

|                                      |                          |                      |            |
|--------------------------------------|--------------------------|----------------------|------------|
| <b>Parte A. DATOS PERSONALES</b>     |                          | <b>Fecha del CVA</b> | 18/09/2023 |
| Nombre y apellidos                   | ANA MARÍA RUBIO CAPARRÓS |                      |            |
| DNI/NIE/pasaporte                    | [REDACTED]               | Edad                 | [REDACTED] |
| Núm. identificación del investigador | Researcher ID            | H-3498-2015          |            |
|                                      | Código Orcid             | 0000-0003-0439-7271  |            |

### A.1. Situación profesional actual

|                       |                                                                                                         |                    |                                                      |
|-----------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------|------------------------------------------------------|
| Organismo             | UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID                                                                       |                    |                                                      |
| Dpto./Centro          | Dep. QUÍMICA FÍSICA / FACULTAD DE CC. QUÍMICAS                                                          |                    |                                                      |
| Dirección             | Avda. Complutense s/n                                                                                   |                    |                                                      |
| Teléfono              | [REDACTED]                                                                                              | correo electrónico | <a href="mailto:amrubioc@ucm.es">amrubioc@ucm.es</a> |
| Categoría profesional | CATEDRÁTICO DE UNIVERSIDAD                                                                              | Fecha inicio       | Junio / 2019                                         |
| Área de Conocimiento  | QUÍMICA FÍSICA                                                                                          |                    |                                                      |
| Espec. cód. UNESCO    | 2304(230404,230406,230408,230409,230412,230422) – 2307 - 2210(221021, 221025,221033,221090              |                    |                                                      |
| Palabras clave        | Simulación, polímeros, nuevos materiales, nanocompuestos, disoluciones, fundido, interfaces, proteínas. |                    |                                                      |

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

| Licenciatura/Grado/Doctorado | Universidad                                    | Año  |
|------------------------------|------------------------------------------------|------|
| Licenciatura en CC. Químicas | Univ. Complutense de Madrid (UCM)              | 1981 |
| Doctor en CC. Químicas,      | Univ. Nacional de Educación a Distancia (UNED) | 1987 |

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

#### Sexenios de investigación reconocidos: 5

Trabajos Fin de Grado dirigidos (TFG) en los últimos 10 años: 12

Prácticas en empresas dirigidas en los últimos 10 años: 11

Capítulos de libro: 1

Total de artículos publicados: 53

Total de artículos citados: 46

Artículos en el 1º cuartil (Q1): 44 (83%)

Citas totales: 557

Promedio de citas por artículo: 9,87

Índice h: 14

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

Toda mi carrera científica se ha centrado en el estudio por simulación de conformaciones de sistemas complejos: polímeros sintéticos y biopolímeros.

A lo largo de los años he ido evolucionando implementando numerosos códigos informáticos de diseño propio que abordan el estudio de sus diferentes propiedades estáticas y dinámicas de interés científico, industrial y biomédico. He estudiado aspectos estructurales (tamaño, forma), propiedades de transporte (difusión, viscosidad), aspectos energéticos (diseño de potenciales de interacción), propiedades termodinámicas (capacidad calorífica, solubilidad, temperatura  $\theta$ ), propiedades elásticas (fuerza-elongación, peso molecular entre nudos de red, módulo de Young), diagramas de fases de compatibilidad entre polímeros, disoluciones concentradas cercanas al comportamiento del fundido, modos y tiempos de relajación de los materiales y leyes de escala del comportamiento universal de los polímeros.

Los sistemas analizados también los he ido seleccionando en función de los más demandados socialmente en cada momento, aumentando en complejidad: homopolímeros y copolímeros, polímeros lineales, cíclicos, en forma de estrella, secuencias de proteínas y

nanocompuestos de dendrímeros. Para ello ha sido necesario también poner a punto códigos informáticos que modelen una a una estas diferentes estructuras. Tengo amplia experiencia en modelos en el continuo, tanto atomísticos como de grano grueso, y en red para el estudio en disolución diluida y muy concentrada, incluso en fundido. En los últimos años he desarrollado una metodología de investigación híbrida aunando las ventajas que me ofrece el software comercial (Materials Studio, Gromacs) para el modelado molecular y los códigos de programación propios para diseñar el comportamiento del sistema polimérico (Monte Carlo dinámico). Hemos sido pioneros en esta manera de explorar los nanocompuestos dendrímeros. En los últimos dos años he iniciado una nueva línea de investigación: polímeros confinados en interfases, modelizando desde el confinamiento suave hasta el extremo.

