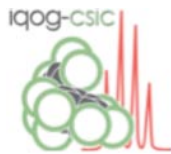




**Bernardo Herradón García**

**Currículum vitae**

**1 de mayo de 2016**



**Número de hojas que contiene: 58**

- 1) Datos generales.
- 2) Preámbulo: Consideraciones generales y resumen ejecutivo del CV.
- 3) Historial científico.
- 4) Publicaciones científicas.
- 5) Artículos de difusión de la cultura científica publicados en revistas.
- 6) Libros.
- 7) Participación en proyectos de I+D financiados en convocatorias públicas en los últimos 10 años.
- 8) Participación en contratos de investigación con empresas.
- 9) Patentes.
- 10) Creación de empresas de base tecnológica.
- 11) Estancias en centros extranjeros.
- 12) Estancias en centros españoles.
- 13) Congresos.
- 14) Tesis doctorales dirigidas.
- 15) Actividades académicas. Cursos y seminarios impartidos sobre resultados de investigación.
- 16) Tesis de licenciatura y diplomas de estudio avanzado dirigidos.
- 17) Asistencia editorial en revistas científicas.
- 18) Participación en comisiones.
- 19) Componente ordinario de productividad por actividad prestada (quinquenios).
- 20) Evaluación de la actividad investigadora (sexenios).
- 21) Otras tareas en el Instituto de Química Orgánica General.
- 22) Becas y otras menciones.
- 23) Actividades de divulgación y difusión de la Cultura Científica.

## 1. Datos Generales

**APELLIDOS:** HERRADÓN GARCÍA

**NOMBRE:** BERNARDO

**SEXO:** V

**DNI:** 51624859W **FECHA DE NACIMIENTO:** 27-10-1958

**Nº DE FUNCIONARIO:** 5162485968 A 5404

**DIRECCION PARTICULAR:** C/ LOS MADROÑOS Nº23

**CIUDAD:** VELILLA DE SAN ANTONIO **CODIGO POSTAL:** 28891

**TELEFONOS:** 916608464, 699607232

**ESPECIALIZACION:** SÍNTESIS ORGÁNICA. SÍNTESIS Y ESTRUCTURA DE PÉPTIDOS Y DERIVADOS. MECANISMOS DE REACCIÓN. INTERACCIONES DE COMPUESTOS AROMÁTICOS. QUÍMICA COMPUTACIONAL. TOXICOLOGÍA. COMPUESTOS BIOLÓGICAMENTE ACTIVOS. MATERIALES PARA DISPOSITIVOS ACUMULADORES DE ELECTRICIDAD. MATERIALES GRAFÉNICOS. MATERIALES NANOESTRUCTURADOS.

**CÓDIGO UNESCO:** 2306

---

## **FORMACION ACADEMICA**

LICENCIATURA EN CIENCIAS QUÍMICAS

CENTRO: UNIVERSIDAD COMPLUTENSE (MADRID)

FECHA: JUNIO 1980

---

DOCTORADO EN CIENCIAS QUÍMICAS.

CENTRO: UNIVERSIDAD COMPLUTENSE (MADRID)

FECHA: DICIEMBRE 1986

---

DIRECTOR DE TESIS: SERAFÍN VALVERDE LÓPEZ

---

## **SITUACION PROFESIONAL ACTUAL**

**ORGANISMO:** CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS (CSIC).

**INSTITUTO:** INSTITUTO DE QUÍMICA ORGÁNICA GENERAL (IQOG).

**DEPARTAMENTO:** SÍNTESIS, ESTRUCTURA Y PROPIEDADES DE COMPUESTOS ORGÁNICOS (SEPCO).

**CATEGORIA PROFESIONAL Y FECHA DE INICIO:** INVESTIGADOR CIENTÍFICO DESDE MAYO DE 2003 Y DIRECTOR DEL INSTITUTO DE QUÍMICA ORGÁNICA GENERAL DESDE OCTUBRE DE 2006.

**DIRECCION POSTAL:** C/ JUAN DE LA CIERVA, 3; 28006 MADRID

**TELEFONO:** 915618806 (EXT. 318)

**DEDICACION:** A TIEMPO COMPLETO

---

---

**ACTIVIDADES ANTERIORES DE CARACTER CIENTIFICO O PROFESIONAL**


---

<b>FECHA</b>	<b>PUESTO</b>	<b>INSTITUCIÓN</b>
Enero, 1980-Junio, 1981	Becario Predoctoral. Tesina de Licenciatura	Universidad de Alcalá de Henares
Septiembre-Diciembre, 1983-	Becario Predoctoral	Universidad de Alcalá de Henares
Enero, 1984- Septiembre, 1986	Becario Predoctoral de FPI Tesis doctoral.	Instituto de Química Orgánica General, C. S. I. C.
Enero, 1987-Diciembre, 1988	Becario Postdoctoral de FPI	Laboratorium für Organische Chemie, ETH, Zürich
Enero 1989	Becario Postdoctoral del CSIC	Department of Chemistry, Stanford University
Diciembre, 1994-Septiembre, 1996	Profesor Asociado a tiempo parcial	Universidad de Alcalá de Henares
Febrero, 1989-Mayo, 2003	Científico Titular	Instituto de Química Orgánica General, CSIC
Octubre, 2006-Noviembre, 2010	Director	Instituto de Química Orgánica General, CSIC

---

**IDIOMAS DE INTERES CIENTIFICO (R = regular, B = bien, C = correctamente)**

<u>IDIOMA</u>	<u>HABLA</u>	<u>LEE</u>	<u>ESCRIBE</u>
Inglés	B	C	C
Francés	R	C	R

---

## 2. Preámbulo: Consideraciones generales y resumen ejecutivo del CV

En este documento se encuentra mi labor científica de los 30 años que llevo en investigación. Con la madurez científica, he reconocido que la investigación es una actividad con varias facetas, que me he permitido resumir en la siguiente imagen.



A la izquierda de la imagen se encuentran cuatro aspectos que considero imprescindibles para una carrera investigadora: **difusión**, **transferencia social del conocimiento**, **formación de jóvenes investigadores** y **financiación**.

Por supuesto, un científico tiene que publicar los resultados de su investigación en revistas científicas especializadas, para que sean conocidas por los colegas científicos.

Hay un aspecto muy importante en la labor del científico: la **transferencia social del conocimiento**, tanto el generado por su investigación como los relacionados con la cultura científica. En este aspecto tengo que destacar mi labor desde el año 2007, en la que he participado en más de 500 actividades, que no se detallan en este CV enfocado más a la actividad científica, pero que se puede encontrar en las web que gestiono: <http://www.losavancesdequimica.com/> y <http://bit.ly/1zrEFy7>. Aunque estas tareas pueden restar tiempo

a la investigación, ésta es una labor imprescindible en un país como España, con pocas cultura y tradición científicas.

Hay otro aspecto de la transferencia social del conocimiento que muchas veces es minusvalorado por los investigadores en ciencia básica (como el que esto escribe) y es la **transferencia industrial**. Siempre he tenido claro que es importante patentar e intentar transferir patentes al sector industrial. Los que estamos convencidos de que la *ciencia es el motor de la economía*, no podemos dejar de lado esta faceta. En este CV se detallan las patentes de las que soy inventor. Tengo que destacar que recientemente el CSIC ha licenciado una de nuestras patentes a una empresa de base tecnológica, *Gnanomat*, que es una empresa de la que soy co-fundador, promotor y asesor científico. Más adelante en este CV y en el siguiente apartado (**Historial científico**) se dan detalles de este proceso. Tengo que decir que el último año lo he dedicado (junto a mi grupo, formado por sólo un investigador y un estudiante de grado de Ingeniería Química a tiempo parcial) a la mejora de la tecnología descrita en la patente. La creación de una *spin-off* era la única actividad que faltaba en mi carrera investigadora y en 2014 lo he conseguido.

Sin embargo, no considero que estas dos actividades (cultura científica y transferencia del conocimiento) hayan mermado mi actividad como investigador; pues, más o menos, en los últimos años he mantenido el nivel de publicaciones (si consideramos también las patentes) que en mi etapa anterior al 2007; que considero aceptable, teniendo en cuenta el escaso espacio disponible en mi grupo (20 m<sup>2</sup> de laboratorio y 13 m<sup>2</sup> de despacho, que he convertido en laboratorio de química computacional).

Es muy importante que un científico **forme a los futuros investigadores**, incluso acudiendo a centros de enseñanza preuniversitaria. En relación con la formación de doctores, desde hace más de 20 años colaboro con la Universidad de Alcalá en diversos cursos de doctorado y máster; también he dirigido un curso de divulgación inter-universitario y he impartido numerosas conferencias en universidades. He dirigido siete tesis doctorales. No es un número muy alto; en parte debido al escaso espacio disponible y a la dificultad que, en general, tenemos los investigadores del CSIC de acceder a estudiantes con buenos expedientes académicos, susceptibles de tener beca/contrato de doctorado. Todos los investigadores que se han formado en mi grupo continúan sus carreras investigadoras (ver más adelante).

Finalmente, todas estas actividades no podrían hacerse sin financiación. Desde mi retorno de Suiza, en 1991, **he sido el Investigador Principal (IP) en 27 proyectos de investigación con financiación pública y privada**: Ministerio español (con diversas denominaciones), Beca Curie de la UE (en 1998), Comunidad de Madrid, Fundación ‘la Caixa’, Fundación Mapfre, CSIC, empresas Bioibérica, Janssen-Cilag, FYSE-Ercros y NEOCODEX; así como diversos proyectos de divulgación. Los detalles de proyectos públicos financiados en los últimos 10 años y la de los privados se indican en los apartados 7 y 8 de este CV.

#### Evolución de la investigación científica

A lo largo de mi carrera científica he investigado en numerosos temas, que se indican en el apartado siguiente. Se me puede achacar que mi investigación no ha profundizado suficientemente en algunos aspectos y que podría haberle “sacado más partido”, en forma de publicaciones, a algunos de estos temas.

Sin embargo, la principal motivación de mi evolución como investigador ha sido la de aprender y cuando considero que de un tema tengo el suficiente conocimiento, intento empezar otro. Por otro lado, quiero hacer notar que el cambio de temas no han sido “saltos al vacío”, si no que son consecuencia de una evolución investigadora.

Así, a partir de la síntesis orgánica (tanto metodología como orientada a objetivo) tuvimos la oportunidad de investigar en biocatálisis, encontrando resultados interesantes con compuestos aromáticos, lo cual nos llevó al estudio de los arenos desde un punto de vista estructural, incluyendo las interacciones no covalentes, especialmente las de compuestos aromáticos; donde la cristalografía y la química computacional son fundamentales para ahondar en estos aspectos.

Paralelamente a la investigación en compuestos aromáticos, y relacionado con nuestro interés por los productos naturales bioactivos (desde mi tesis doctoral), hemos investigado diversos aspectos de la actividad biológica de compuestos aromáticos, tanto en su potencial aplicación terapéutica como su toxicidad. Este último aspecto lo estudiamos desde hace años en colaboración con el Dr. Navas (INIA), dónde nuestras investigaciones son complementarias: su grupo realiza ensayos biológicos y el nuestro la modelización computacional.

A partir de nuestra investigación en síntesis orgánica, y con el objetivo de estudiar miméticos y análogos de productos naturales, empezamos a trabajar con péptidos, peptidomiméticos e híbridos péptido-molde (un compuesto dónde uno o más residuos de péptidos están unidos a un fragmento no-peptídico, el *molde*), donde nos han interesado dos aspectos: las propiedades biológicas y la estructura. En este tema también hemos investigado el desarrollo de metodologías para la síntesis de los moldes, que incluyen carbohidratos, biarilos, fluorenonas, carbociclos y heterociclos.

Desde hace unos años, hemos combinado los dos temas de investigación, que se complementan llegando a estudiar diversos aspectos de los péptidos y compuestos aromáticos (de ahí, el nombre de mi grupo de investigación: *Péptidos y compuestos aromáticos, PEPARO*).

Aunque la mayor parte de nuestra investigación ha sido en la frontera entre la química y la biomedicina (actividad biológica, mecanismo de acción, toxicología molecular, etc.), desde comienzos de 2013 hemos comenzado la investigación en un área bastante distante: la ciencia de los materiales. Aunque es un cambio bastante importante, quiero destacar que este cambio se basa en nuestra experiencia en sistemas heterocíclicos y aromáticos.

Así, en esta área, frontera entre la química y la ciencia de los materiales, estamos investigando en dos temas en los que ya estamos obteniendo resultados importantes. El primer tema es **la síntesis, caracterización y propiedades electroquímicas de líquidos iónicos heterocíclicos**, que pueden usarse como electrolitos en dispositivos electroquímicos (baterías y condensadores), Colaboramos con expertos en electroquímica y polímeros. En este tema hemos presentado una patente (ver detalles más adelante) que fue ofertada por el CSIC a diversas empresas. Se estableció un acuerdo de opción con la empresa *Boulder Ionics Corporation* (USA), que ha pagado 5.000 € por esta opción. La empresa también se ha hecho cargo de los costes de solicitud de la PCT (estimados en algo más de 3.000 €). Debido al acuerdo con esta

empresa, hasta octubre de 2014 no hemos podido publicar estos resultados. En este momento ya hemos escrito un manuscrito que se ha enviado a publicar (ver apartado 4 de este CV)

En el otro tema, hemos encontrado un **método muy eficiente para exfoliar grafito** que muestra ventajas respecto a los descritos en la bibliografía. Los resultados iniciales de esta investigación han sido objeto de una solicitud de patente española y PCT y la creación de una empresa de base tecnológica (ver detalles más adelante).

Debido a los intereses de transferencia de estas dos patentes (y a la dedicación a las mismas, especialmente a la segunda, como se ha indicado), no hemos publicado nada en 2014 (excepto las patentes). Una vez pasada estas fases de desarrollo de las patentes y periodo de confidencialidad, hemos escrito algunas publicaciones de resultados pendientes (ver apartado 4)

### Resumen ejecutivo del CV

- Número de sexenios de investigación: 4 (todos los solicitados, siendo el último el tramo 2003-2008)
- Publicaciones científicas: 80 (incluidas la tesis de licenciatura, la tesis doctoral, un capítulo de libro, una revisión y cuatro artículos no incluidos en el JCR) y tres que están en proceso de evaluación; de las 72 publicaciones referenciadas en el JCR, 48 están en el primer cuartil del área científica correspondiente (química, química orgánica, química física, química analítica, toxicología). Tres de las publicaciones han sido portada de las ediciones correspondientes de la revista.
- Indicadores bibliométricos. Researcher ID: K-5722-2014. Código ORCID: 0000-0003-1179-884X. Indicadores (según el ISI-WoK a 28 de septiembre de 2014): 1478 citas totales (1179 sin autocitas); índice h = 23, con 28 publicaciones citadas 20 ó más veces y con 37 publicaciones citadas 15 ó más veces.
- Tesis doctorales: 7; todos los doctores egresados están trabajando en investigación: dos de ellos en el CSIC, una investigadora contratada por la Universidad de Bruselas (*Vrije Universiteit*), una investigadora contratada en el *Scripps Research Institute* (San Diego, USA) y tres trabajando en empresas farmacéuticas.
- Publicaciones sobre divulgación científica, historia de la ciencia y política científica: 62 en revistas en papel y 10 en sitios web (no gestionados por Bernardo Herradón)
- Libros: autor de un libro y coautor de otro (libro-catálogo de exposición científica).
- Patentes: 7 patentes, de las que seis han sido solicitadas también como PCTs, tres patentes europeas, tres patentes USA, una patente china y una patente japonesa.
- Transferencia de patentes: las tres patentes sobre inhibidores de calpaina (ver apartado 9 de este CV) sirvieron para obtener un proyecto CENIT (ver apartado 7); sobre una patente se firmó un



acuerdo de opción con la empresa *Boulder Ionics*; una patente se ha licenciado a la empresa *Gnanomat*.

- Creación de empresas de base tecnológica: co-fundador, promotor y asesor científico de la empresa *Gnanomat*, empresa de base tecnológica (*spin-off*), cuyo objetivo es la investigación, desarrollo y producción de derivados de grafeno. La empresa se creó en julio de 2014. El proyecto presentado por *Gnanomat* ha sido aprobado por el ERC-*Horizon 2020* en el programa *SME Instrument*, que es una convocatoria destinada a apoyar las primeras fases de PYMEs de base tecnológica. Esta es una convocatoria muy competitiva, financiándose sólo, aproximadamente, el 10% de las solicitudes (<http://bit.ly/1xufkZp>).
- Investigador principal: en 12 proyectos de convocatoria pública (en los 10 últimos años) y en 14 proyectos con entidades privadas (en los últimos 15 años); con una captación total de más de 810.000 €. Una pequeña parte de esta financiación ha sido para apoyar proyectos relacionados con la cultura científica.
- Actividades relacionadas con la cultura científica: más de 500 en los últimos 8 años, de las que quiero destacar (aparte de los libros y los artículos ya mencionados), 149 conferencias impartidas, 4 cursos de divulgación organizados, las exposiciones y documentales en los que he participado, los más de 180 programas de radio y alrededor de 40 colaboraciones con la prensa.

### **3. Historial científico**

En todos los temas en los que hemos trabajado hay al menos una publicación, patente o tesis doctoral/tesina de licenciatura; siendo frecuente las publicaciones en las que se abordan varias líneas simultáneas; como se ha indicado en el resumen de las cinco aportaciones seleccionadas.

