



Tesis defendidas durante el curso académico 2017-2018

Autor: Elena Alonso Giner

Título: Adiciones y cicloadiciones a carbenos de Fischer conjugados del grupo 6 y reacciones secuenciales sobre metalociclos de Ir (III)

Directores: María del Mar Gómez Gallego y Miguel Ángel Sierra Rodríguez

Fecha de defensa: 11-04-2018

Calificación: Sobresaliente cum laude

Centro: Facultad de Ciencias Químicas (UCM)

Becas/contratos obtenidos: Contrato Personal de apoyo a la investigación (PAI)

Publicaciones: [1] *Triazole vs Triazolium Carbene Ligands in the Site-Selective Cyclometallation of o-Carboranes by M(III) (M=Ir,Rh) Complexes*, Frutos, M.; Gómez-Gallego, M.; Giner, E. A.; Sierra, M. A. *Dalton Trans.* **2018**, 47, 9975. [2] *Sequential Reactions of Alkynes on an Iridium(III) Single Site*, Giner, E. A.; Gómez-Gallego, M.; Merinero, A. D.; Casarrubios, L.; Ramírez de Arellano, C.; Sierra, M. A. *Chem. Eur. J.* **2017**, 23, 8941. [3] *Effect of a κ_1 -Bonded-M-1,2,3-triazole (M = Co, Ru) on the Structure and Reactivity of Group 6 Alkoxy (Fischer) Carbenes*, Giner, E. A.; Gómez-Gallego, M.; Casarrubios, L.; de la Torre, M. C.; Ramírez de Arellano, C.; Sierra, M. A. *Inorg. Chem.* **2017**, 56, 2801. [4] *An Entry to Mixed NHC-Fischer Carbene Complexes and Zwitterionic Group 6 Metal Alkenyls*, Sierra, M. A.; Merinero, A. D.; Giner, E. A.; Gómez-Gallego, M.; Ramírez de Arellano, C. *Chem. Eur. J.* **2016**, 22, 13521. [5] *Mono- and Bimetallic Zwitterionic Cr(0) and W(0) Metal Allenyls*, Giner, E. A.; Santiago, A.; Gómez-Gallego, M.; Ramírez de Arellano, C.; Poulten, R. C.; Whittlesey, M. K. Sierra, M. A. *Inorg. Chem.* **2015**, 54, 5450.

Autor: Yago Garcia-Rodeja Navarro

Título: Entendiendo la reactividad de los hidrocarburos policíclicos aromáticos y compuestos relacionados

Director: Israel Fernández López

Fecha de defensa: 12-03-2018

Calificación: Sobresaliente cum laude (**Mención Doctor Internacional**)

Centro: Facultad de Ciencias Químicas (UCM)

Becas/contratos obtenidos: Contrato predoctoral de Formación de Personal Investigador (FPI)

Publicaciones: [1] *Impact of C=C/B-N Replacement on the Diels-Alder Reactivity of Curved Polycyclic Aromatic Hydrocarbons*, García-Rodeja, Y.; Fernández, I. *Chem. Eur. J.* **2019**, 25, 9771. [2] *Factors Controlling the Reactivity of Strained-Alkyne Embedded Cycloparaphenylenes*, Garcia-Rodeja, Y.; Fernandez, I. *J. Org. Chem.* **2019**, 84, 4330. [3] *Influence of the charge on the reactivity of azafullerenes*, Garcia-Rodeja, Y.; Solà, M.; Fernandez, I. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2018**, 20, 28011. [4] *Rationalizing the Regioselectivity of the Diels-Alder Biscycloaddition of Fullerenes*, García-Rodeja, Y.; Solà, M.; Fernández, I. *J. Org. Chem.* **2018**, 83, 3285. [5] *Factors Governing the Diels-Alder Reactivity of (2,7)Pyrenophanes*, García-Rodeja, Y.; Fernández, I. *J. Org. Chem.* **2017**, 82, 8157. [6] *Understanding the Reactivity of Ion-Encapsulated Fullerenes*, García-Rodeja, Y.; Solà, M.; Bickelhaupt, F. M.; Fernández, I. *Chem. Eur. J.* **2017**, 23, 11030. [7] *Influence of the Transition-Metal Fragment on the Reactivity of Metallaanthracenes*, García-Rodeja, Y.;



