

Parte A. DATOS PERSONALES

Fecha del CVA	11-03-2021
----------------------	------------

Nombre y apellidos	Bernardo Herradón García		
DNI/NIE/pasaporte		Edad	
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	K-5722-2014	
	Código Orcid	0000-0003-1179-884X	

A.1. Situación profesional actual

Organismo	Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)		
Dpto./Centro	Instituto Química Orgánica General (IQOG)		
Dirección	C/ Juan de la Cierva 3		
Teléfono	correo electrónico	b.herradon@csic.es	
Categoría profesional	Investigador Científico	Fecha inicio	01/02/1989
Espec. cód. UNESCO	2306, 2306.10, 2306.18		
Palabras clave	Química Orgánica, Péptidos, Materiales, Computacional, Baterías		

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

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Ldo. Cc. Químicas	Complutense de Madrid	1980
Dr. Cc. Químicas	Complutense de Madrid	1986

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

Número de sexenios de investigación: 5 (todos los solicitados)

Fecha del último concedido: 2009-2014

Número de sexenios de transferencia: 1 (hasta 2019)

Número de tesis doctorales dirigidas en los últimos 10 años: 1

Citas totales: 2036

Promedio de citas/año durante los últimos 5 años (sin incluir el año actual): 74

Publicaciones totales en primer cuartil (Q1): 60

Índice h: 26

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

Doctor en Ciencias Químicas (UCM, 1986). Actualmente es Investigador Científico en el Instituto de Química Orgánica General (IQOG) del CSIC, del que fue Director entre 2006 y 2010. Ha investigado en la Universidad de Alcalá, ETH-Zürich y Stanford University. Sus temas de investigación actuales abarcan un amplio rango de la química, incluyendo la síntesis orgánica, compuestos bioactivos, estructura e interacciones de compuestos aromáticos y péptidos, toxicología computacional, materiales nanoestructurados (preparación, caracterización y propiedades), uso de líquidos iónicos para electrolitos de baterías y condensadores, y *composites* de grafeno. Previamente investigó en el uso de biocatalizadores en síntesis orgánica, transposiciones sigmatrópicas, heterociclos, nucleósidos, carbohidratos y productos naturales.

Su labor científica y divulgativa ha quedado plasmada en más de 180 publicaciones: alrededor de 100 describiendo investigación original y unas 80 en historia de la ciencia, divulgación científica, educación y política científica. Ha dirigido siete tesis doctorales, investigador principal en 27 proyectos de investigación (nacionales, autonómicos, fundaciones, europeos y empresas privadas) y siete patentes extendidas como PCTs, patentes europeas, USA (la mayoría de ellas) y en otros 11 países, constituyendo en total 28 solicitudes de patentes. Una de estas patentes ha dado lugar a la creación de una empresa de base tecnológica (*Gnanomat*, ver más abajo) y otra fue objeto de una opción de compra por la empresa *Boulder Ionics*. Como fruto de su labor investigadora reciente, en julio de 2014 fundó la empresa de base tecnológica *Gnanomat*, dedicada a la investigación y producción de grafeno y derivados. Es autor del libro *Los Avances de la Química* (Libros de la Catarata-CSIC, 2011) y coautor del libro-catálogo *La imatge de la química. Destapa-la!* (2011; ISBN: 978-84-370-8406-0).

Desde 2006 está implicado en tareas de divulgación científica, habiendo participado en más de 1000 actividades, siendo uno de sus objetivos principales la difusión de la cultura científica

entre estudiantes de ESO y Bachillerato. Dirige el curso de divulgación *Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad* y es el comisario científico de la exposición *Entre Moléculas* elaborada en el CSIC para conmemorar el *Año Internacional de la Química* (ver más abajo).

Ha sido presidente de la Sección Territorial de Madrid de la RSEQ y presidente de la Sección Técnica de Enseñanza de ANQUE-Madrid. En 2016 fue galardonado con la *Placa de Honor de la Asociación Española de Científicos* (AEC) y la *Medalla de Oro y Brillante* de la Asociación de Químicos de Madrid (AQM).

El CV completo de Bernardo Herradón se puede descargar en <https://educacionquimica.wordpress.com/about/>.

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (ordenados por tipología)

C.1. Publicaciones

Se indican una variedad de publicaciones que reflejan los diversos temas de investigación en los que ha estado implicado en los últimos años.

AUTORES/AS: J. F. Vélez, M. B. Vázquez-Santos, J. M. Amarilla, B. Herradón, E. Mann, C. del Río, E. Morales.

AÑO: 2019

TÍTULO: Geminal pyrrolidinium and piperidinium dicationic ionic liquid electrolytes. Synthesis, characterization and cell performance in LiMn₂O₄ rechargeable lithium.

