fish oil-in-water emulsified systems: Emulsion and nanoemulsion comparison. *Food Chemistry*. 310, pp.125716.
- 16 **Artículo científico.** Marlene Costa; Sonia Losada-Barreiro; Carlos Bravo-Díaz; Fátima Paiva-Martins; Luis Monteiro. 2020. Interfacial concentrations of hydroxytyrosol derivatives in fish oil-in-water emulsions and nanoemulsions and its influence on their lipid oxidation: droplet size effects. *Foods*. 9-12, pp.1987.
- 17 **Artículo científico.** Sonia Losada-Barreiro; Matej Sova; Janez Mravljak; Luciano Saso; Carlos Bravo-Díaz. 2020. Synthesis, In Vitro Antioxidant Properties and Distribution of a New Cyanothiophene-Based Phenolic Compound in Olive Oil-In-Water Emulsions. *Antioxidants*. 9, pp.623-639.
- 18 **Artículo científico.** Carlos Bravo-Díaz; Pedro P. Gallego; Sonia Losada-Barreiro; Pascual García-Pérez. 2019. Adsorption of gallic acid, propyl gallate and polyphenols from Bryophyllum extracts on activated carbon. *Scientific Reports*. Nature Publishing group. 9, pp.14830-14839.
- 19 **Artículo científico.** Carlos Bravo-Díaz; Sonia Losada-Barreiro; Marta Szymula; Jolanta Narkierwick. 2019. Concentration of resveratrol at the oil-water interface of corn-in water emulsions. *Adsorption*. 25-4, pp.903-911.
- 20 **Artículo científico.** Mafalda Meireles; Sonia Losada-Barreiro; Marlene Costa; Fatima Paiva-Martins; Carlos Bravo-Díaz; Monteiro. 2019. Control of antioxidant efficiency of chlorogenates in emulsions: Modulation of antioxidant interfacial concentrations. *Journal of the Science of Food and Agriculture*.
- 21 **Artículo científico.** Pascual García-Pérez; Sonia Losada-Barreiro; Pedro P. Gallego; Carlos Bravo-Díaz. 2019. Cyclodextrin-Elicited Bryophyllum Suspension Cultured Cells: Enhancement of the Production of Bioactive Compounds. *Int. J. Mol. Sci.* 20, pp.5180.
- 22 **Artículo científico.** Emilio Raimundez-Rodríguez; Sonia Losada-Barreiro; Carlos Bravo-Díaz. 2019. Enhancing the fraction of antioxidants at the interfaces of oil-in-water emulsions: A kinetic and thermodynamic analyses of their partitioning. *Journal of Colloid and Interface Science*. 555, pp.224-233.

- 23 Artículo científico.** Mafalda Meireles; Sonia Losada-Barreiro; Marlene Costa; Fatima Paiva-Martins; Carlos Bravo-Díaz; Luis S. Monteiro. 2019. Targeting antioxidants to interfaces: Control of the oxidative stability of lipid-based emulsions. Journal of the Science of Food and Agriculture. 99-8, pp.3917-3925.
- 24 Capítulo de libro.** Marlene Costa; Fátima Paiva-Martins; Carlos Bravo-Díaz; Sonia Losada-Barreiro. 2022. Control of Lipid Oxidation in Oil-in Water Emulsions: Effects of Antioxidant Partitioning and Surfactant Concentration. Lipid Oxidation in Food and Biological Systems. Springer.
- 25 Capítulo de libro.** Marlene Costa; Sonia Losada-Barreiro; Carlos Bravo-Díaz; Fátima Paiva-Martins. 2022. Effects of Emulsion Droplet Size on the Distribution and Efficiency of Antioxidants. Lipid Oxidation in Food and Biological Systems. Springer.
- 26 Capítulo de libro.** Carlos Bravo-Díaz; Elisa González-Romero. 2022. Kinetics and Mechanisms of Aryldiazonium Ions in Aqueous Solutions. Aryl Diazonium Salts and Related Compounds, Physical Chemistry in Action. Springer.
- 27 Capítulo de libro.** Fátima Paiva-Martins; Carlos Bravo-Díaz; Sonia Losada-Barreiro. 2020. Why Encapsulate Antioxidants in Emulsion-Based Systems, Where They Are Located, and How Location Affects Their Efficiency. Emulsion-based Encapsulation of Antioxidants, Food Bioactive Ingredients. Springer.
- 28 Capítulo de libro.** Pascual García-Pérez; Ester Lozano-Milo; Pedro Gallego; Concepción Tojo-Suárez; Sonia Losada-Barreiro; Carlos Bravo-Díaz. 2019. Plant antioxidants in food emulsions. Current Aspects of Colloidal Systems in Food Products. InTech Open. pp.11-29.
- 29 Reseña.** Carlos; Fátima; Sonia. 2023. Partitioning of Antioxidants in Edible Oil–Water Binary Systems and in Oil-in-Water Emulsions 2023. Antioxidants. MDPI. 12, pp.828.

C.3. Proyectos o líneas de investigación

- 1 Proyecto.** Red de Uso Sostenible de Recursos y Residuos (REDUSO). (Universidade de Vigo). 01/01/2017-30/01/2019.
- 2 Proyecto.** Correlación entre la distribución y eficacia de antioxidantes derivados del ácido cinámico. Xunta de Galicia. (Universidade de Vigo). 2010-2013.
- 3 Proyecto.** Constantes de Partición y Distribución de Moléculas Orgánicas en Sistemas Emulsionados. Ministerio de Educación y Ciencia (CTQ2006-13969). CARLOS DANIEL BRAVO DIAZ. (Universidade de Vigo). 2006-2009.