Fernández, I. *Chem. Eur. J.* **2017**, *23*, 6634. [8] *Understanding the Effect of α -Cationic Phosphines and Group 15 Analogues on π -Acid Catalysis*, García-Rodeja, Y.; Fernández, I. *Organometallics* **2017**, *36*, 460. [9] *Predicting and Understanding the Reactivity of Aza[60]fullerenes*, García-Rodeja, Y.; Fernández, I. *J. Org. Chem.* **2017**, *82*, 754. [10] *Exploring Partners for the Domino α -Arylation/Michael Addition Reaction Leading to Tetrahydroisoquinolines*, Solé, D.; Pérez-Janer, F.; García-Rodeja, Y.; Fernández, I. *Eur. J. Org. Chem.* **2017**, 799. [11] *Factors Controlling the Reactivity and Selectivity of the Diels–Alder Reactions Involving 1,2-Azaborines*, García-Rodeja, Y.; Fernández, I. *J. Org. Chem.* **2016**, *81*, 6554. [12] *Reactivity and Selectivity of Bowl-Shaped Polycyclic Aromatic Hydrocarbons: Relationship to C_{60}* , García-Rodeja, Y.; Solà, M.; Bickelhaupt, M. F.; Fernández, I. *Chem. Eur. J.* **2016**, *22*, 1368. [13] *Understanding the Oxidative Addition of σ -Bonds to Group 13 Compounds*, García-Rodeja, Y.; Bickelhaupt, M. F.; Fernández, I. *Chem. Eur. J.* **2016**, *22*, 13669. [14] *Understanding the Reactivity of Planar Polycyclic Aromatic Hydrocarbons: Towards the Graphene Limit*, García-Rodeja, Y.; Solà, M.; Fernández, I. *Chem. Eur. J.* **2016**, *22*, 10572.

Autor: Javier Sastre Martínez

Título: Reconocimiento molecular basado en técnicas en RMN

Directores: Francisco Javier Cañada Vicinay y Jesús Jiménez Barbero

Fecha de defensa: 21-12-2017

Calificación: Sobresaliente cum laude (**Mención Doctor Internacional**)

Centro: Facultad de Ciencias Químicas (UCM). Centro de Investigaciones Biológicas (CIB-CSIC)

Becas/contratos obtenidos: Contrato predoctoral de Formación de Personal Investigador (FPI)

Publicaciones: [1] *Insights into real-time chemical processes in a calcium sensor protein-directed dynamic library*, Canal-Martín, A.; Sastre, J.; Sánchez-Barrena, M. J.; Canales, A.; Baldominos, S.; Pascual, N.; Martínez-González, L.; Molero, D.; Fernández-Valle, M. E.; Sáez, E.; Blanco-Gabella, P.; Gómez-Rubio, E.; Martín-Santamaría, S.; Sáiz, A.; Mansilla, A.; Cañada, F. J.; Jiménez-Barbero, J.; Martínez, A.; Pérez-Fernández, R. *Nat. Commun.* **2019**, *10*, 2798. [2] *Deciphering the Inhibition of the Neuronal Calcium Sensor 1 and the Guanine Exchange Factor Ric8a with a Small Phenothiazine Molecule for the Rational Generation of Therapeutic Synapse Function Regulators*, Roca, C.; Martínez-González, L.; Daniel-Mozo, M.; Sastre, J.; Infantes, L.; Mansilla, A.; Chaves-Sanjuan, A.; González-Rubio, J. M.; Gil, C.; Cañada, F. J.; Martínez, A.; Sánchez-Barrena, M. J.; Campillo, N. E. *J. Med. Chem.* **2018**, *61*, 5910. [3] *Hidden α -helical propensity segments within disordered regions of the transcriptional activator CHOP*, Canales, A.; Rösinger, M.; Sastre, J.; Felli, I. C.; Jiménez-Barbero, J.; Giménez-Gallego, G.; Fernández-Tornero, C. *Plos ONE* **2017**, e0189171. [4] *Structural Insights into the Binding of Sugar Receptors (Lectins) to a Synthetic Tricyclic Tn Mimetic and Its Glycopeptide Version*, Ardá, A.; Bosco, R.; Sastre, J.; Cañada, F. J.; André, S.; Gabius, H. J.; Richichi, B.; Jiménez-Barbero, J.; Nativi, C. *Eur. J. Org. Chem.* **2015**, 6823.