#### **I) Líneas de investigación pasadas**

Nuestro grupo ha investigado en diferentes áreas de la Química orgánica en el pasado. Un listado de los temas es el siguiente:

##### **a) Aplicaciones de biocatalizadores en Química Orgánica:**

- a-1) Uso de levaduras en síntesis orgánica para la preparación de compuestos quirales.
- a-2) Síntesis de carbociclos, sesquiterpenos y carbohidratos de cadena ramificada.
- a-3) Aplicación de lipasas en la síntesis de infraestructuras quirales polioxigenadas.
- a-4) Uso de la enzima acilasa I de especies de *Aspergillus* como catalizadores en reacciones de acilación de aminas y alcoholes.

##### **b) Transformaciones usando infraestructuras quirales.**

- b-1) Reacciones estereoselectivas de  $\gamma$ - y  $\delta$ -lactonas- $\alpha,\beta$ -insaturadas.
- b-2) Aplicación de carbohidratos e hidroxiácidos como materiales de partida en la síntesis de productos naturales en forma enantioméricamente puros.
- b-3) Estudios de glicosidaciones intramoleculares.

##### **c) Transposiciones sigmatrópicas.**

- c-1) Transposición de Claisen de 2-alcoxi-2-propen-1-oles. Síntesis de compuestos 1,4-dicarbonílicos enmascarados.
- c-2) Aplicación de la transposición de Claisen y la transposición de tricloroacetimidatos alílicos (Overman) en la síntesis de heterociclos densamente funcionalizados.

##### **d) Transformaciones selectivas promovidas por radiación microondas.**

- d-1) Aplicación a la protección selectiva de carbohidratos, polioles, y aminoalcoholes.
- d-2) Estudio de la modulación experimental de la selectividad.

##### **e) Desarrollo de columnas de inmunoafinidad para el aislamiento de contaminantes orgánico persistentes. Aplicación al análisis de PCBs, PCDDs, PCDFs y compuestos clorados relacionados.**

##### **f) Estudio de la reacción de Wittig. Aplicaciones sintéticas y efecto del disolvente en reacciones de olefinación de hidroxialdehidos-O-protegidos y aminoaldehidos N-protegidos**

#### **II) Líneas de investigación recientes**

Nuestra investigación de los últimos años ha abordado diversos aspectos sobre compuestos aromáticos y péptidos, evolucionando desde los compuestos bioactivos al área de los materiales. Las líneas de investigación (relacionadas entre sí) son:

a) Toxicología computacional.

En esta línea de investigación estudiamos el efecto que los compuestos aromáticos, heterociclos y compuestos halogenados tienen sobre el receptor de hidrocarburos aromáticos (AhR), del receptor de estrógenos (ER) y de los citocromos P450 1A.

La metodología de la investigación incluye métodos basados en mecánica molecular (búsquedas conformacionales con diferentes algoritmos, simulaciones de dinámicas moleculares, etc.) y en química cuántica (métodos *ab initio* basados en la función de onda, en el funcional de la densidad, e híbridos). Los aspectos estudiados son la geometría (estática y dinámica), propiedades electrostáticas (MEP, polarizabilidades, momentos electrostáticos), electrónicas (energía y forma de los orbitales moleculares), índices de aromaticidad, índices de reactividad, estudios de similitud molecular y de relaciones estructura-actividad. También estudiamos las interacciones con compuestos modelo relacionados con las biomacromoléculas diana. El objetivo de esta investigación es profundizar en los factores responsables de la toxicidad de compuestos orgánicos, que pueden servir como remedios paliativo de sus efectos y/o avanzar en el diseño de compuestos con actividad farmacológica. Los resultados computacionales los completamos con estudios experimentales de actividad biológica realizados en el grupo del Dr. Navas (INIA).

b) Síntesis de compuestos aromáticos, heterociclos, carbohidratos, carbociclos, péptidos, e híbridos péptido-molde.

Nuestra investigación actual aborda la síntesis de los siguientes tipos de compuestos:

- Biarilos e híbridos péptido-biarilo.
- Fluorenonas e híbridos péptido-fluorenona.
- Heterociclos aromáticos polianulares.
- Híbridos péptido-isoquinolina e híbridos péptido-biarilo-isoquinolina.
- Pirroles e híbridos péptido-pirrol.
- Dihidropiranos quirales funcionalizados.
- Híbridos péptido-carbohidrato.
- Compuestos cíclicos quirales.
- Híbridos péptido-ciclitol.
- Péptidos-biarilos como estabilizantes de nanopartículas de oro.
- Heterociclos nitrogenados polianulares

Estos compuestos son diseñados y sintetizados con el objetivo de que posean propiedades (biológicas y/o tecnológicas) útiles o estructuras interesantes desde un punto de vista teórico. El trabajo sintético se completa con estudios químico-físicos y de bioactividad, realizados en las líneas c) y d), indicados a continuación.

c) Química orgánica física: Estudios computacionales, cinéticas de equilibrios conformacionales, interacciones no covalentes, cristalografía.

La investigación en este área aborda aspectos estáticos (análisis conformacional, interacciones no-covalentes) y dinámicos (equilibrios conformacionales, modelización de reacciones químicas, características dinámicas de las interacciones no-covalentes) de compuestos aromáticos, carbociclos, heterociclos y péptidos. Para ello usamos, de manera complementaria, aproximaciones computacionales y experimentales. Algunos aspectos que estamos investigando actualmente son:

- Influencia de las interacciones de anillos aromáticos y de los enlaces de hidrógeno sobre el empaquetamiento cristalino.
- Estudios computacionales de compuestos aromáticos, incluyendo las propiedades electrostáticas (momento dipolar, potencial electrostático, momentos de alto orden), electrónicas (forma y energía de orbitales) y aromaticidad; así como su relación con las propiedades biológicas (toxicológicas e inhibición de proteasas). La metodología de los cálculos incluye métodos de mecánica molecular (simulaciones de dinámica molecular, búsquedas conformacionales) y cálculos *ab initio* (HF, métodos post-HF, DFT, métodos híbridos).
- Aplicación de redes neuronales en química orgánica, especialmente como un método para clasificar compuestos en base a su aromaticidad y cuantificar esta propiedad.
- Relación estructura-actividad de inhibidores de proteasas.
- Análisis conformacional de péptidos, carbociclos y carbohidratos.
- Estudio computacional y experimental de la importancia relativa de las interacciones de fragmentos aromáticos (y de sus sustituyentes) frente a posibles enlaces de hidrógeno en derivados de bifenilo y de isoquinolina.
- Cinética de equilibrios entre atropisómeros.

#### d) Compuestos biológicamente activos: Inhibidores de calpaina.

Las calpainas son una familia de enzimas ubicuas en todos los organismos y en todos los tejidos de los mamíferos. Tienen un papel metabólico muy activo, catalizando la hidrólisis de una variedad de proteínas importantes en numerosos procesos fisiológicos. La sobreactivación de las calpainas está implicada en numerosas enfermedades degenerativas (Alzheimer, Parkinson, ictus, isquemia cerebral, diabetes, cataractas, etc.) y su inhibición puede ser útil en el tratamiento de estas enfermedades, así como herramienta en el estudio de ciertos procesos fisiológicos. Nuestro grupo es el más activo de España en el estudio de la inhibición de esta familia de enzimas. La aportación de nuestro grupo al área de inhibidores de calpaína se puede resumir en que hemos preparado y ensayado muchos inhibidores de calpaína (más de 500), con diversas estructuras (bifilos, heterociclos, carbohidratos y los híbridos péptido-molde relacionados), obteniendo inhibidores muy potentes con valores de  $IC_{50}$  en el rango nanomolar y picomolar.

#### d) Nanomateriales híbridos orgánico-inorgánico.

Hemos encontrado que los híbridos péptido-biarilo son buenos agentes estabilizantes de nanopartículas de oro. En colaboración con la Dra. Yolanda Pérez-Cortés (Universidad Rey Juan Carlos) estamos realizando la preparación y estudio estructural de este tipo de materiales. Por otro lado, en colaboración con el Dr.

Navas (INIA) estamos estudiando su toxicidad y, en colaboración con el Profesor Bautista (Facultad de Veterinaria, UCM), hemos encontrado que tienen actividad antimalárica.

Los primeros resultados han mostrado que las nanopartículas de oro son estabilizadas por híbridos péptido-bifenilo con la sustitución adecuada. Estas nanopartículas se han caracterizado por métodos espectroscópicos, analíticos, microscopía y difracción de rayos X en polvo. Además, hemos estudiado sus propiedades biológicas (tanto toxicidad como antimalárica). Los resultados son muy prometedores y nos animan a continuar esta investigación, usando otros híbridos péptido-molde y otros elementos metálicos; así como la caracterización adecuada y potenciales aplicaciones (tecnológicas; pero también el estudio de bioactividad, especialmente comparándolos con los derivados peptídicos ensayados como inhibidores de calpaína; y de toxicidad). Una característica importante de estos materiales nanoestructurados (no previsto inicialmente) es que son capaces de cruzar la membrana celular; por lo que pensamos que si se modifican adecuadamente (por ejemplo, uniéndoles un fragmento fluorescente), podríamos tener sondas fluorescentes que serían una herramienta útil para investigación biomédica.

### **III) Nuestra investigación más reciente**

En los dos últimos años nos hemos embarcado en dos nuevos temas, que están en la frontera entre la química y la ciencia de los materiales, en los que ya estamos obteniendo resultados importantes.

#### **a) Síntesis, caracterización y propiedades electroquímicas de líquidos iónicos heterocíclicos**

Estos compuestos pueden usarse como electrolitos en dispositivos electroquímicos (baterías y condensadores), Colaboramos con expertos en electroquímica y polímeros, especialmente con el grupo del Dr. Enrique Morales (ICTP-CSIC). En este tema solicitamos una patente que fue ofertada por el CSIC a diversas empresas. El CSIC estableció un acuerdo de opción con la empresa *Boulder Ionics Corporation* (USA), que pagó 5.000 €. La empresa también se hizo cargo de los costes de solicitud de la PCT (estimados en algo más de 3.000 €). La opción finalizó a finales de octubre de 2014 y el CSIC está negociando con otras empresas la licencia de la patente. Una vez finalizada la opción de *Boulder Ionics Corporation*, hemos escrito un artículo que se ha enviado a la revista *Journal of Material Chemistry*.

Hemos solicitado un proyecto al Plan Nacional de Materiales (con investigadores del ICTP-CSIC e ICMM-CSIC) para seguir investigando en este tema; en la que pretendemos ampliar los tipos de líquidos iónicos heterocíclicos que vamos a usar en dispositivos de almacenamiento de electricidad. Las aplicaciones de estos compuestos en dispositivos electroquímicos para almacenar energía (pilas, baterías, condensadores) pueden suponer mejoras en el uso eficiente de la electricidad como vector energético. Nuestros compuestos muestran ventajas competitivas respecto a los descritos en la bibliografía: son baratos, de síntesis eficaz y no contaminante, no son volátiles y tienen buenas propiedades electroquímicas.

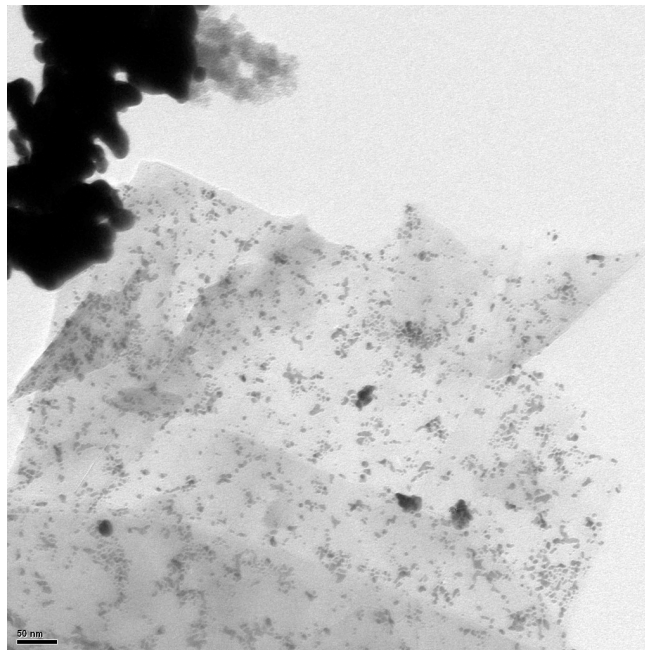
También hemos encontrado que estos compuesto poseen propiedades tribológicas (lubricantes). Estos resultados han sido obtenidos en colaboración con el grupo de la profesora Bermúdez (Universidad Politécnica de Cartagena), con la que hemos presentado una comunicación oral (con artículo incluido) a un congreso internacional en el área. Actualmente están ensayando nuevas generaciones de líquidos iónicos.

Los primeros resultados son prometedores, demostrando que este tipo de compuestos son competitivos con los disponibles comercialmente.

b) Exfoliación de grafito

En la solicitud de patente P201331382 describimos un método de exfoliación de grafito que tiene ventajas considerables respecto a los encontrados en la bibliografía. Los resultados iniciales de esta investigación han sido objeto de una solicitud de patente española y una PCT que ha sido licenciada a la empresa *Gnanomat*.

La ventaja del método son diversas: medioambientalmente benigno, energéticamente muy eficiente, barato, versatilidad y rápido. Las láminas de grafeno obtenidas son de buena calidad y tamaño (rectangulares de entre 5-10 micras de lado). Es bien conocido que el grafeno es uno de los materiales del futuro y en este campo hay un enorme potencial investigador. Tras presentar la solicitud de patente española, realizamos mejoras considerables en el proceso, en el que podemos obtener materiales compuestos (*composites*) de grafeno y otras especies químicas de manera directa, lo que fue objeto de una extensión como PCT. Hemos usado una variedad de metales, óxidos, sulfuros y polímeros para obtener estos materiales compuestos, entre los que se puede ver que nanopartículas se depositan de manera estable sobre las láminas de grafeno (en la imagen, una fotografía de microscopía electrónica de nanopartículas de oro depositadas sobre grafeno). Los materiales obtenidos han sido adecuadamente caracterizados por una combinación de métodos microscópicos, analíticos y espectroscópicos. También se han estudiado propiedades, principalmente eléctricas, pues estamos especialmente interesados en la aplicación en el sector de la energía. Este será un tema de investigación en nuestro grupo en los próximos años.



#### 4. Publicaciones científicas

- 
- 1) AUTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón  
 TÍTULO: Aportaciones a la Química de 2-amino-4H-piranos.  
 REF. REVISTA/LIBRO: Tesis de licenciatura, **1981**.
- 
- 2) AUTOR (ES) (p. o. de firma): S. Valverde, B. Herradón, M. Martín-Lomas  
 TÍTULO: The use of L-tartaric acid in the synthesis of 4-O-benzyl-2,3-dideoxy-L-threo-hex-2-enono-1,5-lactone  
 REF. REVISTA/LIBRO: Tetrahedron Letters, **1985**, 26, 3731-3734 CLAVE: A
- 
- 3) AUTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón  
 TÍTULO: Utilización de carbohidratos e hidroxiácidos en la preparación de compuestos enantioméricamente puros: Aproximación a la síntesis de lactosas naturales.  
 REF. REVISTA/LIBRO: Tesis doctoral, **1986**.
- 
- 4) AUTOR (ES) (p. o. de firma): S. Valverde, B. Herradón, R. M. Rabanal, M. Martín-Lomas  
 TÍTULO: Preparation of (4R,5S)-(2,2,5-trimethyl-1,3-dioxolane-4-ylmethyl)triphenyl-phosphonium iodide. A synthetic approach to olguine: further model studies  
 REF. REVISTA/LIBRO: Canadian Journal of Chemistry, **1987**, 65, 332-338 CLAVE: A
- 
- 5) AUTOR (ES) (p. o. de firma): S. Valverde, B. Herradón, R. M. Rabanal, M. Martín-Lomas  
 TÍTULO: The synthesis of D-asperlin  
 REF. REVISTA/LIBRO: Canadian Journal of Chemistry **1987**, 65, 339-342 CLAVE: A
- 
- 6) AUTOR (ES) (p. o. de firma): S. Valverde, M. Martín-Lomas, B. Herradón, S. García-Ochoa  
 TÍTULO: The reaction of carbohydrate-derived alkoxyaldehydes with methoxycarbonylmethylenetriphenylphosphorane: stereoselective synthesis of unsaturated esters  
 REF. REVISTA/LIBRO: Tetrahedron **1987**, 43, 1895-1901. CLAVE: A
- 
- 7) AUTOR (ES) (p. o. de firma): S. Valverde, A. Hernández, B. Herradón, R. M. Rabanal, M. Martín-Lomas  
 TÍTULO: The synthesis of (-)-anamarine  
 REF. REVISTA/LIBRO: Tetrahedron **1987**, 43, 3499-3504 CLAVE: A
- 
- 8) AUTOR (ES) (p. o. de firma): D. Seebach, B. Herradón  
 TÍTULO: Diastereoselective elaboration of the carbon skeleton of  $\beta$ -hydroxyesters from yeast reductions. Preparation of (2S)-2-hydroxy-cyclohexane carboxylic acids with three contiguous stereogenic centers  
 REF. REVISTA/LIBRO: Tetrahedron Letters **1987**, 28, 3791-3794 CLAVE: A
- 
- 9) AUTOR (ES) (p. o. de firma): S. Valverde, M. Martín-Lomas, B. Herradón  
 TÍTULO: Synthetic approach to olguine: EPC preparation of ethyl 6,7-anhydro-4-O-benzyl-2,3-dideoxy- $\alpha$ -D-altro-oct-2-eno-1,8-dialdo-1,5-pyranoside  
 REF. REVISTA/LIBRO: Journal of Carbohydrate Chemistry **1987**, 6, 685-690 CLAVE: A