REVISTA: *Journal of Power Source* **2019**, 439, 227098.

Se describe la síntesis, caracterización estructural y propiedades electroquímicas de una variedad de líquidos iónicos basados en derivados de imidazol, así como su potencial uso como electrolitos para baterías.

AUTORES/AS: I. de Miguel, E. Morales, B. Herradón, C. del Río, E. Mann.

AÑO: 2016

TÍTULO: Synthesis and characterization of oligo(oxyethylene)-functionalized thiazolium based room temperature ionic liquids.

REVISTA: *Tetrahedron Letters* **2016**, 57, 3291-3293.

Se describe la síntesis y caracterización estructural de una serie de sales de tiazolinio con propiedades como líquidos iónicos y aplicaciones como electrolitos para baterías.

AUTORES/AS: Irene de Miguel; Marina Velado; Bernardo Herradón; Enrique Mann

AÑO: 2013

TÍTULO: Synthesis of Functionalized Bicyclic Imines via Intramolecular Azide-Alkene 1,3-Dipolar Cycloaddition/Intramolecular Stork Alkylation Cascade

REVISTA: *Advanced Synthesis and Catalysis* **2013**, 355, 1237-1242.

En este artículo se describe la síntesis de diferentes iminas bicíclicas de elevada complejidad estructural, empleando para su preparación un proceso en cascada consistente en una cicloadición 1,3-dipolar entre azidas y alquenos y la posterior reacción de las enaminas resultantes con grupos electrófilos convenientemente situados. Fue portada de la revista.

AUTORES/AS: Irene de Miguel; Bernardo Herradón; Enrique Mann

AÑO: 2013

TÍTULO: Azide-Alkene 1,3-Dipolar Cycloaddition/Enamine Addition(s) Cascade Reaction: Synthesis of Nitrogen-Containing Heterocycles.

REVISTA: *Advanced Synthesis and Catalysis* **2012**, 354, 1731-1736.

Se describen los primeros resultados del grupo relacionados con el desarrollo metodológico de un nuevo proceso sintético en cascada basado en cicloadiciones 1,3-dipolares entre azidas y alquenos que permite acceder de una manera rápida y directa a una gran variedad de estructuras heterocíclicas nitrogenadas de elevada complejidad estructural.

AUTORES/AS: Mercedes Alonso, Carlos Miranda, Nazario Martín, Bernardo Herradón

AÑO: 2011

TÍTULO: Chemical applications of neural networks: aromaticity of pyrimidine

REVISTA: *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2011**, 13, 20564-20574

En este artículo aplicamos la metodología computacional previamente desarrollada en nuestro grupo al estudio de la influencia de los sustituyentes sobre la aromaticidad de derivados de pirimidina, compuestos de alto interés biológico y tecnológico. Los resultados se

correlacionaron con la naturaleza del sustituyente. El artículo fue seleccionado como portada de la revista.

AUTORES/AS: Yolanda Pérez, Enrique Mann and Bernardo Herradón

AÑO: 2011

TÍTULO: Preparation and characterization of gold nanoparticles capped by peptide–biphenyl hybrids

REVISTA: *Journal of Colloid and Interface Science*, **2011**, 359, 443-453.

En este artículo se describe la preparación de nanoparticulas de oro estabilizadas mediante interacciones de diversa naturaleza (enlaces de hidrógeno, interacciones areno-areno) con híbridos péptido-bifenilo. En posteriores investigaciones, realizamos estudios de toxicidad.

AUTORES/AS: Mercedes Alonso, Roberto Chicharro, Carlos Miranda, Vicente J. Arán, Miguel A. Maestro, B. Herradón

AÑO: 2010

TÍTULO: X-Ray Diffraction, Solution Structure, and Computational Studies on Derivatives of (3-sec-Butyl-2,3-dihydro-1H-isoquinolin-4-ylidene)acetic Acid: Compounds with Activity as Calpain Inhibitors.

REVISTA: *Journal of Organic Chemistry* **2010**, 75, 342-352

En esta publicación se hace un estudio completo de la estructura de una serie de derivados isoquinolinas que son potentes inhibidores de la proteasa calpaina. A partir de la combinación de datos estructurales y experimentales fuimos capaces de obtener correlaciones estructura-actividad y proponer un mecanismo de acción biológica.

AUTORES/AS: Mercedes Alonso, Bernardo Herradón

AÑO: 2010

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

REVISTA: *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2010**, 13, 1305-1317

En este artículo describimos el primer estudio completo del efecto de los sustituyentes sobre la aromaticidad de derivados del anión, el catión y la especie neutra del ciclopentadieno. Para ello usamos el método descrito previamente en nuestro grupo, basado en redes neuronales, que nos permiten cuantificar la aromaticidad y la antiaromaticidad, siendo la primera vez que esta propiedad se cuantifica. Fue portada de la revista.