- 
- 10) AUTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón  
TÍTULO: EPC-syntheses from bicyclic dioxanones: (-)-5-epidehydrofukinone  
REF. REVISTA/LIBRO: Helvetica Chimica Acta **1988**, 71, 977-980 CLAVE: A
- 
- 11) AUTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón, D. Seebach  
TÍTULO: Mono- and dialkylation of derivatives of (1R,2S)-2-hydroxycyclopentanecarboxylic acid and -cyclohexanecarboxylic acid *via* bicyclic dioxanones: selective generation of three contiguous stereogenic centers on a cyclohexane ring  
REF. REVISTA/LIBRO: Helvetica Chimica Acta **1989**, 72, 690-714 CLAVE: A
- 
- 12) AUTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón  
TÍTULO: Efficient synthesis of (R)-5-(2-hydroxyethyl)-2(5H)-furanone from (R)-malic acid  
REF. REVISTA/LIBRO: Tetrahedron: Asymmetry **1991**, 2, 191-194 CLAVE: A
- 
- 13) AUTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón  
TÍTULO: Lipase catalyzed kinetic resolution of ( $\pm$ )-*cis*-4-hydroxymethyl-2-phenyl-1,3-dioxane  
REF. REVISTA/LIBRO: Tetrahedron: Asymmetry **1992**, 3, 209-212 CLAVE: A
- 
- 14) AUTOR (ES) (p. o. de firma): R. Bao, S. Valverde, B. Herradón\*  
TÍTULO: The Claisen-Johnson rearrangement route to 1,4-dicarbonyl compounds: synthesis of ethyl 4-ethoxy-4-alkenoates as masked 4-oxo esters  
REF. REVISTA/LIBRO: Synlett **1992**, 217-219 CLAVE: A
- 
- 15) AUTOR (ES) (p. o. de firma): D. Seebach, B. Lamatsch, R. Amstutz, A. K. Beck, M. Dobler, M. Egli, R. Fitzi, M. Gautschi, B. Herradón, P. C. Hidber, J. J. Irwin, R. Locher, M. Maestro, T. Maetzke, A. Mouriño, E. Pfammatter, D. A. Plattner, C. Schickli, W. B. Schweizer, P. Seiler, G. Stucky, W. Petter, J. Escalante, E. Juaristi, D. Quintana, C. Miravittles, E. Molins  
TÍTULO: Structure and Reactivity of Five- and Six-Rings N,N-, N,O-, and O,O-Acetals: A Lesson in Allylic 1,3-Strain ( $A^{1,3}$  Strain)  
REF. REVISTA/LIBRO: Helvetica Chimica Acta **1992**, 75, 913-934 CLAVE: A
- 
- 16) AUTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón  
TÍTULO: Biocatalytic Synthesis of Chiral Polyoxygenated Compounds: Effect of the Solvent on the Enantioselectivity of Lipase Catalyzed Transesterifications in Organic Solvents  
REF. REVISTA/LIBRO: Synlett **1993**, 108-110 CLAVE: A
-



17) AUTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón,\* S. Cueto, A. Morcuende, S. Valverde  
TÍTULO: Regio- and Enantioselective Esterifications of Polyoxygenated Compounds Catalyzed by Lipases  
REF. REVISTA/LIBRO: Tetrahedron: Asymmetry **1993**, 4, 845-864 CLAVE: A

---

18) AUTOR (ES) (p. o. de firma): T. Arslan, B. Herradón, B. W. Schweizer, S. A. Benner  
TÍTULO: Determination of the Absolute Configuration of Dimethyl (2S,3S)-2-allyl-3-hydroxyglutarate: A Chiral Building Block for Preparing Branched-chain Nucleoside Analogues  
REF. REVISTA/LIBRO: Helvetica Chimica Acta **1993**, 76, 2969-2975 CLAVE: A

---

19) AUTOR (ES) (p. o. de firma): A. Morcuende, S. Valverde, B. Herradón\*  
TÍTULO: Rapid Formation of Dibutylstannylene Acetals from Polyhydroxylated Compounds under Microwave Heating. Application to the Regioselective Protection of Polyols and to a Catalytic Tin-mediated Benzoylation.  
REF. REVISTA/LIBRO: Synlett **1994** 89-91 CLAVE: A

---

20) AUTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón  
TÍTULO: Influence of the Nature of the Solvent on the Enantioselectivity of Lipase-Catalyzed Transesterifications: A Comparison Between the Lipases from Porcine Pancreas and *Pseudomonas Fluorescens*.  
REF. REVISTA/LIBRO: Journal of Organic Chemistry **1994**, 59, 2891-2894 CLAVE: A

---

21) AUTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón,\* S. Valverde  
TÍTULO: Biocatalytic Synthesis of Chiral Polyoxygenated Compounds: Modulation of the Selectivity upon Changes in the Experimental Conditions.  
REF. REVISTA/LIBRO: Tetrahedron: Asymmetry, **1994**, 5, 1479-1500 CLAVE: A

---

22) AUTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón,\* A. Morcuende, S. Valverde  
TÍTULO: Microwave Accelerated Organic Transformations: Dibutylstannylene Acetal Mediated Selective Acylation of Polyols and Amino Alcohols using Catalytic Amounts of Dibutyltin Oxide. Influence of the Solvent and the Power Output on the Selectivity.  
REF. REVISTA/LIBRO: Synlett, **1995**, 455-458 CLAVE: A

---

23) AUTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón,\* S. Valverde  
TÍTULO: Biocatalysis in Organic Synthesis. 6. First Use of an Acylase as Catalyst in the Irreversible Transacylation of Alcohols and Amines: Application to Selective Transformations.  
REF. REVISTA/LIBRO: Synlett, **1995**, 599-602 CLAVE: A

---

24) AUTOR (ES) (p. o. de firma): S. Valverde, A. M. Gómez, A. Hernández, B. Herradón, J. C. López  
TÍTULO: A Novel Strategy for Regio- and Stereo-control in Glycosylation Reactions: Template-Directed Cyclo-glycosylation of Monosaccharides.  
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Soc., Chemical Communications, **1995**, 2005-2006 CLAVE: A

---

25) AUTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón,\* E. Fenude, R. Bao, S. Valverde  
TÍTULO: Highly Diastereoselective Conjugate Addition of Carbon Nucleophiles to a Chiral Oxygenated  $\alpha,\beta$ -Unsaturated- $\delta$ -lactone. A Straightforward Synthesis of Functionalized Branched-Chain L-Sugars.  
REF. REVISTA/LIBRO: Journal of Organic Chemistry, **1996**, 61, 1143-1147 CLAVE: A

---

26) AUTOR (ES) (p. o. de firma): S. Valverde, A. M. Gómez, J. C. López, B. Herradón.  
TÍTULO: Template Directed Cyclo-glycosylation: Effect of the Anchoring Sites of the Spacer and Temperature in the Regio- and Stereo-selectivity of the Glycosylation.  
REF. REVISTA/LIBRO: Tetrahedron Letters, **1996**, 37, 1105-1108 CLAVE: A

---

27) AUTOR (ES) (p. o. de firma): M. Ors, A. Morcuende, M. I. Jiménez, S. Valverde, B. Herradón.\*  
TÍTULO: Biocatalysis in Organic Synthesis. 7. Enantioselective Transesterifications Catalyzed by an Acylase: Remarkable Influence of Remote Substitution and the Nature of the Solvent on the Selectivity.  
REF. REVISTA/LIBRO: Synlett, **1996**, 449-451 CLAVE: A

---

28) AUTOR (ES) (p. o. de firma): A. Morcuende, M. Ors, S. Valverde, B. Herradón.\*  
TÍTULO: Microwave-Promoted Transformations: Fast and Chemoselective N-Acylation of Amino Alcohols Using Catalytic Amounts of Dibutyltin Oxide. Influence of the Power Output and the Nature of the Acylating Agent on the Selectivity.  
REF. REVISTA/LIBRO: Journal of Organic Chemistry, **1996**, 61, 5264-5270 CLAVE: A

---

29) AUTOR (ES) (p. o. de firma): P. Noheda, G. García, M. C. Pozuelo, B. Herradón.\*  
TÍTULO: Chemo-enzymatic Synthesis of Chiral Cyclic Compounds: Efficient Kinetic Resolution of 2-Bromo-2-cyclohexenol.  
REF. REVISTA/LIBRO: Tetrahedron: Asymmetry, **1996**, 7, 2801-2804 CLAVE: A

---

30) AUTOR (ES) (p. o. de firma): F. Sánchez-Sancho, S. Valverde, B. Herradón.\*  
TÍTULO: Stereoselective Syntheses and Reactions of Chiral Oxygenated  $\alpha,\beta$ -Unsaturated- $\gamma$ - and  $\delta$ -lactones.  
REF. REVISTA/LIBRO: Tetrahedron: Asymmetry, **1996**, 7, 3209-3246 CLAVE: A

---

31) AUTOR (ES) (p. o. de firma): J. Faraldos, E. Arroyo, B. Herradón.\*  
TÍTULO: Biocatalysis in Organic Synthesis. 9. Highly Enantioselective Kinetic Resolution of Secondary Alcohols Catalyzed by Acylase.  
REF. REVISTA/LIBRO: Synlett, **1997**, 367-370 CLAVE: A

---

32) AUTOR (ES) (p. o. de firma): F. Sánchez-Sancho, B. Herradón.\*  
TÍTULO: Short Syntheses of (*S*)-Pipelicolic Acid, (*R*)-Coniine, and (*S*)- $\delta$ -Coniceine Using Biocatalytically-Generated Chiral Building Blocks.  
REF. REVISTA/LIBRO: Tetrahedron: Asymmetry **1998**, 9, 1951-1965 CLAVE: A

---

33) AUTOR (ES) (p. o. de firma): N. J. Heaton, P. Bello, B. Herradón,\* A. del Campo, J. Jiménez-Barbero  
TÍTULO: NMR Study of Intramolecular Interactions between Aromatic Groups: van der Waals, Charge Transfer or Quadrupolar Interactions?  
REF. REVISTA/LIBRO: Journal of the American Chemical Society, **1998**, 120, 9632-9645  
(también: Journal of the American Chemical Society, **1998**, 120, 12371-12384) CLAVE: A

---

34) AUTOR (ES) (p. o. de firma): F. Sánchez-Sancho, E. Mann, B. Herradón\*  
TÍTULO: Efficient Synthesis of Polyannular Heterocycles Featuring Microwave-Accelerated Bischler-Napieralski Reaction, Stereoselective Heck Cyclization, and Claisen Rearrangement.  
REF. REVISTA/LIBRO: Synlett, **2000**, 509-513 CLAVE: A

---

35) AUTOR (ES) (p. o. de firma): M. A. Concejero, R. Galve, E. Abad, B. Herradón, M.-P. Marco, J. Rivera, M. J. González, M. de Frutos  
TÍTULO: Immunoaffinity Chromatography as an Isolation Method for PCBs and Other Dioxin-like Compounds.  
REF. REVISTA/LIBRO: Organohalogen Compounds, **2000**, 45, 37-40 CLAVE: A

---

36) AUTOR (ES) (p. o. de firma): M. A. Concejero, R. Galve, B. Herradón, M. J. González, M. de Frutos  
TÍTULO: Feasibility of High Performance Immunoaffinity Chromatography as an Isolation Method for PCBs and other Dioxin-Like Compounds..  
REF. REVISTA/LIBRO: Analytical Chemistry, **2001**, 73, 3119-3125 CLAVE: A

---

37) AUTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón,\* E. Mann, A. Salgado, F. Sánchez-Sancho.  
TÍTULO: Influence of the Solvent on the Stereochemical Outcome of the Wittig Reaction of N-Protected  $\alpha$ -Amino Aldehydes and Alkyl (Triphenylphosphoranylidene)acetates  
REF. REVISTA/LIBRO: Recent Research Developments in Organic Chemistry, **2001**, 5, 49-62  
CLAVE: A

---

38) AUTOR (ES) (p. o. de firma): F. Sánchez-Sancho, E. Mann, B. Herradón.\*  
TÍTULO: Efficient Synthesis of Chiral Isoquinoline and Pyrido[1,2-b]isoquinoline derivatives via intramolecular Heck reactions.  
REF. REVISTA/LIBRO: Advanced Synthesis and Catalysis, **2001**, 343, 360-368 CLAVE: A

---

39) AUTOR (ES) (p. o. de firma): P. Bello, A. Chana, N. J. Heaton, M. A. Maestro, J. Mahía, B. Herradón.\*  
TÍTULO: Studies on Aromatic Compounds. Part 2. Crystal Structure and Molecular Modelling of 1,3-Di-(9-anthracenecarbonyloxy)-2-methylpropane.  
REF. REVISTA/LIBRO: Journal of Molecular Structure, **2001**, 569, 71-80 CLAVE: A

---

40) AUTOR (ES) (p. o. de firma): E. Mann, J. Mahía, M. A. Maestro, B. Herradón\*  
TÍTULO: Influence of quadrupolar interactions on the crystal packing of organic compounds: the pentafluorophenyl ester of a tricyclic  $\alpha,\beta$ -unsaturated- $\gamma$ -amino acid.  
REF. REVISTA/LIBRO: Journal of Molecular Structure, **2002**, 641, 101-107 CLAVE: A

---

41) AUTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón,\* A. Chana, M. A. Concejero, M. de Frutos, M. J. González.

TÍTULO: Studies on aromatic compounds. Remarkable difference in the molecular electrostatic potential and dipole moment of toxic and non-toxic polychlorinated biphenyls.

REF. REVISTA/LIBRO: Organohalogen Compounds, **2002**, 59, 143-146

CLAVE: A

---

42) AUTOR (ES) (p. o. de firma): J. M. Navas, A. Chana, B. Herradón, H. Segner

TÍTULO: Activation of the aryl hydrocarbon receptor by 1-benzylimidazole: a non-coplanar compound.

REF. REVISTA/LIBRO: Organohalogen Compounds, **2002**, 59, 437-440

CLAVE: A

---

43) AUTOR (ES) (p. o. de firma): E. Mann, A. Montero, M. A. Maestro, B. Herradón.\*

TÍTULO: Synthesis and crystal structure of peptide-2,2'-biphenyl hybrids.

REF. REVISTA/LIBRO: Helvetica Chimica Acta, **2002**, 85, 3624-3638

CLAVE: A

---

44) AUTOR (ES) (p. o. de firma): E. Mann, A. Chana, F. Sánchez-Sancho, C. Puerta, A. García-Merino, B. Herradón.\*

TÍTULO: Novel peptide-heterocycle hybrids: Synthesis and preliminary studies on calpain inhibition

REF. REVISTA/LIBRO: Advanced Synthesis and Catalysis, **2002**, 344, 855-867

CLAVE: A

---

45) AUTOR (ES) (p. o. de firma): A. Chana, M. A. Concejero, M. de Frutos, M. J. González, B. Herradón.\*

TÍTULO: Computational studies on biphenyl derivatives. Analysis of the conformational mobility, molecular electrostatic potential, and dipole moment of chlorinated biphenyls: Searching for the rationalization of the selective toxicity of polychlorinated biphenyls.

REF. REVISTA/LIBRO: Chemical Research in Toxicology, **2002**, 15, 1514-1526

CLAVE: A

---

46) AUTOR (ES) (p. o. de firma): J. M. Navas, A. Chana, B. Herradón, H. Segner

TÍTULO: Induction of CYP1A by 1-benzylimidazole.

REF. REVISTA/LIBRO: Environmental Toxicology and Chemistry, **2003**, 22, 830-836

CLAVE: A

---

47) AUTOR (ES) (p. o. de firma): A. Salgado, E. Mann, F. Sánchez-sancho, B. Herradón.\*

TÍTULO: Synthesis of heterocyclic  $\gamma$ -amino- $\alpha,\beta$ -unsaturated acid derivatives and peptide-heterocycle hybrids.

REF. REVISTA/LIBRO: Heterocycles, **2003**, 60, 57-71

CLAVE: A

---

48) AUTOR (ES) (p. o. de firma): F. Sánchez-Sancho, B. Herradón.\*

TÍTULO: Stereoselective conjugate addition of metallated 2-methylpyridine to functionalized  $\alpha,\beta$ -unsaturated carbonyl compounds.

REF. REVISTA/LIBRO: Heterocycles, **2003**, 60, 1843-1854

CLAVE: A

---

49) AUTOR (ES) (p. o. de firma): P. Bello, N. J. Heaton, A. Chana, J. Jiménez-Barbero, E. Riande, B. Herradón\*

TÍTULO: Influence of arene-arene interactions on the conformation of acyclic molecules: <sup>1</sup>H-NMR and dipole moment experimental results.

REF. REVISTA/LIBRO: Journal Physical Organic Chemistry, **2004**, 17, 71-82. CLAVE: A

---

50) AUTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón,\* A. Chana, M. Alonso, F. Amat-Guerri, M. Liras, M. A. Maestro.

TÍTULO: 8-Aryl substituted boron-dipyrrromethene dyes: crystal structures and computational studies.

REF. REVISTA/LIBRO: Journal of Molecular Structure, **2004**, 697, 29-40 CLAVE: A

---

51) AUTOR (ES) (p. o. de firma): A. Montero, E. Mann, A. Chana, B. Herradón.\*

TÍTULO: Peptide-Biphenyl Hybrids as Calpain Inhibitors.

REF. REVISTA/LIBRO: Chemistry & Biodiversity, **2004**, 1, 442-457 CLAVE: A

---

52) AUTOR (ES) (p. o. de firma): M. A. Concejero, E. Abad, J. Rivera, B. Herradón, M. J. González, M. de Frutos.

TÍTULO: Different retention dioxin-like compounds and organochlorinated insecticides on an immunochromatographic column. Interpretation and applicability.

REF. REVISTA/LIBRO: Journal of Separation Science, **2004**, 27, 1093-1101 CLAVE: A

---

53) AUTOR (ES) (p. o. de firma): A. Montero, M. Alonso, E. Benito, A. Chana, E. Mann, J. M. Navas, B. Herradón.\*

TÍTULO: Studies on Aromatic Compounds: Inhibition of Calpain I by Biphenyl Derivatives and Peptide-Biphenyl Hybrids

REF. REVISTA/LIBRO: Bioorganic Medicinal Chemistry Letters **2004**, 14, 2753-2757 CLAVE: A

---

54) AUTOR (ES) (p. o. de firma): A. Montero, E. Mann, B. Herradón.\*

TÍTULO: Preparation of Sugar Amino Acids Via Claisen-Johnson Rearrangement: Synthesis and Incorporation into Enkephalin Analogues.

REF. REVISTA/LIBRO: European Journal Organic Chemistry **2004**, 3063-3073 CLAVE: A

---

55) AUTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón,\* A. Montero, E. Mann, M. A. Maestro

TÍTULO: Crystallization-Induced Dynamic Resolution and Analysis of the non-Covalent Interactions in the Crystal Packing of Peptide-Biphenyl Hybrids

REF. REVISTA/LIBRO: CrystEngComm **2004**, 6, 512-521 CLAVE: A

---

56) AUTOR (ES) (p. o. de firma): A. Montero, F. Albericio, M. Royo, B. Herradón\*

TÍTULO: Solid-Phase Combinatorial Synthesis of Peptide-Biphenyl Hybrids as Calpain Inhibitors.

REF. REVISTA/LIBRO: Organic Letters **2004**, 6, 4089-4092 CLAVE: A

---

57) AUTOR (ES) (p. o. de firma): J. M. Navas, A. Chana, B. Herradón, H. Segner.  
TÍTULO: Induction of cytochrome P4501A (CYP1A) by clotrimazole, a non-planar aromatic compound. Computational studies on structural features of clotrimazole and related imidazole derivatives.  
REF. REVISTA/LIBRO: Life Science **2004**, *76*, 699-714 CLAVE: A

---

58) AUTOR (ES) (p. o. de firma): A. Montero, E. Mann, B. Herradón\*  
TÍTULO: The Overman Rearrangement in Carbohydrate Chemistry: Stereoselective Synthesis of Functionalized 3-Amino-3,6-dihydro-2*H*-pyrans and Incorporation in Peptide Derivatives.  
REF. REVISTA/LIBRO: Tetrahedron Letters **2005**, *46*, 401-405 CLAVE: A

---

59) AUTOR (ES) (p. o. de firma): M. Babín, S. Casado, A. Chana, B. Herradón, H. Segner, J. V. Tarazona, J. M. Navas.  
TÍTULO: Cytochrome P4501A induction caused by the imidazole derivative Prochloraz in a rainbow trout cell line.  
REF. REVISTA/LIBRO: Toxicology in Vitro **2005**, *19*, 899-902 CLAVE: A

---

60) AUTOR (ES) (p. o. de firma): R. Chicharro, M. Alonso, M. T. Mazo, V. J. Arán, B. Herradón\*  
TÍTULO: Derivatives of 3-sec-Butyl-1-oxo-2,3-dihydroisoquinoline as Inhibitors of  $\mu$ -Calpain.  
REF. REVISTA/LIBRO: ChemMedChem **2006**, *1*, 710-714 CLAVE: A

---

61) AUTOR (ES) (p. o. de firma): S. Casado, M. Alonso, B. Herradón, J. V. Tarazona, J. M. Navas  
TÍTULO: Activation of the aryl hydrocarbon receptor by carbaryl: computational evidence of the ability of carbaryl to assume a planar conformation.  
REF. REVISTA/LIBRO: Environmental Toxicology and Chemistry **2006**, *25*, 3141-3147 CLAVE: A

---

62) AUTOR (ES) (p. o. de firma): A. Montero, F. Albericio, M. Royo, B. Herradón\*  
TÍTULO: Synthesis of a 24-membered cyclic peptide-biphenyl hybrid.  
REF. REVISTA/LIBRO: Eur. J. Org. Chem., **2007**, 1301-1308 CLAVE: A

---

63) AUTOR (ES) (p. o. de firma): M. Alonso, B. Herradón\*  
TÍTULO: Neural Networks as a Tool to Classify Compounds According to Aromaticity Criteria.  
REF. REVISTA/LIBRO: Chemistry-A European Journal, **2007**, *13*, 3913-3923 CLAVE: A

---

64) AUTOR (ES) (p. o. de firma): A. Jos, H. Segner, B. Herradón, G. Repetto, J. M. Navas  
TÍTULO: Induction of EROD activity by 1-phenylimidazole and  $\beta$ -naphthoflavone in rainbow trout cultured hepatocytes: A comparative study.  
REF. REVISTA/LIBRO: Toxicology in Vitro, **2007**, *21*, 1307-1310 CLAVE: A

---

65) AUTOR (ES) (p. o. de firma): M. Alonso, S. Casado, C. Miranda, J. V. Tarazona, J. M. Navas, B. Herradón\*

TÍTULO: Decabromobiphenyl (PBB-209) activates the aryl hydrocarbon receptor while decachlorobiphenyl (PCB-209) is inactive. Experimental evidences and computational rationalization of the different behavior of some halogenated biphenyls.

REF. REVISTA/LIBRO: Chemical Research in Toxicology, **2008**, *21*, 643-658 CLAVE: A

---

66) AUTOR (ES) (p. o. de firma): R. Chicharro, M. Alonso, V. J. Arán, B. Herradón\*

TÍTULO: Studies on calpain inhibitors. Synthesis of partially reduced isoquinoline-1-thione derivatives and conversion to functionalized 1-chloroisoquinolines

REF. REVISTA/LIBRO: Tetrahedron Letters, **2008**, *49*, 2275-2279 CLAVE: A

---

67) AUTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón, M. Alonso, C. Miranda..

TÍTULO: Computational Studies on Peptides and Aromatic Compounds

REF. REVISTA/LIBRO: Díxitos, Novas do Centro de Supercomputación de Galicia, Computational Sciences. **2008**, Julio, 38-40. <http://bit.ly/1aYZ5ld> CLAVE: R

---

68) AUTOR (ES) (p. o. de firma): A. Montero, E. Benito, B. Herradón\*

TÍTULO: Synthesis and applications of a chiral-oxygenated 3-chloro-3,6-dihydro-2Hpyran obtained under Overman rearrangement conditions

REF. REVISTA/LIBRO: Tetrahedron Letters, **2010**, *51*, 277-280 CLAVE: A

---

69) AUTOR (ES) (p. o. de firma): M. Alonso, B. Herradón\*

TÍTULO: A Universal Scale of Aromaticity for  $\pi$ -Organic Compounds

REF. REVISTA/LIBRO: Journal of Computational Chemistry, **2010**, *31*, 917-928 CLAVE: A

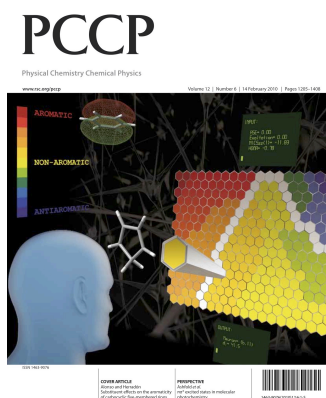
---

70) AUTOR (ES) (p. o. de firma): M. Alonso, B. Herradón\*

TÍTULO: Substituent effects on the aromaticity of carbocyclic five membered rings

REF. REVISTA/LIBRO: Physical Chemistry Chemical Physics, **2010**, *12*, 1305-1317 CLAVE: A

**Fue elegido como “hot article” por el editor de la revista y fue portada de la edición correspondiente.**



71) AUTOR (ES) (p. o. de firma): M. Alonso, R. Chicharro, C. Miranda, V. J. Arán, M. A. Maestro, B. Herradón\*

TÍTULO: X-Ray Diffraction, Solution Structure, and Computational Studies on Derivatives of (3-sec-Butyl-2,3-dihydro-<sup>1</sup>H-isoquinolin-4-ylidene)acetic Acid: Compounds with Activity as Calpain Inhibitors  
REF. REVISTA/LIBRO: Journal of Organic Chemistry, **2010**, 75, 342-352 CLAVE: A

---

72) AUTOR (ES) (p. o. de firma): M. Alonso, B. Herradón\*

TÍTULO: Aromaticidad: un concepto histórico con relevancia actual.  
REF. REVISTA/LIBRO: Anales de Química, **2010**, 106, 173-182 CLAVE: A

---

73) AUTOR (ES) (p. o. de firma): J. J. Vaquero, A. M. Cuadro, B. Herradón

TÍTULO: Chapter 21: Seven-Membered Heterocycles: Azepines, benzo derivatives and related systems.  
REF. REVISTA/LIBRO: Modern Heterocyclic Chemistry (editores: J. Barluenga, J. Álvarez-Builla y J. J. Vaquero), **2010** ISBN: 978-3527312429 CLAVE: CL

---

74) AUTOR (ES) (p. o. de firma): M. L. Fernández-Cruz, A. Valdehita, M. Alonso, E. Mann, B. Herradón, J. M. Navas.

TÍTULO: Biological and chemical studies on aryl hydrocarbon receptor induction by the p53 inhibitor pifithrin- $\alpha$  and its condensation product pifithrin- $\beta$ .  
REF. REVISTA/LIBRO: Life Science, **2011**, 88, 774-783 CLAVE: A

---

75) AUTOR (ES) (p. o. de firma): Y. Pérez, E. Mann, B. Herradón\*

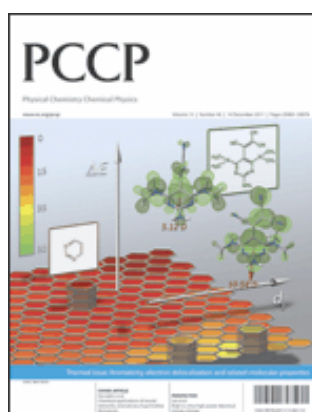
TÍTULO: Preparation and characterization of gold nanoparticles capped by peptide–biphenyl hybrids.  
REF. REVISTA/LIBRO: J. Colloid Interface Sci., **2011**, 359, 443-453 CLAVE: A

---

76) AUTOR (ES) (p. o. de firma): M. Alonso, C. Miranda, N. Martín B. Herradón\*

TÍTULO: Chemical applications of neural networks: aromaticity of pyrimidine derivatives.  
REF. REVISTA/LIBRO: Phys. Chem. Chem. Phys., **2011**, 13, 20564-20574 CLAVE: A

Fue portada de la edición de la revista.



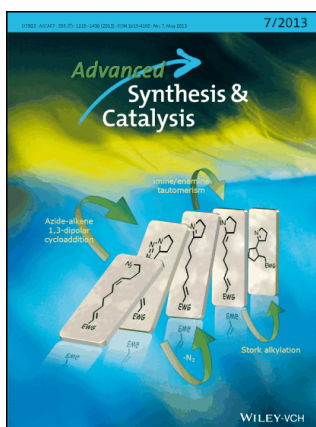


77) AUTOR (ES) (p. o. de firma): I. de Miguel, B. Herradón, E. Mann  
 TÍTULO: Intramolecular Azide-Alkene 1,3 Dipolar Cycloaddition/Enamine Addition(s) Cascade Reaction: Synthesis of Nitrogen Containing Heterocycles.  
 REF. REVISTA/LIBRO: Adv. Synth. Catal. **2012**, 354, 1731-1736 CLAVE: A

78) AUTOR (ES) (p. o. de firma): I. de Miguel, M. Velado, B. Herradón, E. Mann  
 TÍTULO: First Total Synthesis of the Pyrrolizidine Alkaloid Amphorogynine C through Intramolecular Azide-Olefin Cycloaddition.  
 REF. REVISTA/LIBRO: Eur. J. Org. Chem. **2012**, 354, 4347-4356 CLAVE: A

79) AUTOR (ES) (p. o. de firma): I. de Miguel, M. Velado, B. Herradón, E. Mann  
 TÍTULO: Synthesis of Functionalized Bicyclic Imines via Intramolecular Azide-Alkene 1,3-Dipolar Cycloaddition/Intramolecular Stork Alkylation Cascade Reaction.  
 REF. REVISTA/LIBRO: Adv. Synth. Catal. **2013**, 355, 1327-1322 CLAVE: A

Ha sido portada de la revista:



80) AUTOR (ES) (p. o. de firma): M. Connolly, Y. Pérez, E. Mann, B. Herradón, M. L. Fernández-Cruz, J. M. Navas.  
 TÍTULO: Peptide-biphenyl hybrid-capped AuNPs: stability and biocompatibility under cell culture conditions.  
 REF. REVISTA/LIBRO: Nanoscale Res. Lett. **2013**, 8: artículo 315 (21 páginas) CLAVE: A

81) AUTOR (ES) (p. o. de firma): I. de Miguel, B. Herradón, E. Mann, C. del Rio, E. Morales  
 TÍTULO: Gel polymer electrolytes based on thiazolium-based ionic liquids with oligo oxyethylene side chains.  
 REF. REVISTA/LIBRO: enviado (J. Material Chemistry, mayo de 2016) CLAVE: A

82) AUTOR (ES) (p. o. de firma): I. de Miguel, A. Montero, E. Mann, B. Herradón.  
 TÍTULO: Rearrangement in carbohydrate templates in the way to functionalized heterocycles and peptide-scaffold hybrids.  
 REF. REVISTA/LIBRO: Domino and Rearrangement Reactions in Carbohydrate Chemistry (Wiley) **2016**  
 CLAVE: CL

83) AUTOR (ES) (p. o. de firma): A. Montero, I. de Miguel, E. Mann, B. Herradón.

TÍTULO: Unprecedented Oxidative Dehydroxylation of Pyranyl-Derived Primary Homoallylic Alcohols: A Straightforward Route to Chiral Functionalized 6-Alkoxy-5,6-dihydropyran-2-one..

REF. REVISTA/LIBRO: enviado (Eur. J. Org. Chem., mayo de 2016)

CLAVE: A

---

**5. Publicaciones de difusión de la cultura científica, sobre política científica e historia de la ciencia (en revistas)**

- 1) **A Hombros de Gibantes.** B. Herradón, *Principia*, **2015**, # 1.
- 2) **Los avances de la química y su impacto en la sociedad.** L. Moreno-Martínez y B. Herradón, *EduQ* **2014**.
- 3) **Hitos científicos de 2013.** B. Herradón y J. A. López-Guerrero, *Journal of Feelsynapsis* **2014**, nº 14, 30-45.
- 4) **Noticias científicas relevantes.** H. Busto, F. Gomollón-Bell, E. Mann, L. Moreno-Martínez, Y. Pérez-Cortés y B. Herradón, *Anales de Química* **2014**, *110*, 85-90.
- 5) **Toma de posesión de Carmen Nájera como académica de la RACEFyN.** B. Herradón, *Anales de Química* **2014**, *110*, 83-84.
- 6) **La cristalografía en al web.** B. Herradón, *Anales de Química* **2014**, *110*, 80.
- 7) **El misterio de los cristales gigantes (documental).** B. Herradón, *Anales de Química* **2014**, *110*, 79.
- 8) **Editorial.** B. Herradón, *Anales de Química* **2014**, *110*, 4.
- 9) **La química y la alimentación.** B. Herradón y Y. Pérez, *Alkaid. Revista Multitemática*, **2014**, # 18, 32-43. <http://www.bit.ly/SQShFo>.
- 10) **Avances científicos del año 2013.** J. A. López-Guerrero y B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 355-362.
- 11) **Reseña del libro “El ciclo del combustible nuclear” de V. González.** B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 351-352.
- 12) **Reseña de libros: La química en la colección “¿Qué sabemos de?.** B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 350-351.
- 13) **Reseña del libro “Chemistry of natural Products. A Laboratory Handbook” de N. R. Krishnaswamy.** B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 350.
- 14) **Reseña del libro “Chemistry of natural Products. A Unified Approach” de N. R. Krishnaswamy.** B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 349.
- 15) **Noticias científicas relevantes.** F. Gomollón-Bell, E. Mann, J. M. Matxain, L. Moreno-Martínez, Y. Pérez, C. Tomé-López y B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 343-348.
- 16) **La química en la web.** B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 339-342.
- 17) **Video promocional de la cristalografía y del Año Internacional de la Cristalografía.** B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 332.
- 18) **Festival de la cristalografía.** B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 330-331.
- 19) **¡Bibliotuitca química!** L. Moreno y B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 328-329.
- 20) **IV Curso de divulgación “Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad”.** B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 323-324.