AUTORES/AS: Mercedes Alonso, Bernardo Herradón

AÑO: 2010

TÍTULO: Neural Networks as a Tool to Classify Compounds According to Aromaticity Criteria

REVISTA: *Chemistry-A European Journal* **2007**, 13, 3913-3923.

Se describe por primera vez un método para clasificar compuestos orgánicos basados en su aromaticidad usando redes neuronales. Una ventaja del método, apuntada en esta publicación, es que se podría usar para cuantificar la aromaticidad, un fenómeno multidimensional difícil de cuantificar. Estas ideas se desarrollaron en posteriores publicaciones, algunas de las cuales se relacionan en este documento.

C.2. Proyectos

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:** Junio de 2018

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Enrique Morales

FINANCIACIÓN: 180.000 €

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: Bernardo Herradón

FINANCIACIÓN: 75.020 €

TÍTULO DEL PROYECTO: Impacto medioambiental de nanomateriales.

ENTIDAD FINANCIADORA: Fundación MAPFRE.

DURACIÓN DESDE: Enero de 2011 **HASTA:** Diciembre de 2011

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Bernardo Herradón

FINANCIACIÓN: 15.000 €

C.3. Contratos

TÍTULO DEL CONTRATO: Desarrollo de principios activos farmacéuticos. Síntesis de atorvastatina. Preparación de impurezas de acarbosa (tres contratos)

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIADORA: FYSE-ERCROS

DURACIÓN DESDE: Marzo-2003 **HASTA:** Febrero-2006

INVESTIGADOR/A RESPONSABLE: Bernardo Herradón

CUANTÍA DEL CONTRATO: 144918 €

C.4. Patentes

INVENTORES: Irene de Miguel, Enrique Morales, Bernardo Herradón y Enrique Mann

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

PCT/ES2014/070303

FECHA DE PUBLICACION: 11 de Abril de 2014

ESTADO: La empresa *Boulder Ionics* ha ejercido una opción sobre la patente, haciéndose cargo de los gastos de presentación de la PCT y abonando adicionalmente 5000 € al CSIC.

INVENTORES: Irene de Miguel, Bernardo Herradón, Enrique Morales y Enrique Mann

TÍTULO: *Exfoliación de grafito con disolventes eutécticos profundos*

PCT/ES2014/070652

ESTADO: Licencia a Gnanomat S.L. con fecha 25 de Julio de 2014. Extendida a 11 países (en 2016 y 2017)

C.5. Empresas de base tecnológica

Socio promotor y co-fundador de la empresa Gnanomat S.L. Constituida 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

Firmado contrato de licencia exclusiva de la patente PCT/ES2014/070652 con el CSIC el 25 de julio de 2014.

C.6, Tareas divulgación

Participación en más de 1.000 actividades de divulgación. En la web <https://educacionquimica.wordpress.com/> se pueden encontrar los detalles de las actividades. Esta actividad divulgativa ha sido financiada por seis proyectos de entidades privadas y uno público.

A continuación, se listan el tipo de actividades y el número de cada una de ellas.

- Autor de un libro de divulgación y coautor de un libro-catálogo de una exposición.
- Comisario científico de una exposición y colaborador en tres más.
- Colaboración en el guion de un documental científico.
- Más de 250 conferencias de difusión de la ciencia.
- Director y ponente de las seis ediciones del cursos de divulgación *Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad*.
- Ponente en más de 15 mesas redondas.
- Actividades educativas: talleres para niños de 7-9 años, visitas guiadas a instalaciones del IQOG, colaboración en asignaturas de ESO y bachillerato, tutor de estancias de estudiantes de bachillerato en el IQOG-CSIC, organización de conferencias y seminarios en el IQOG-CSIC.
- Gestiona las siguientes cinco páginas web y blogs de divulgación, así como cinco grupos de Facebook y una página de Facebook.
- Más de 70 artículos en INTERNET en webs distintas a las que gestiono
- Alrededor de 70 artículos en revistas de divulgación científica e historia de la ciencia
- Actividad editorial: editor de *Anales de Química* (2012-2014), editor de *Biocatalysis and Biotransformations* (desde 2011), miembro de consejos editoriales de *Qué sabemos de* (Libros de la Catarata-CSIC), entre otros.
- Expositor en cuatro ferias de ciencia.
- Jurado en una decena de concursos de divulgación científica.
- Más de 270 intervenciones en radio y televisión y más de 40 colaboraciones con prensa escrita (INTERNET y papel).