- 21) **Editorial.** B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 256.
- 22) **La enseñanza de la ciencia de los nóbel.** B. Herradón, *Investigación y Ciencia* **2013**, nº 444, 8-9. ISSN 0210-136X. <http://bit.ly/1dneKyF>.
- 23) **Noticias científicas relevantes.** H. Busto, F. Gomollón-Bell, J. Klett, E. Mann, Y. Pérez-Cortés, C. Tomé-López y B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 246-250. ISSN: 1575-3417. <http://bit.ly/1g8ZIDF>.
- 24) **¡Una tabla con mucha química!** L. Moreno-Martínez y B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 238-239.
- 25) **Reseña de “Ciencia en Acción”.** B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 237.
- 26) **Editorial.** B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 172.
- 27) **El país que tenemos, ¿es el país que queremos?** B. Herradón, *Journal of Feelsynapsis* **2013**, nº 11, 46-54. ISSN: 2254-3651. <http://jof.feelsynapsis.com/>.
- 28) **Noticias científicas relevantes.** A. Lessarri, E. Mann, Y. Pérez-Cortés, y B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 161-166.
- 29) **La química en la web.** B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 142-143.
- 30) **Editorial.** B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 88.
- 31) **La química y la alimentación.** B. Herradón García, Y. Pérez-Cortés, *Alkaid: revista multitemática* **2013**, nº 18, 32-43. ISSN: 1888-8860. <http://bit.ly/1jxGxNW>.
- 32) **Noticias científicas relevantes.** Y. Pérez-Cortés, E. Mann y B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 77-80.
- 33) **Reseña del III Curso de Divulgación “Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad”.** B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 73.
- 34) **La química en la web.** B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 64-65.
- 35) **Editorial.** B. Herradón, *Anales de Química* **2013**, *109*, 4.
- 36) **La ciencia en 2012. Hitos científicos.** B. Herradón y J. A. López-Guerrero, *Journal of Feelsynapsis* **2013**, # 8, 68-79.
- 37) **La química como herramienta en nanotoxicología.** B. Herradón, Yolanda Pérez, Enrique Mann, *Seguridad y medio ambiente*, **2012**, nº 127, 56-67. ISSN: 1888-5438. <http://bit.ly/Q4p9aY>.
- 38) **Hitos científicos del año 2012.** J. A. López-Guerrero y B. Herradón, *Anales de Química* **2012**, *108*, 376-380.
- 39) **Noticias científicas relevantes.** Y. Pérez-Cortés, E. Mann y B. Herradón, *Anales de Química* **2012**, *108*, 369-375.
- 40) **La química en la web.** B. Herradón, *Anales de Química* **2012**, *108*, 352-355.
- 41) **Editorial.** B. Herradón, *Anales de Química* **2012**, *108*, 288.
- 42) **Lo cotidiano. La prensa y la historia como herramientas en la enseñanza de la química.** B. Herradón, en *Enseñanza y divulgación de la química y la física* (Coord.: Gabriel Pinto Cañón), **2012**, 71-78. ISBN 978-84-15-45224-9. <http://bit.ly/18zuaic>.

- 43) **Noticias científicas relevantes.** Y. Pérez-Cortés, S. Martín-Santamaría y B. Herradón, *Anales de Química* **2012**, *108*, 279-282.
- 44) **La química en la web.** B. Herradón, *Anales de Química* **2012**, *108*, 268-269.
- 45) **Editorial.** B. Herradón, *Anales de Química* **2012**, *108*, 188.
- 46) **Noticias científicas relevantes.** H. Busto, B. Herradón, E. Mann, S. Martín-Santamaría, Y. Pérez-Cortés y M. C. de la Torre, *Anales de Química* **2012**, *108*, 177-182.
- 47) **La química en la web.** B. Herradón, *Anales de Química* **2012**, *108*, 154-155.
- 48) **Editorial.** B. Herradón, *Anales de Química* **2012**, *108*, 88-89.
- 49) **Editorial.** B. Herradón, *Anales de Química* **2012**, *108*, 4.
- 50) **William S. Knowles y la importancia de la síntesis orgánica.** B. Herradón García, *Journal of Feelsynapsis*, **2012**, # 5, 38-44.
- 51) **Dorothy Mary Crowfoot-Hodgkin (1910-1994).** B. Herradón, *SEBBM*, **2012**, nº 171, 33. ISSN: 1696-4837. <http://bit.ly/1g916R8>.
- 52) **¿Quieres saber lo que se ha hecho en el Año Internacional de la Química en España?** B. Herradón García, *Journal of Feelsynapsis*, **2012**, # 3, 126-141.
- 53) **La química: situación actual y perspectivas de futuro.** B. Herradón, *Alkaid. Revista Multitemática*, **2011**, # 13, 16-27. <http://bit.ly/1aYX74m>.
- 54) **Los premios Nobel de Química de 2010 y la química del paladio.** B. Herradón, *Química e Industria*, **2011**, *593*, 28-32. ISSN 0033-6521.
- 55) **La (mala) imagen de la química: Una benefactora de la humanidad.** B. Herradón, en *La imatge de la química. Destapa-la!* **2011**, 19-26. ISBN: 978-84-370-8406-0.
- 56) **La química y las ciencias de la vida.** B. Herradón-G., *SEBBM* **2011**, # 169, 4-6. Es el artículo editorial del *dossier científico* de esa edición de la revista SEBBM. <http://bit.ly/1ehAQTe>.
- 57) **2011: Año Internacional de la Química.** M. Alonso Giner, B. Herradón García, C. Miranda Tejero, M. del Pozo Bayón, C. Mans Teixidó, S. Martínez Ramírez, *Alkaid. Revista Multitemática*, **2011**, # 12, 20-33. <http://bit.ly/18zvKkW>.
- 58) **La química y su relación con otras ciencias.** B. Herradón García, *Journal of Feelsynapsis* **2011**, # 1, 81-86.
- 59) **La química: la ciencia central en el siglo XXI.** B. Herradón García, *Boletín de la Fundación BBVA* **2011**, nº 26, 32. <http://bit.ly/1chkQPR>.
- 60) **Reseña del II edición del Curso de divulgación "Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad".** B. Herradón, *Anales de Química* **2011**, *107*, 198.
- 61) **Reseña de la Jornada de Matemáticas y Química (RSEM-RSEQ, Universidad de Sevilla, 8 de abril de 2011).** B. Herradón, *Anales de Química* **2011**, *107*, 195.
- 62) **¿Qué queremos hacer con la ciencia española?** B. Herradón, J. M. Pérez-Cañadillas, R. J. Carbajo y J. L. Neira. *SEBBM* **2010**, # 164, 28-29. <http://bit.ly/1hbrZH0>.

- 63) **Reseña del I Curso de Divulgación ‘Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad’.**  
B. Herradón, C. Miranda. *Anales de Química* **2009**, 105, 159.

## **5. Libros**

- 1) **Los avances de la química.** Bernardo Herradón García. Libros de la Catarata-CSIC. Enero de 2012. ISBN: 978-84-8319-647-2. Reseñado por Álvaro Martínez del Pozo en la web de Madri+d (<http://bit.ly/QP02tl>).
- 2) **La imatge de la química. Destapa-la!.** Carmen Ramírez de Arellano y Bernardo Herradón-García. Colaborador en los textos del libro-catálogo de la exposición del mismo título. ISBN: 978-84-370-8406-0. 2011.

## **7. Participación en proyectos de I+D financiados en convocatorias públicas en los últimos 10 años**

TÍTULO DEL PROYECTO: Síntesis y estudios estructurales de nuevos peptidomiméticos sobre molde aromático.

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia y Tecnología. Nº Ref BQU2001-2270.

DURACIÓN DESDE: Enero de 2002 HASTA: Diciembre de 2004

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Dr. Bernardo Herradón García.

NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 1 de plantilla y 4 becarios.

FINANCIACIÓN: 62000 €

TÍTULO DEL PROYECTO: Neurodegeneración en la demielinización autoinmune del sistema nervioso central: Papel de las calpains. Inhibición de calpains por híbridos péptido-heterociclo: Síntesis, estructura, actividad biológica..

ENTIDAD FINANCIADORA: Fundación “la Caixa”-Ayudas a la investigación en enfermedades neurodegenerativas. Nº de expediente 02/162-02.

DURACIÓN DESDE: Octubre de 2002 HASTA: Septiembre de 2005

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Dr. Bernardo Herradón García.

NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 1 de plantilla y 5 becarios.

FINANCIACIÓN: 51130 €

TÍTULO DEL PROYECTO: Péptidos y compuestos aromáticos: Síntesis, estructura y propiedades.

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Educación y Ciencia; referencia: CTQ2004-01978.

DURACIÓN DESDE: Diciembre de 2004 HASTA: Diciembre de 2007

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Dr. Bernardo Herradón García.

NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 1 de plantilla y 5 becarios.

FINANCIACIÓN: 46230 €

TÍTULO DEL PROYECTO: Inhibidores de calpaina: Diseño, síntesis, estructura y actividad biológica.

ENTIDAD FINANCIADORA: Comunidad Autónoma de Madrid; referencia: GR/SAL/0652/2004.

DURACIÓN DESDE: Enero de 2005 HASTA: Diciembre de 2005

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Dr. Bernardo Herradón García.

NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 1 de plantilla y 4 becarios.

FINANCIACIÓN: 11500 €

TÍTULO DEL PROYECTO: Proteínas y péptidos alimentarios como antivirales de interés en acuicultura. Caracterización estructural, modificación química y síntesis de proteínas, péptidos y peptidomiméticos con potencial actividad antiviral y/o inmunoestimulante.

ENTIDAD FINANCIADORA: CSIC-Proyecto Intramural de Frontera.

DURACIÓN DESDE: Noviembre de 2005 HASTA: Octubre de 2007

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Dr. Bernardo Herradón García.

NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 1 de plantilla y 4 becarios.

FINANCIACIÓN: 40833 €



**TÍTULO DEL PROYECTO:** Estudios experimentales y computacionales de péptidos y compuestos aromáticos. Síntesis, estructura y propiedades.  
**ENTIDAD FINANCIADORA:** Ministerio de Educación y Ciencia; referencia: CTQ2007-64891/BQU  
**DURACIÓN DESDE:** Octubre de 2007 **HASTA:** Diciembre de 2010  
**INVESTIGADOR PRINCIPAL:** Dr. Bernardo Herradón García.  
**NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES:** 1 de plantilla y 5 becarios.  
**FINANCIACIÓN:** 68970 €

---

**TÍTULO DEL PROYECTO:** Mecanismo molecular de la memoria: Relación con la no-estructuralidad de péptidos y proteínas.  
**ENTIDAD FINANCIADORA:** Ministerio de Educación y Ciencia (Programa EXPLORA); referencia: CTQ2007-28968-E/BQU  
**DURACIÓN DESDE:** Diciembre de 2007 **HASTA:** Enero de 2009  
**INVESTIGADOR PRINCIPAL:** Dr. Bernardo Herradón García.  
**NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES:** 1 de plantilla, 1 contratado Ramón y Cajal y 1 estudiante de 5º de ingeniería química de la UCM.  
**FINANCIACIÓN:** 16000 €

---

**TÍTULO DEL PROYECTO:** Adquisición de un equipo de espectrometría de masas de alta resolución.  
**ENTIDAD FINANCIADORA:** Ministerio de Educación y Ciencia (Modalidad K del Programa de Acciones Complementarias del Plan Nacional de I+D+i); referencia: CTQ2007-28978-E/BQU. Acción especial para la adquisición de equipamiento científico.  
**DURACIÓN DESDE:** Diciembre de 2007 **HASTA:** Noviembre de 2008  
**INVESTIGADOR PRINCIPAL:** Dr. Bernardo Herradón García.  
**NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES:** 23 de plantilla (18 del Instituto de Química Orgánica General y 5 del Instituto de Química Médica.  
**FINANCIACIÓN:** 140000 €

---

**TÍTULO DEL PROYECTO:** Investigación científica dirigida al desarrollo de una nueva generación de alimentos para el control de peso y prevención de la obesidad (PRONAOS).  
**ENTIDAD FINANCIADORA:** Ministerio de Ciencia e Innovación a través del programa para la Creación de Consorcios Estratégicos Nacionales de Investigación Técnica (CENIT).  
**DURACIÓN DESDE:** Diciembre de 2008 **HASTA:** Marzo de 2012  
**INVESTIGADOR PRINCIPAL:** Dr. Bernardo Herradón García.  
**NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES:** 1 de plantilla y 2 becarios.  
**FINANCIACIÓN:** 217158 €

---

**TÍTULO DEL PROYECTO:** Environmental ChemOinformatics (ECO, <http://www.eco-itn.eu/>).  
**ENTIDAD FINANCIADORA:** European Commission. People Work Programme 2008. Initial Training Network (ITN). Grant Agreement # 238701.  
**DURACIÓN DESDE:** Octubre de 2009 **HASTA:** Septiembre de 2013  
**COORDINADOR:** Prof. Igor Tetko (Helmholtz Zentrum München, HZM)  
**COORDINADOR DE LA PARTE ESPAÑOLA:** Dr. Navas (INIA)  
**PARTICIPACIÓN DEL IQOG-CSIC:** Como miembro asociado al grupo del INIA.  
**CARACTERÍSTICAS:** Proyecto para la contratación de estudiantes predoctorales y asociados postdoctorales, codirigidos entre el Dr. Navas y el Dr. Herradón.

---

TÍTULO DEL PROYECTO: Financiación para organizar el II Curso de Divulgación “Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad”.

ENTIDAD FINANCIADORA: CSIC-Subvención para Cursos de Postgrado

CURSO 2010-11

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Dr. Bernardo Herradón García.

FINANCIACIÓN: 2000 €

---

TÍTULO DEL PROYECTO: Impacto medioambiental de nanomateriales.

ENTIDAD FINANCIADORA: Fundación MAPFRE.

DURACIÓN DESDE: Enero de 2011

HASTA: Diciembre de 2011

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Dr. Bernardo Herradón García.

NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 1 de plantilla, 1 profesora de la URJC y 2 becarios.

FINANCIACIÓN: 15000 €

---

TÍTULO DEL PROYECTO: Estudios en heterociclos, péptidos y arenos.

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia e Innovación; referencia: CTQ2010-19295/BQU.

DURACIÓN DESDE: Enero de 2011 HASTA: Octubre de 2014

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Dr. Bernardo Herradón García.

NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 1 de plantilla y 5 becarios.

FINANCIACIÓN: 75020 €

---

TÍTULO DEL PROYECTO: Electrolitos de líquidos iónicos y electrodos basados en coloides porosos como combinaciones avanzadas para baterías seguros con amplio rango de temperatura de trabajo.

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia e Innovación; referencia: MAT2014-54994-R.

DURACIÓN DESDE: Enero de 2015

HASTA: Diciembre de 2017

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Dr. Enrique Morales Bergas.

NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 5'5 de plantilla.

FINANCIACIÓN: 180000 €

---

## **8. Participación en contratos de investigación con empresas**

---

TÍTULO DEL PROYECTO: Aplicación de métodos biocatalíticos en la síntesis de amino azúcares.  
EMPRESA FINANCIADORA: Bioibérica, S. A.  
DURACION DESDE: Mayo de 1998. HASTA: Noviembre de 1998  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Dr. Bernardo Herradón García.  
NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 1 de plantilla.  
CANTIDAD: 1.000.000 de pesetas.

---

TÍTULO DEL PROYECTO: Synthesis of peptide/carbohydrate hybrids.  
EMPRESA FINANCIADORA: Janssen-Cilag, S. A..  
DURACION DESDE: Marzo de 2000. HASTA: Febrero de 2002  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Dr. Bernardo Herradón García.  
NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 1 de plantilla.  
CANTIDAD: 10.000.000 de pesetas.

---

TÍTULO DEL PROYECTO: Synthesis of peptide/carbohydrate hybrids: searching for analgesic compounds.  
EMPRESA FINANCIADORA: Janssen-Cilag, S. A.  
DURACION DESDE: Marzo de 2002 HASTA: Febrero de 2003  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Dr. Bernardo Herradón García.  
NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 1 de plantilla.  
CANTIDAD: 5.000.000 de pesetas.

---

TÍTULO DEL CONTRATO: Fabricación de principios activos farmacéuticos.  
ENTIDAD FINANCIADORA: Empresa FYSE-ERCROS.  
DURACION DESDE: Marzo de 2003 HASTA: Febrero de 2005  
INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dr. Bernardo Herradón García.  
NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: Bernardo Herradón (único en plantilla) y un becario.  
CUANTÍA DEL PROYECTO: 70320 €

---

TÍTULO DEL CONTRATO: Preparación de impurezas de acarbosa.  
ENTIDAD FINANCIADORA: Empresa FYSE-ERCROS.  
ENTIDADES PARTICIPANTES: IQOG, CSIC  
DURACION DESDE: Enero de 2004 HASTA: Junio de 2005  
INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dr. Bernardo Herradón García.  
NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: Bernardo Herradón (único en plantilla) y un becario.  
CUANTÍA DEL PROYECTO: 28606 €

---

TÍTULO DEL CONTRATO: Fabricación de principios activos farmacéuticos: Síntesis de atorvastatina  
ENTIDAD FINANCIADORA: Empresa FYSE-ERCROS.  
DURACION DESDE: Marzo de 2005 HASTA: Febrero de 2006  
INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dr. Bernardo Herradón García.  
NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: Bernardo Herradón (único en plantilla) y un becario.  
CUANTÍA DEL PROYECTO: 45992 €

---

TÍTULO DEL CONTRATO: Financiación para organizar el ciclo de conferencias del Instituto de Química Orgánica General  
ENTIDAD FINANCIADORA: Empresa PRAXAIR  
DURACION DESDE: Enero de 2007 HASTA: Diciembre de 2008  
INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dr. Bernardo Herradón García.  
CUANTÍA DEL CONTRATO: 3000 €

---

TÍTULO DEL CONTRATO: Financiación para organizar el ciclo de conferencias del Instituto de Química Orgánica General  
ENTIDAD FINANCIADORA: Empresa THERMO  
DURACION DESDE: Septiembre de 2007 HASTA: Julio de 2008  
INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dr. Bernardo Herradón García.  
CUANTÍA DEL CONTRATO: 2000 €

---

TÍTULO DEL CONTRATO: Financiación para organizar el primer curso de divulgación “Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad”.  
ENTIDAD FINANCIADORA: Empresa UNGRÍA PATENTES Y MARCAS  
DURACION DESDE: Noviembre de 2008 HASTA: Junio de 2009  
INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dr. Bernardo Herradón García.  
CUANTÍA DEL CONTRATO: 3000 €

---

TÍTULO DEL CONTRATO: Financiación para organizar el primer curso de divulgación “Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad”.  
ENTIDAD FINANCIADORA: Foro Química y Sociedad  
DURACION DESDE: Noviembre de 2008 HASTA: Junio de 2009  
INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dr. Bernardo Herradón García.  
CUANTÍA DEL CONTRATO: 3000 €

---

TÍTULO DEL CONTRATO: Financiación para organizar el primer curso de divulgación “Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad”.  
ENTIDAD FINANCIADORA: OK LAB CIENTÍFICA, S.L  
DURACION DESDE: Noviembre de 2008 HASTA: Junio de 2009  
INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dr. Bernardo Herradón García.  
CUANTÍA DEL CONTRATO: 3000 €

---

TÍTULO DEL CONTRATO: Estudio de exfoliación de grafito.  
ENTIDAD FINANCIADORA: GNANOMAT  
DURACION DESDE: Septiembre de 2015 HASTA: Mayo de 2016  
INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dr. Bernardo Herradón García.  
CUANTÍA DEL CONTRATO: 17.000 €

---

TÍTULO DEL CONTRATO: Financiación para organizar el segundo curso de divulgación “Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad”.  
ENTIDAD FINANCIADORA: Empresa UNGRÍA PATENTES Y MARCAS  
DURACION DESDE: Junio de 2010 HASTA: Febrero de 2011  
INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dr. Bernardo Herradón García.  
CUANTÍA DEL CONTRATO: 1000 €

---

TÍTULO DEL CONTRATO: Financiación para organizar el segundo curso de divulgación “Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad”.  
ENTIDAD FINANCIADORA: Foro Química y Sociedad  
DURACION DESDE: Junio de 2010 HASTA: Febrero de 2011  
INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dr. Bernardo Herradón García.  
CUANTÍA DEL CONTRATO: 1000 €

---

TÍTULO DEL CONTRATO: Financiación para organizar el segundo curso de divulgación “Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad”.  
ENTIDAD FINANCIADORA: Fundación BBVA  
DURACION DESDE: Septiembre de 2010 HASTA: Junio de 2011  
INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dr. Bernardo Herradón García.  
CUANTÍA DEL CONTRATO: 7100 €

---

## 9. Patentes

---

INVENTOR (ES) (p. o. de firma): M. A. Concejero, M. de Frutos, M. J. González, B. Herradón  
TÍTULO: Dispositivo y procedimiento inmunocromatografico para aislar, purificar y concentrar compuestos lipófilos.  
SOLICITUD: Oficina Española de Patentes y Marcas; nº de solicitud: 200001313.  
FECHA DE PRESENTACION: 24 de Mayo de 2000

---

INVENTOR (ES) (p. o. de firma): M. A. Concejero, M. de Frutos, M. J. González, B. Herradón  
TÍTULO: Device and immunochromatographic method for isolating, purifying and concentrating lipophilic compounds: polychlorinated biphenyls (PCBs) and related compounds.  
SOLICITUD PCT: WO 01/90755 A1  
FECHA DE PUBLICACIÓN INTERNACIONAL: 29 de Noviembre de 2001

---

INVENTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón García, E. Benito Cano, A. Chana López, E. Mann Morales, A. Montero Aguado.  
TÍTULO: Inhibidores de calpaina  
SOLICITUD: Oficina Española de Patentes y Marcas; nº de solicitud: 200301125.  
FECHA DE PRESENTACION: 14 de Mayo de 2003

---

INVENTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón García, M. Alonso Giner, E. Benito Cano, A. Chana López, A. Montero Aguado  
TÍTULO: Tioamidas derivadas de bifenilo como inhibidores de calpaina.  
SOLICITUD: Oficina Española de Patentes y Marcas; nº de solicitud: 200401104  
FECHA DE PRESENTACION: 7 de mayo de 2004

---

INVENTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón García, E. Benito Cano, A. Chana López, E. Mann Morales, A. Montero Aguado.  
TÍTULO: Inhibidores de calpaina.  
SOLICITUD PCT: ES2004/070034.  
FECHA DE PUBLICACIÓN INTERNACIONAL: 11 de mayo de 2004

---

INVENTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón García, R. Chicharro Martín, V. Arán Redo, M. Alonso Giner.  
TÍTULO: Derivados de isoquinolina como inhibidores de calpaina.  
SOLICITUD: Oficina Española de Patentes y Marcas; nº de solicitud: 200402995.  
FECHA DE PRESENTACION: 16 de diciembre de 2004

---

INVENTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón García, M. Alonso Giner, E. Benito Cano, A. Chana López, A. Montero Aguado  
TÍTULO: Tioamidas derivadas de bifenilo como inhibidores de calpaina.  
SOLICITUD PCT: ES2005/070058.  
FECHA DE SOLICITUD INTERNACIONAL: 6 de mayo de 2005

---

INVENTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón García, R. Chicharro Martín, V. Arán Redo, M. Alonso Giner.

TÍTULO: Derivados de isoquinolina como inhibidores de calpaina.

SOLICITUD PCT: ES2005/070171.

FECHA DE PRESENTACION: 5 de diciembre de 2005

---

INVENTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón García, R. Chicharro Martín, R. Asensio Rodríguez, F. García Chapinal, M. C. Cruzado Rodríguez..

TÍTULO: Procedimientos para la obtención de dos intermedios avanzados y su uso para la obtención de atorvastatina cálcica amorfa.

SOLICITUD Oficina Española de patentes y marcas. Patente número ES2289945.

FECHA DE PRESENTACION: 21 julio 2006

PUBLICADA: 1 de febrero de 2008

---

INVENTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón García, M. Alonso Giner, E. Benito Cano, A. Chana López, A. Montero Aguado

TÍTULO: Biphenyl derived thioamides as calpain inhibitors

SOLICITUD DE PATENTE EUROPA. Publication number: EP1829864.

FECHA DE SOLICITUD INTERNACIONAL: 5 de noviembre de 2006

---

INVENTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón García, M. Alonso Giner, E. Benito Cano, A. Chana López, A. Montero Aguado

TÍTULO: Biphenyl derived thioamides as calpain inhibitors

SOLICITUD DE PATENTE USA. Publication number: US2007270480

FECHA DE SOLICITUD INTERNACIONAL: 5 de noviembre de 2006

CONCEDIDA EN USA: 13 de enero de 2009

---

INVENTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón García, R. Chicharro Martín, V. Arán Redo, M. Alonso Giner.

TÍTULO: Derivative of isoquinoline as calpain inhibitors.

SOLICITUD DE PATENTE USA. US2008090862.

FECHA DE PRESENTACION: 12 de mayo de 2007.

---

INVENTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón García, R. Chicharro Martín, V. Arán Redo, M. Alonso Giner.

TÍTULO: Derivative of isoquinoline as calpain inhibitors.

SOLICITUD DE PATENTE EN CHINA. CN101128433A.

FECHA DE PRESENTACION: 12 de mayo de 2007

---

INVENTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón García, R. Chicharro Martín, V. Arán Redo, M. Alonso Giner.

TÍTULO: Derivative of isoquinoline as calpain inhibitors.

SOLICITUD DE PATENTE EUROPEA. EP1829864A.

FECHA DE PRESENTACION: 12 de mayo de 2007

---

INVENTOR (ES) (p. o. de firma): B. Herradón García, R. Chicharro Martín, V. Arán Redo, M. Alonso Giner.

TÍTULO: Derivative of isoquinoline as calpain inhibitors.

SOLICITUD DE PATENTE EN JAPÓN. JP2008524170.

FECHA DE PRESENTACION: 12 de mayo de 2007

INVENTOR (ES) (p. o. de firma): I. de Miguel Turrullols, B. Herradón García, E. Mann Morales, E. Morales Berga.

TÍTULO: Líquidos iónicos, Procedimiento de preparación y su uso como electrolitos para dispositivos electroquímicos de almacenamiento de energía.

SOLICITUD DE PATENTE EN ESPAÑA.

FECHA DE PRESENTACION: 26 de abril de 2013

NÚMERO DE SOLICITUD: P201330612

SOLICITUD PCT: ES2014070303.

FECHA DE PRESENTACION: 11 de abril de 2014

NOTA: Una opción de esta patente fue firmada por el CSIC y la empresa *Boulder Ionics Corporation* (<http://boulderionics.com/>) (USA), que ha pagado 5000 € por esta opción. La empresa también se hizo cargo de los costes de solicitud de la PCT (estimados en casi 4000 €). Los detalles de la liquidación se muestran en la siguiente imagen. Debido a este acuerdo, hasta este momento no hemos podido publicar los resultados de esta investigación.



**Patente N.201330612: LIQUIDOS IONICOS, PROCEDIMIENTO DE PREPARACION Y SU USO COMO ELECTROLITOS PARA DISPOSITIVOS ELECTROQUIMICOS DE ALMACENAMIENTO DE ENERGIA**

Datos generales de PII:

N. Solicitud: 201330612	Fecha solicitud: 26/04/2013	Fecha concesión:
Tipo: Nacional	País: España (ES)	
Situación: Trámite	Pat.Prioritaria: ES201330612	Fecha prioridad: 26/04/2013
Titularidad CSIC: 100,00%		

Total gastos: 208,21 €

Total ingresos: 0,00 €

Saldo: -208,21 €

CONTRATOS ASOCIADOS				
20134588	OPCION LICE	VIGENTE	01/10/2013	01/10/2014

Observaciones: .

INVENTORES		
IRENE DE BERNARDO	MIGUEL HERRADON	TURULLOLS GARCIA
ENRIQUE ALEJANDR ENRIQUE	MANN MORALES	MORALES BERGAS

Observaciones:

CENTROS	
Titularidad CSIC: 100,00 %	- INSTITUTO DE QUIMICA ORGANICA GENERAL 100,00 A depurar:



INVENTOR (ES) (p. o. de firma): I. de Miguel Turrullols, B. Herradón García, E. Mann Morales, E. Morales Berga.

TÍTULO: Exfoliación de grafito con disolventes eutécticos profundos.

SOLICITUD DE PATENTE EN ESPAÑA.

FECHA DE PRESENTACION: 24 de septiembre de 2013

NÚMERO DE SOLICITUD: P201331382

SOLICITUD PCT: ES2014/070652

FECHA DE PRESENTACION: 12 de agosto de 2014

NOTA: Esta patente ha sido licenciada por el CSIC a la empresa *Gnanomat* (<http://www.gnanomat.com/>), empresa de base tecnológica, cuyo co-fundador y asesor científico es Bernardo Herradón. La licencia se firmó el 25 de julio de 2014 y la solicitud PCT, a nombre del CSIC, ha sido realizada por *Gnanomat*, que ha asumido los costes.

## CONTRATO DE LICENCIA DE PATENTE

ENTRE

LA AGENCIA ESTATAL CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTIFICAS

Y

GNANOMAT, S.L.

En Madrid, a 25 de julio de 2014

### REUNIDOS

De una parte, D. Emilio Lora-Tamayo D'Ocón, en su calidad de Presidente y en nombre y representación de la Agencia Estatal Consejo Superior de Investigaciones Científicas, con NIF Q2818002D, domiciliada en la calle Serrano 117, 28006 Madrid (en adelante CSIC), constituida según Real Decreto 1730/2007 de 21 de diciembre (BOE de 14 de enero de 2008), en virtud de la competencia que tiene atribuida por el artículo 11.2.e) e i) del Estatuto del CSIC, aprobado por Real Decreto 1730/2007, y según Real Decreto 194/2012, de 13 de enero de 2012, por el que se le nombra Presidente del CSIC.

De otra parte, D<sup>a</sup> Sénida Remedios Cueto Priede con DNI 09356894B, representando en este acto a Gnanomat, S.L. con sede en Calle Peñalara, 5 portal 7 1<sup>a</sup> izquierda en Pozuelo de Alarcón (Madrid) 28224, y CIF B-87069100 (en adelante "GNANOMAT") inscrita en el Registro Mercantil de Madrid en el tomo 32527, folio 149, hoja M-585474 de primera inscripción y de la cual tiene concedido poder suficiente, y de la que es Administrador que le faculta para representar a la empresa.

CSIC y GNANOMAT recibirán en adelante la denominación de la "Parte" por separado y las "Partes" de forma conjunta.

Se reconocen ambas Partes con capacidad legal suficiente y poder bastante para este acto y, a tal efecto

### EXPONEN

I. Que el CSIC es el titular de la solicitud de patente No. ES201331382, con título "Exfoliación de grafito con disolventes eutécticos profundos" presentada el 24 de septiembre de 2013, en la Oficina Española de Patentes y Marcas, y que protege la invención generada por el grupo de investigación dirigido por el Dr. Bernardo Herradón García, empleado del CSIC en su Instituto de Química Orgánica General.

II. Que el Presidente del CSIC, en virtud de la competencia que tiene atribuida por la orden CIN1032/2011 (BOE de 26 de abril de 2011), declara que los derechos transferidos en el presente Contrato no son necesarios para la defensa o mejor protección del interés público, cumpliendo así con el artículo 55.1 de la Ley 2/2011, de 4 de marzo, de Economía Sostenible.

III. Que la transmisión de los derechos transferidos se lleva a cabo mediante adjudicación directa tras

### **10. Creación de empresas de base tecnológica (EBT)**

Socio promotor y co-fundador de la empresa Gnanomat S.L. (<http://www.gnanomat.com/>). La empresa se constituyó el 23 de julio de 2014 ante el notario D. Fernando Sánchez-Arjona Bonilla con nº 4298 e inscrita en el Registro Mercantil de Madrid tomo 32527 folio 149, inscripción 1 con hoja M-585474.

El objetivo de la empresa es la investigación, desarrollo y producción de derivados de grafeno.

Actualmente nos encontramos produciendo material a pequeña escala. También estamos captando capital semilla (llevamos alrededor de 120.000 €), nos han concedido un proyecto para PYMES en el programa HORIZON 2020 de la Unión Europea (50.000 € en la fase inicial) y negociando con otras empresas acuerdos de colaboración.

**11. Estancias en centros extranjeros**

Clave D=doctorado, P=postdoctoral. I= invitado, C=contratado, O=otras (especificar)

CENTRO: Laboratorium für Organische Chemie. E. T. H.  
 LOCALIDAD: Zürich PAIS: Suiza AÑO: 1986-8 DURACION: 27 meses  
 TEMA: Uso de dioxanonas bicíclicas quirales en la síntesis de compuestos enantioméricamente puros (ciclohexanos y ciclopentanos funcionalizados). Síntesis de productos naturales. Oxidaciones asimétricas  
 CLAVE: P

CENTRO: Department of Chemistry  
 LOCALIDAD: Stanford (California) PAIS: Estados Unidos  
 AÑO: 1989 DURACION: 6 meses  
 TEMA: Síntesis estereoselectivas de fluoruros de vinilo. Estudios sintéticos de corticosteroides via ciclación de polienos  
 CLAVE: P

CENTRO: Laboratorium für Organische Chemie. E. T. H.  
 LOCALIDAD: Zürich PAIS: Suiza AÑO: 1989-91 DURACION: 18 meses  
 TEMA: Síntesis de análogos de oligonucleótidos. Síntesis de infraestructuras quirales. Utilización de métodos biocatalíticos en síntesis orgánica. Equivalentes sintéticos del anión mercaptanometilo  
 CLAVE: I

**12. Estancias en centros españoles**

CENTRO: Departamento de Química Orgánica, Universidad de Alcalá de Henares.  
 AÑO: 1980-1 DURACION: 17 meses  
 TEMA: Síntesis y reactividad de heterociclos oxigenados y nitrogenados.  
 MOTIVO: Realización de la tesis de licenciatura.  
 DIRECTORA: Dra. Margarita Quinteiro

CENTRO: Departamento de Química Orgánica, Universidad de Alcalá de Henares.  
 AÑO: 1983 DURACION: 3 meses  
 TEMA: Reactividad de derivados de piridina altamente funcionalizados.  
 MOTIVO: Realización de trabajo experimental.  
 DIRECTORES: Dr. Luis Fuentes, Dr. Juan José Vaquero

CENTRO: Instituto de Química Orgánica General, CSIC  
 AÑO: 1984-1986 DURACION: 33 meses  
 TEMA: Síntesis de compuestos enantioméricamente puros a partir de carbohidratos e hidroxí ácidos. Síntesis de lactosas polioxigenadas naturales y análogos.  
 MOTIVO: Realización de la tesis doctoral.  
 DIRECTORES: Dr. Serafín Valverde

### 13. Congresos

- 1) C. Seoane, J. L. Soto, M. Quinteiro, B. Herradón. **Studies in the chemistry of 2-amino-4H-pyrans**. 8<sup>th</sup> International congress of heterocyclic chemistry. Graz (Austria). **1981**. Comunicación (cartel).
- 2) J. Escudero, B. Herradón, M. Martín-Lomas, S. Valverde. **Ácido tartárico como precursor de moléculas quirales: Síntesis de (2S,3S)-butano-1,2,3-triol**. XX Reunión bienal de la Real Sociedad Española de Química. Castellón (Spain). **1984**, Communication (poster).
- 3) S. Valverde, S. García-Ochoa, B. Herradón, M. Martín-Lomas. **Síntesis enantiomérica de productos naturales a partir de carbohidratos**. XI Reunión bienal del grupo especializado de Química Orgánica. Valladolid (Spain). **1985**. Communication (poster).
- 4) S. Valverde, M. Martín-Lomas, B. Herradón. **Utilización de carbohidratos e hidroxiácidos en la síntesis de compuestos enantioméricamente puros: olguina**. XXI Reunión bienal de la Real Sociedad Española de Química. Santiago de Compostela (Spain). **1986**. Communication (poster).
- 5) B. Herradón, M. Martín-Lomas, R. Rabanal, S. Valverde. **The synthesis of olguine: A model study**. 15<sup>th</sup> IUPAC International Symposium on the Chemistry of Natural Products. The Hague (Netherland). **1986**. Communication (poster).
- 6) J. Zimmermann, B. Herradón, Y. Noda, W. Amberg, D. Seebach. **Chirale 1,3-Dioxan-derivate für die EPC-Synthese**. Schweizerische Chemische Gesellschaft. Herbstversammlung. Bern (Switzerland). **1987**. Communication (oral).
- 7) B. Herradón. **Síntesis de análogos de nucleósidos de cadena ramificada**. V Jornadas de Química Orgánica. Poblet (Spain) **1991**. Communication (oral).
- 8) S. Valverde, A. M. Gómez, A. Hernández, B. Herradón, J. C. López. **A novel strategy for regio and stereocontrol in glycosylation reactions: Template-directed cycloglycosylation of monosaccharides**. EUROCARB VIII. 8<sup>th</sup> European carbohydrate symposium. Sevilla (Spain). **1995**, Communication (oral).
- 9) E. Arroyo, J. Faraldos, A. Morcuende, M. Ors, E. Pérez-Sacau, B. Herradón.\* **Finding novel catalytic activities of enzymes: Acylase as a catalyst for the selective synthesis of esters and amides**. Workshop on novel biocatalysts. Instituto Juan March de Estudios e Investigaciones. Madrid (Spain). **1997**. Short lecture.
- 10) J. Faraldos, E. Mann, A. Morcuende, E. Pérez-Sacau, F. Sánchez-Sancho, B. Wagner, B. Herradón.\* **Acilasa: ¿Un biocatalizador útil para síntesis de amino ácidos, amino alcoholes y péptidos?** VI Encuentro peptídico ibérico. San Lorenzo del Escorial. **1998**. Comunicación oral.
- 11) F. Sánchez-Sancho, J. Faraldos, B. Herradón. **Stereoselective syntheses of piperidine alkaloids using biocatalytically-generated chiral building blocks**. 12<sup>th</sup> International conference on organic synthesis. Venecia (Italia). **1998**. Comunicación (cartel).
- 12) B. Herradón,\* F. Sánchez-Sancho, E. Mann, J. Faraldos. **Aplicación de métodos biocatalíticos en síntesis orgánica**. X Jornadas hispano-francesas de Química Orgánica. Girona. **1998**. Conferencia plenaria.

- 13) E. Fenude, P. Carta, F. Sánchez-Sancho, E. Mann, A. Chana, B. Herradón. **Synthesis and conformational análisis of carbohydrate-peptide hybrids**. First euroconference on carbohydrates in drug design. Cerdeña (Italia). **1999**. Comunicación (cartel).
- 14) B. Herradón, E. Mann, A. Chana, F. Sánchez-Sancho. **Síntesis y estructura de híbridos péptido/heterociclo**. VII Encuentro peptídico ibérico. Valencia. **2000**. Conferencia de cierre de sesión.
- 15) E. Mann, A. Chana, F. Sánchez-Sancho, A. Salgado, B. Herradón. **Design, synthesis and structure of chiral heterocycles and peptide-heterocycle heterocycles**. 3<sup>rd</sup> Spanish Italian symposium on organic chemistry. Benalmádena (Málaga). **2000**. Comunicación (cartel).
- 16) A. Chana, M. A. Concejero, M. de Frutos, M. J. González, B. Herradón.\* **Estudios computacionales de compuestos aromáticos halogenados. Relación estructura-toxicidad**. I reunión nacional sobre dioxinas, furanos y compuestos orgánicos persistentes relacionados. Madrid. **2001**. Comunicación oral.
- 17) A. Montero, E. Mann, A. Chana, B. Herradón.\* **Híbridos péptido-areno**. VIII Encuentro peptídico ibérico. Barcelona. **2002**. Comunicación oral
- 18) B. Herradón, E. Mann, F. Sánchez-Sancho. **Synthesis and structure of chiral polyannular heterocycles and peptide-heterocycle hybrids**. 8<sup>th</sup> IBN SINA international conference on pure and applied heterocyclic chemistry. **2002**. Conferencia invitada.
- 19) J. M. Navas, A. Chana, B. Herradón, H. Segner. **Aryl hydrocarbon receptor activation by a non-coplanar compounds: the imidazole derivatives**. SCOPE/IUPAC International Symposium on Endocrine Active. Yokohama (Japón). **2002**. Cartel.
- 20) B. Herradón. **Estudio de compuestos aromáticos. Síntesis, estructura y dinámica de híbridos péptido-biarilo**. V Semana Científica Antonio González. La Laguna. **2002**. Conferencia plenaria.
- 21) B. Herradón, E. Mann, A. Montero. **Estudio de compuestos aromáticos. Síntesis y estructura de híbridos péptido-areno**. XXIX Reunión bienal de la Real Sociedad Española de Química. Madrid. **2003**. Comunicación oral.
- 22) J. M. Navas, M. Babín, A. Chana, B. Herradón, H. Segner, J. V. Tarazona. **Induction of CYP1A and antiestrogenicity caused by Prochloraz in vitro**. 6th annual meeting of the Japanese Society of Endocrine Disrupters Research. Sendai (Japón). **2003**, Cartel.
- 23) S. Casado, M. Babín, A. Chana, B. Herradón, J. V. Tarazona, J. M. Navas JM. **Cytochrome P4501A induction caused by the imidazole derivative Prochloraz in a rainbow trout cell line**. 5th International Symposium on Fish Endocrinology. Communication (poster).
- 24) M. Alonso, A. Chana, B. Herradón,\* **Studies on Aromatic Compounds: Structural and Computational Studies on 3<sup>a</sup>,4<sup>a</sup>-Diaza-4-bora-s-indacene derivatives**. ESPA 2004. Electronic Structure and Applications. Valladolid. 2004. Communication (poster).
- 25) B. Herradón, A. Montero, E. Mann, M. A. Maestro, **Crystallization-Induced Dynamic Resolution and Analysis of the non-Covalent Interactions in the Crystal Packing of Peptide-Biphenyl Hybrids**. Comunicación presentada a la CECD Nottingham, Octubre, 2004. New Trends in Crystal Engineering, 2<sup>nd</sup> CEC Discussion Meeting. Nottingham. Comunicación oral (por invitación).

- 26) Casado S, Babín M, Chana A, Herradón B, Tarazona JV, Navas JM. **Cytochrome P4501A induction caused by the imidazole derivative Prochloraz in a rainbow trout cell line.** INVITOX 2004. XIIIth Workshop of the European Society of Toxicology In Vitro, 8-11 September 2004, Zegrze, Poland. Cartel.
- 27) Casado S, Babín M, Chana A, Herradón B, Tarazona JV, Navas JM. **Activation of aryl hydrocarbon receptor by imidazole derivatives in cell lines without apparent receptor ligand binding.** SETAC-Europe. 15<sup>th</sup> ANNUAL MEETING 22-26 May, 2005, Lille, France. Cartel. Libro de actas, pp. 277.
- 28) Casado S, Alonso M, Tarazona JV, Herradón, Navas JM. **Binding of carbaryl to the aryl hydrocarbon receptor and activation of xenobiotic responsive elements. Structural features of carbaryl.** 6<sup>o</sup> Congreso Ibérico y 3<sup>o</sup> Iberoamericano de Contaminación y Toxicología Ambiental, 25-28 Septiembre 2005, Cádiz, Spain
- 29) B. Herradón, M. Alonso, R. Chicharro, M. T. Mazo, C. Miranda, A. Montero, V. J. Arán. **Híbridos péptido-molde: Síntesis, estructura y propiedades.** X Encuentro Peptídico Ibérico (EPI). Zaragoza, 1-4 Febrero 2006, Comunicación oral.
- 30) R. Chicharro, M. Alonso, C. Miranda, M. T. Mazo, V. J. Arán, B. Herradón, **Peptide Heterocyclic Hybrids: Synthesis, Structure and Properties.** 4<sup>th</sup> Spanish~Portuguese~Japanes Organic Chemistry Symposium (4SPJ-OCS). Santiago de Compostela (Spain), September 8-11, 2006. Cartel.
- 31) M. Alonso, C. Miranda, A. Montero, B. Herradón, **Experimental and Computacional Studies on Aromatic Compounds: Synthesis, Structure and Properties.** 4<sup>th</sup> Spanish~Portuguese~Japanes Organic Chemistry Symposium (4SPJ-OCS). Santiago de Compostela (Spain), September 8-11, 2006. Conferencia invitada.
- 32) A. Jos, J. M. Navas, M. Alonso, B. Herradón, G. Repetto, H. Segner. **Induction of EROD activity by 1-phenylimidazole and  $\beta$ -naphthoflavone in rainbow trout cultured hepatocytes: A comparative study.** INVITOX 2006. 14<sup>th</sup> International Workshop on in vitro toxicology. Ostende (Belgium), 2-5 October 2006.
- 33) C. Miranda, R. Chicharro, M. Alonso, B. Herradón. **Explorando el espacio conformacional de los híbridos péptido-heterociclo: potentes inhibidores de Calpaína.** IV Escuela de Química teórica de la UIB. Palma de Mallorca, julio de 2007. Comunicación (póster).
- 34) J. Navas, M. Alonso, S. Casado, C. Miranda, B. Herradón, J. Tarazona, **Structural features of ligands of the aryl hydrocarbon receptor: the case of polybrominated biphenyl 209 (PBB209).** SETAC Europe 17<sup>th</sup> Annual Meeting, 20-24 May 2007, Porto, Portugal.
- 35) M. Alonso, C. Miranda, B. Herradón, **Comprendiendo el comportamiento molecular de los híbridos péptido-biarilo, un nuevo tio de inhibidor no-electrófilo de calpaina.** XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química, Toledo (Spain), 9-14 de septiembre 2007. Comunicación (póster).
- 36) M. Alonso, B. Herradón, **Towards a quantitative scale of aromaticity.** XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química, Toledo, 9-14 de septiembre 2007. Conferencia invitada.
- 37) M. Alonso, C. Miranda, M. T. Mazo, V. J. Arán, B. Herradón, R. Chicharro. **Híbridos péptido-**

- heterociclo: Síntesis, estructura y propiedades.** IV Simposium de Investigadores Jóvenes-RSEQ-Sigma-Aldrich. Burgos, 20-22 de noviembre de 2007. Comunicación (póster).
- 38) M. Alonso, B. Herradón. **Quantification of aromaticity through neural networks.** VIII Girona Seminar on Aromaticity: basics and applications. Girona, 7-10 de julio de 2008. Conferencia invitada.
- 39) M. Fernández-Cruz, M. Alonso, B. Herradón, J. M. Navas. **Mechanisms of activation of aryl hydrocarbon receptor by pifithrin .** ALTEX, Alternatives to Animal Experimentation, 7<sup>th</sup> World Congress. Roma, 30 de agosto a 3 de septiembre de 2009. Comunicación (póster).
- 40) C. Miranda, R. Chicharro, E. Fenude, B. Herradón. **Estudio conformacional de la  $\beta$ -casomorfina, un octapéptido con actividad opioide.** VI Simposium de Investigadores Jóvenes-RSEQ-Sigma-Aldrich. Granada, 23-25 de noviembre de 2009. Comunicación oral.
- 41) B. Herradón, M. Alonso. **Una escala universal de aromaticidad.** VI Simposium de Investigadores Jóvenes-RSEQ-Sigma-Aldrich. Granada, 23-25 de noviembre de 2009. Comunicación oral.
- 42) I. de Miguel, B. Herradón, E. Mann. **Síntesis de policiclos nitrogenados mediante reacciones en cascada: cicloadición 1,3 dipolar azida-alqueno/adición de enamina.** XXIII Reunión Bienal de Química Orgánica. Murcia, 16-18 de junio de 2010- Comunicación oral.
- 43) M. L. Fernández-cruz, A. Valdehita, M. Alonso, E. Mann, B. Herradón, J. M. Navas. **Aryl hydrocarbon receptor induction by  $\alpha$ - and  $\beta$ -pifithrin.** XII International Congress of Toxicology (IUTOX). Barcelona, 19-23 de julio de 2010. Comunicación (póster). Publicado en *Toxicology Letters* **2010**, 196S, Abstract P302-030.
- 44) B. Herradón. **Situación actual de la química.** Segundo Simposio Iberoamericano de Química Orgánica (SIBEAQO-II). Santiago de Compostela, 8-12 de septiembre de 2010. Discusión final.
- 45) I. de Miguel, B. Herradón, E. Mann. **Síntesis de policiclos nitrogenados mediante reacción en cascada: cicloadición 1,3 dipolar azida-alqueno/adición de enamina.** XXIII Bienal de la RSEQ. Valencia, 24-28 de julio de 2011. Póster.
- 46) B. Herradón. **La historia, la actualidad y lo cotidiano en la enseñanza de la química.** XXIII Bienal de la RSEQ. Valencia, 24-28 de julio de 2011. Póster.
- 47) M. Connolly, Y. Pérez, E. Mann, B. Herradón, M. L. Fernández-Cruz, J. M. Navas. **Controlled assembly, stability, and toxicological effect on AuNPs capped with peptide-biphenyl hybrid (PBH) ligands.** Nanotoxicology 2012. Beijing (China), 2012. Póster.
- 48) I. de Miguel, M. Velado, B. Herradón, E. Mann. **First total synthesis of pyrrolizidine alkaloid amphoroginine C.** XXIV Reunión Bienal de Química Orgánica. San Sebastián, 11-13 de julio de 2012. Comunicación oral.
- 49) E. Mann, I de Miguel, B. Herradón, C. Del Rio, E. Morales' **Synthesis and characterization of novel thiazolium-based room temperature ionic liquids for supercapacitor applications.** IV Iberian Symposium on Hydrogen, Fuel Cell and Advanced Batteries (HYCELTEC 2013). Estoril (Portugal), 26-28 de junio de 2013. Póster.

- 50) J. M. Navas, T. Lammel, M. Connolly, L. Song, P. Boisseaux, Y. Pérez, B. Herradón, M. L. Fernández-Cruz. **Utilización de líneas celulares de peces como una posible alternativa para el estudio de la toxicidad de nanopartículas.** 9th Iberian and 6th Iberoamerican Congress on Environmental Contamination and Toxicology (CICTA 2013). Valencia, 1-4 de julio de 2013. Póster.
- 51) T. Espinosa, A. Mendoza, M. D. Bermúdez, E. Mann, I. de Miguel, B. Herradón. **New Thiazolium Ionic Liquids in Steel-Ceramic Lubrication.** Lubrication, Maintenance and Tribotechnology-LUBMAT 2014. Manchester (UK), 25-27 de junio de 2014. Paper No. L146032. Comunicación oral.



#### 14. Tesis doctorales dirigidas

---

TITULO: Síntesis y transformaciones selectivas de heterociclos quirales  
DOCTORANDO: Francisco Sánchez-Sancho FECHA: 30 de abril de 1999  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
CALIFICACION: Apto *cum laude* por unanimidad

---

TITULO: Síntesis y estructura de nuevos híbridos péptido-heterociclo y péptido-areno.  
DOCTORANDO: Enrique Mann Morales FECHA: 5 de abril de 2002  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
CALIFICACION: Apto *cum laude* por unanimidad

---

TEMA: Compuestos aromáticos: Estudios computacionales y de actividad biológica.  
DOCTORANDO: Antonio Chana López FECHA: 16 de diciembre de 2003  
UNIVERSIDAD: Complutense de Madrid  
CALIFICACION: Apto *cum laude* por unanimidad

---

TÍTULO: Síntesis, estructura y actividad biológica de híbridos péptido-carbohidrato y péptido-bifenilo.  
DOCTORANDO: Ana Montero Aguado FECHA: 2 de julio de 2004  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
CALIFICACION: Apto *cum laude* por unanimidad

---

TÍTULO: Síntesis, estructura y actividad biológica de heterociclos, híbridos péptido-heterociclo y péptido-carbohidrato.  
DOCTORANDO: Roberto Chicharro Martín FECHA: 9 de enero de 2007  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
CALIFICACION: Apto *cum laude* por unanimidad

---

TÍTULO: Estructura, aromaticidad, inhibición de proteasas y toxicidad de arenos. Estudios computacionales y experimentales.  
DOCTORANDO: Mercedes Alonso Giner FECHA: 11 de julio de 2008  
UNIVERSIDAD: Complutense de Madrid  
CALIFICACION: Apto *cum laude* por unanimidad

---

TÍTULO: Reacción de cicloadición 1,3-dipolar azida-alqueno intramolecular: Aplicaciones en síntesis de heterociclos y productos naturales.  
DOCTORANDO: Irene de Miguel Turullols FECHA: 21 de junio de 2013  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
CALIFICACION: Apto *cum laude* por unanimidad

---

**15. Actividades académicas. Cursos y seminarios impartidos sobre resultados de investigación.**

**1985-6:** Coordinador y ponente del seminario "**Síntesis orgánica: métodos de síntesis de compuestos enantioméricamente puros**" impartido en el Instituto de Química Orgánica General del C. S. I. C..

**1987-8:** Conferenciante en el curso de doctorado "**Estereocontrol en síntesis orgánica**" impartido por el profesor Juan José Vaquero López en la Universidad de Alcalá de Henares. Los títulos de las conferencias fueron:

**"Uso de infraestructuras quirales en síntesis de compuestos enantioméricamente puros".**

**"Síntesis estereoselectiva de C-glicósidos. Parte I".**

**"Síntesis estereoselectiva de C-glicósidos. Parte II".**

**1990-1:** Profesor, junto al Dr. Juan José Vaquero López, del curso de doctorado "**Estrategias en síntesis: control de la estereoquímica absoluta**" en la Universidad de Alcalá de Henares.

**1991-2:** Organizador de los seminarios del Instituto de Química Orgánica General-C. S. I. C..

**1991-2:** Coordinador del seminario "**Síntesis orgánica**" del Instituto de Química Orgánica General-CSIC.

**1991-2:** Profesor del curso de doctorado "**Estrategias en síntesis de productos naturales**" en la Universidad de Alcalá de Henares.

**1992-3:** Profesor, junto al Dr. Juan José Vaquero López, del curso de doctorado "**Estrategias en síntesis: control de la estereoquímica absoluta**" en la Universidad de Alcalá de Henares.

**1994-5:** Profesor del curso de doctorado "**Estrategias en síntesis orgánica: métodos de síntesis de compuestos enantioméricamente puros**" en la Universidad de Alcalá de Henares.

**1994-5:** Profesor Asociado de la Universidad de Alcalá de Henares, impartiendo el curso "**Teoría de las reacciones orgánicas**", del 5º curso de la licenciatura en Ciencias Químicas.

**Febrero de 1995:** Co-examinador de la tesis doctoral "**Dimethylensulfon-verbrückte Desoxyribonukletidanaloga**", del estudiante Jürgen G. Schmidt, de la Escuela Técnica Superior Federal de Zürich (E. T. H.; Diss. E. T. H. Nr. 11022), de la que fuí codirector en sus primeras etapas, durante mi estancia (1989-1991) en la E. T. H..

**Julio de 1995:** Conferenciante en el curso de verano "**Noves metodologies en sintesi orgànica**",

impartido en la Universidad de Girona, explicando el tema "**Biocatalizadores en síntesis orgánica**" (6 horas).

**1995-6:** Profesor del curso de doctorado "**Estrategias en síntesis de productos naturales**" en la Universidad de Alcalá de Henares.

**1995-6:** Profesor del curso de doctorado "**Métodos de síntesis de compuestos enantioméricamente puros**", en la Universidad de Girona.

**1996-7:** Profesor del curso de doctorado "**Estrategias en síntesis orgánica: métodos de síntesis de compuestos enantioméricamente puros**" en la Universidad de Alcalá de Henares.

**1996-7:** Profesor Asociado de la Universidad de Alcalá de Henares.

**1998-9:** Profesor del curso de doctorado "**Estrategias en síntesis orgánica: métodos de síntesis de compuestos enantioméricamente puros**" en la Universidad de Alcalá de Henares.

**1999-2000:** Profesor del "**1<sup>er</sup> curso de alta especialización en Química Orgánica**" impartido en el Instituto de Química Orgánica General del CSIC.

**2000-1:** Profesor del curso de doctorado "**Estrategias en síntesis orgánica: métodos de síntesis de compuestos enantioméricamente puros**" en la Universidad de Alcalá de Henares.

**2000-1:** Profesor en el "**Curso de Especialización en Química Orgánica**", impartido en el Instituto de Química Orgánica General (CSIC).

**2001-2:** Profesor del curso de doctorado "**Estrategias en síntesis orgánica: métodos de síntesis de compuestos enantioméricamente puros**" en la Universidad de Alcalá de Henares.

**Octubre de 2002.** Ponente en la VI Semana científica Antonio González. Universidad de La Laguna. Tema. "**Estudio de compuestos aromáticos: Síntesis, estructura y dinámica de híbridos péptido-biarilo**".

**Cursos 2005-6, 2006-7, 2007-8, 2008-9, 2009-10, 2010-1, 2011-2 y 2012-13.** Profesor del curso interuniversitario de doctorado "**Química Médica**", que ha tenido mención de calidad (<http://www.quimed.org/>). Impartido en las Universidades de Alcalá, CEU-San Pablo y Complutense de Madrid.

**Cursos 2010-1, 2011-2, 2012-3, 2013-4 y 2014-5.** Profesor del Máster Universitario de Química Fina en la Universidad de Alcalá, impartiendo la lección “**Productos Naturales. Clasificación y Aplicaciones**” y lecciones sobre “**Síntesis estereoselectiva**” ([http://www2.uah.es/posgrado\\_quimica/master/](http://www2.uah.es/posgrado_quimica/master/)).

**Cursos 2013-4, 2014-5 y 2015-6.** Profesor del Máster Interuniversitario en Descubrimiento de Fármacos (Universidad de Alcalá, Universidad CEU-San Pablo y Universidad Complutense de Madrid)

He impartido conferencias/seminarios en la Facultad de Química de la Universidad de Barcelona, el Instituto de Investigaciones Química (IIQ-CSIC, Sevilla), el departamento de Farmacología de la Facultad de Medicina (Universidad Autónoma de Madrid), departamento de Química Orgánica y Farmacéutica de la Facultad de Farmacia (Universidad Complutense de Madrid), y en los departamento de Química Orgánica de las Universidades de Alcalá, Valencia, Alicante y Girona, en el instituto de Química Orgánica General (CSIC), en la Universidad de Sassari, y en las empresas SmthKline Beecham, Bioibérica y Janssen-Cilag. En estas conferencias se han expuesto investigaciones de mi grupo. Aparte de éstas, he impartido más de 149 conferencias de carácter divulgativo.

---

**16. Tesis de licenciatura, diplomas de estudios avanzados dirigidos y trabajos experimentales de**

**Máster**

TITULO: Supporting studies towards the synthesis of nucleoside analogues.

ESTUDIANTE: Isabelle Phan

UNIVERSIDAD, FECHA Y TIPO: E.T.H. (Zürich), 1991, Diplom Arbeitet.

---

TITULO: Aplicaciones sintéticas de acilasas. Síntesis enantioselectiva de alcoholes y ésteres.

ESTUDIANTE: Juan Faraldos Serna

UNIVERSIDAD, FECHA Y TIPO: Alcalá de Henares, 1997, tesis de licenciatura.

---

TITULO: Influencia del disolvente en el resultado estereoquímico de la reacción de Wittig de  $\alpha$ -amino aldehidos N-protegidos con iluros estabilizados.

ESTUDIANTE: Enrique Mann Morales

UNIVERSIDAD, FECHA Y TIPO: Autónoma de Madrid, 2000, tesis de licenciatura, y 2001, diploma de estudios avanzados.

---

TITULO: Diseño racional de posibles inhibidores de calpaina. Estudio de conformaciones activas.

ESTUDIANTE: Antonio Chana López

UNIVERSIDAD, FECHA Y TIPO: Complutense, 2001, diploma de estudios avanzados.

---

TITULO: Búsqueda de posibles inhibidores de calpaina.

ESTUDIANTE: César Arenas López

UNIVERSIDAD, FECHA Y TIPO: Complutense, 2001, tesis de licenciatura.

---

TITULO: Síntesis, estructura y dinámica de híbridos péptido-bifenilo.

ESTUDIANTE: Ana Montero Aguado.

UNIVERSIDAD, FECHA Y TIPO: Complutense, 2002, diploma de estudios avanzados.

---

TITULO: Estudios computacionales de compuestos aromáticos.

ESTUDIANTE: Mercedes Alonso Giner.

UNIVERSIDAD, FECHA Y TIPO: Complutense de Madrid, 2005, diploma de estudios avanzados.

---

TITULO: Híbridos péptido-carbohidrato e híbridos péptido-ciclitol.

ESTUDIANTE: Federico Estévez Lacarra.

UNIVERSIDAD, FECHA Y TIPO: Autónoma de Madrid, 2005, diploma de estudios avanzados.

---

TITULO: Síntesis y estructura de híbridos péptido-isoquinolinona.

ESTUDIANTE: M<sup>a</sup> Teresa Mazo Fernández.

UNIVERSIDAD, FECHA Y TIPO: Autónoma de Madrid, 2007, diploma de estudios avanzados.

---

TITULO: Intramolecular Azide-Alkene 1,3 Dipolar Cycloaddition/Enamine Addition(s) Cascade Reaction: Efficient Synthesis of Nitrogenated Polycycles.

ESTUDIANTE: Irene de Miguel Turullols.

UNIVERSIDAD, FECHA Y TIPO: "Trabajo Experimental de Iniciación a la Investigación" del curso interuniversitario "Química Médica" de las universidades de Alcalá, Complutense y San Pablo-CEU. Junio de 2010.

---

TITULO: Métodos de exfoliación de grafito.

ESTUDIANTE: Daniel de la Flor Sánchez.

UNIVERSIDAD, FECHA Y TIPO: "Trabajo Experimental de Iniciación a la Investigación". Desde octubre de 2013. Es un estudiante de grado de Ingeniería Química de la UCM.

---

### **17. Asistencia editorial en revistas científicas y editor de revistas científicas**

Regularmente evalúo artículos científicos enviados a las revistas *Chemistry, an European Journal*, *Tetrahedron: Asymmetry*, *The Journal of Organic Chemistry*, *Organic Letters*, *Journal of Molecular Catalysis B: Enzymatic*, *Journal of Organometallic Chemistry*, *Journal of the American Chemical Society*, *European Journal of Organic Chemistry*, *Advanced Synthesis and Catalysis*, *Journal of Molecular Structure*, *Heteroatom Chemistry*, *Synlett*, *Biocatalysis and Biotransformations*, *The Open Natural Products Journal*, *Environmental Health and Perspectives*, *Chemical Research in Toxicology* y *Environmental Science and Technology*.

Soy miembro del Comité Editorial de *The Open Natural Products Journal* (Editorial Bentham, <http://benthamopen.com/tonpj/EBM.htm>).

Soy editor asociado de la revista *Biocatalysis and Biotransformations* (Editorial Informa, <http://informahealthcare.com/page/bab/EditorialAdvisoryBoard>).

He sido editor general de la revista *Anales de Química* (RSEQ) entre enero de 2012 y marzo de 2014.

---

### **18. Participación en comisiones**

He participado en alrededor de 30 tribunales de tesis doctorales, en tres tribunales de oposición en el CSIC, en cuatro comisiones evaluadoras de proyectos del MCyT y en una comisión evaluadora del MICINN. He evaluado proyectos para la ANEP, la Comunidad de Madrid, el CSIC (Proyectos Intramurales de Frontera) y la Comunidad Valenciana.

---

### **19. Componente ordinario de productividad por actividad prestada (quinquenios)**

Hasta el momento se me han concedido cinco *tramos* (todos los solicitados hasta ahora), que son 1980-1987 (tramo inicial), 1988-1992, 1993-1997, 1998-2002, 2003-2007 y 2008-2012.

---

### **20. Evaluación de la actividad investigadora (sexenios)**

Hasta el momento se me han evaluado positivamente cinco *tramos* (todos los solicitados hasta ahora), que son 1985-1990, 1991-1996, 1997-2002, 2003-2008 y 2009-2014.

---

## **21. Otras tareas en el instituto de Química Orgánica General**

- He sido el responsable de la biblioteca durante 7 años (1991-1998).
  - He sido representante de personal durante 6 años (1994-1998 y 2004-2006).
  - Desde el 1 de junio de 2008 al 31 de mayo de 2010, fui Presidente de la Junta del Centro de Química Orgánica “Manuel Lora-Tamayo”, siendo el responsable de coordinar y dirigir la elaboración de su plan estratégico y de su reglamento de régimen interno
  - Del 30 de octubre de 2006 al 22 de noviembre de 2010, he sido Director del Instituto de Química Orgánica General (IQOG) del CSIC. Además de las tareas de dirección, en el IQOG he formado parte de las siguientes comisiones:
    - Coordinador de la comisión de conferencias y seminarios.
    - Coordinador de la comisión de Personal Investigador en Formación.
    - Miembro de la comisión de Equipamiento e Infraestructura.
    - Coordinador de la comisión de Biblioteca.
    - Miembro de la comisión de Informática y Página Web.
    - Coordinador de la comisión de Divulgación.
  - He dirigido y coordinado la elaboración del Plan Estratégico 2010-2013 del Instituto de Química Orgánica General.
  - Como director del Instituto de Química Orgánica General he dirigido la elaboración de las normas de seguridad del mismo y soy el responsable de su Plan de Autoprotección.
  - Como presidente de la junta del CENQUIOR he sido el responsable de su Plan de Autoprotección; y he sido miembro del Comité de Seguridad y Salud del CSIC.
- 

## **22. Becas y otras menciones.**

He sido becario predoctoral (1984-1986) y postdoctoral (1987-1988) de FPI del Ministerio de Educación y Ciencia.

He sido becario de intercambio entre el CSIC y el Instituto Politécnico de Zürich (ETH) (1986-1988)

He sido becario postdoctoral del CSIC (1989).

La investigación de mi grupo ha sido seleccionada por J. Elguero en el artículo “Ciencia y Tecnología: Química orgánica” en la “Enciclopedia de la España del siglo XXI”. Editorial Biblioteca Nueva, Volumen IV, 2009. En el artículo se describe el trabajo de 50 grupos de químicos orgánicos españoles (<http://are.iqm.csic.es/conferences/61.pdf>).

---



### 23. Tareas de divulgación y difusión de la Cultura Científica

Desde 2007 he estado intensamente implicado en tareas de divulgación científica, participando en más de 700 actividades distintas (sin contar los *posts* que escribo para las páginas web que administro). Algunos datos (artículos en revistas y libros) se han indicado en los apartados 5 y 6 de este CV. A continuación se resumen el resto de actividades (sólo los datos numéricos). La información detallada de todas las actividades se puede encontrar en <http://bit.ly/1gCBznG>.

#### Listado de los tipos de actividades realizadas

- Dos libros de divulgación
- Exposiciones de divulgación de la ciencia: comisario científico en una y colaborador en otras tres.
- Colaboración en un documental científico (<http://bit.ly/vaXJSc>).
- Alrededor de 170 conferencias de difusión de la ciencia
- Director y ponente en las cinco ediciones del curso de divulgación ‘*Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad*’. En total se han celebrado 138 conferencias y mesas redondas con más de 7.000 asistentes y más de 10.000 visionados a través de los videos de la web. Toda la información del curso se puede encontrar en <http://www.losavancesdelaquimica.com/>



- ◆ El curso constará de 17 conferencias y dos mesas redondas.
- ◆ Se celebrará los jueves a las 18:00 en el salón de actos del Centro de Química Orgánica "Lora Tamayo" (CENQUIOR-CSIC).
- ◆ Algunas sesiones del curso se retransmitirán por streaming (<http://bit.ly/1P6VrQ1>)



- Ponente en 16 mesas redondas
- Actividades educativas diversas: jornadas científicas, talleres, estancias y anfitrión de estudiantes de enseñanza preuniversitaria.
- Páginas web, blogs y redes sociales: administrador de cuatro páginas web y blogs, y de diversas páginas en Facebook de divulgación científica (*Todo es Química-2012; Química; Festival de la Cristalografía; Enseñanza, Historia, Filosofía y Divulgación de la Química*). También puse en marcha las actividades de la RSEQ en las Redes Sociales (Facebook y Twitter). En total se han publicado más de 1000 *posts* en las webs/blogs y más de 1000 *mini-posts* en los sitios de divulgación en Facebook.
- Diez artículos en INTERNET en webs distintas a las que gestiono.
- 62 artículos en revistas sobre cultura científica, política científica e historia de la ciencia.
- Actividad editorial: editor de *Anales de Química* y de *Biocatalysis and Biotransformations*. También formo parte de consejos editoriales de publicaciones del CSIC y he editado un número monográfico de la revista de la *SEBBM*.
- Alrededor de una veintena de participaciones en ferias de ciencia y visitas guiadas.
- Otras tareas de difusión de la cultura científica (jurado de concursos de divulgación, consejero del Foro Química y Sociedad, miembro de comités científicos de diversos congresos y reuniones) y actividades en sociedades científicas (especialmente de la RSEQ, de la que he sido miembro de su junta durante tres años, siendo editor general y, desde 2011, soy el Tesorero de la RSEQ-STM).
- He sido organizador de las conferencias y seminarios del Instituto de Química Orgánica General (IQOG-CSIC). Como director del IQOG-CSIC me encargué de organizarlos directamente; así como diversas jornadas científicas, cursos y seminarios (de investigadores en formación), con más de 120 actividades.
- Más de 250 participaciones en radio y cuatro en televisión
- Alrededor de 50 intervenciones en prensa, bien en forma de entrevista o participando en reportajes.