Soy coautora de 52 trabajos científicos y la calidad de las investigaciones realizadas queda avalada por su publicación, siempre en revistas de alto índice de impacto, muchas dentro del área de la Química Física de Polímeros y otras en Biopolímeros. Es de destacar que en la mayor parte de mis investigaciones nos hemos involucrado sólo 2-3 coautores. He colaborado con grupos nacionales como el del Dr. Arturo Horta y Juan J. Freire de la Facultad de Ciencias Experimentales de la UNED, el Dr. José García de la Torre de la Facultad de Química de Murcia, y grupos internacionales como el de Marvin Bishop del Manhattan College de Nueva York y Julian H.R. Clarke del Institute of Science and Technology de Manchester, así como con varios investigadores extranjeros que han venido a hacer su estancia postdoctoral en nuestro grupo de investigación en la UCM, y alumnos de Licenciatura y Grado que han realizado sus trabajos fin de Licenciatura y Grado. En la mayoría de las publicaciones antes mencionadas, soy el primer autor, lo que indica que he desempeñado un papel importante en el diseño, gestión y desarrollo de los algoritmos de simulación utilizados en estas investigaciones, así como en la elaboración de las publicaciones.

Cada año, desde el inicio de mi carrera, he colaborado con los mencionados anteriormente y otros colectivos en Proyectos Competitivos de I+D+i, tanto nacionales como europeos (30 en total). Mi experiencia como investigador me ha permitido contribuir a la formación académica de los futuros investigadores impartiendo clases en Programas de Doctorado Interuniversitarios (cinco universidades) de Calidad Acreditada, actuando como Coordinadora General UCM (para el Programa de Doctorado MATPOL, 2004-2010) y actualmente en el Máster de Ciencia y Tecnología Químicas de la UCM. He hecho un gran esfuerzo para apoyar el desarrollo de la investigación entre mis estudiantes. Específicamente en los últimos 5 años, he dirigido de 12 Trabajos Fin de Grado y 10 Trabajos de Prácticas en Empresas. Cofundadora en 2005 del grupo de investigación UCM-CAM "Simulación de sistemas complejos y proteínas" y actualmente miembro del grupo de investigación UCM consolidado "Sistemas Complejos: Coloides, Polímeros e Interfases" (UCM Ref: 910591).

He formado parte de 23 Tribunales de Tesis Doctorales, soy evaluadora habitual de Tesis Doctorales, miembro del Comité de la RESQ de premios de Tesis Doctorales de la CAM y desde hace 7 años vocal de la UCM en el Comité de la Materia Química para preparar las pruebas de acceso a la Universidad, EvAU, así como Presidenta del Tribunal Evaluador. Desde junio 2018 Vicedecana de Innovación y Calidad de la Docencia de la Facultad de CC. Químicas de la UCM.

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

### C.1. Publicaciones

1. Eduardo Guzmán, Laura Fernández-Peña, Gustavo S. Luengo, **Ana María Rubio**, Antonio Rey, *Self-consistent mean field calculations of polyelectrolyte-surfactant*

*mixtures in solution and upon adsorption onto negatively charged surfaces*, **Polymers**, 2020, 12(3), 624-16. [doi.org/10.3390/polym12030624](https://doi.org/10.3390/polym12030624)

2. **Ana M. Rubio**, A. Rey, *Design of a structure-based model for protein folding from flexible conformations*, **PCCP**, 2019, 21, 6544-6552. [doi.org/10.1039/c9cp00168a](https://doi.org/10.1039/c9cp00168a)
3. J. J. Freire, **Ana M. Rubio**, *Binary intermolecular potential and scattering curves of PAMAM-EDA dendrimers*, **Macromol.Theory and Simul.**, 2018, 27, 1800004-1, 1800004-8. [doi.org/10.1002/mats.201800004](https://doi.org/10.1002/mats.201800004)
4. J.J. Freire, **A.M. Rubio**, and C.McBride, “*Calculation of conformational properties and Rouse relaxation times of PAMAM-EDA under different pH conditions*”, **Macromol. Theory Simul**, 2016, 25, 403-412. [doi.org/10.1002/mats.201600012](https://doi.org/10.1002/mats.201600012)
5. J.J. Freire, **A.M. Rubio**, and C.McBride, *Cover Picture*. **Macromol. Theory Simul.** 2016, 24(5), 538-538.
6. J.J. Freire, **A.M. Rubio**, and C.McBride, “*Coarse-grained and atomistic simulations for G=4 PAMAM-EDA dendrimer*”, **Macromol Theory Simul.** 2015, 24, 432-439. [doi.org/10.1002/mats.201500028](https://doi.org/10.1002/mats.201500028)
7. **A.M. Rubio**, C.C. McBride and J.J. Freire, “*Binary interactions between dendrimer molecules. A simulation study*”, **Macromolecules**, 2014, 47, 5379-5387. [doi.org/10.1021/ma501127f](https://doi.org/10.1021/ma501127f)
8. J.J. Freire and **A.M. Rubio** “*Conformational properties and Rouse dynamics of different dendrimer molecules*”, **Polymer**, 2008, 49, 2762-2769. [doi.org/10.1016/j.polymer.2008.04.024](https://doi.org/10.1016/j.polymer.2008.04.024)
9. **A.M. Rubio**, G. Álvarez and J. J. Freire “*Intramolecular distances and form factor of cyclic chains with excluded volume interactions*”, **Polymer**, 2008, 49, 628-634. [doi.org/10.1016/j.polymer.2007.12.004](https://doi.org/10.1016/j.polymer.2007.12.004)
10. J. Freire and **A.M. Rubio**, “*Problems of Chemical Physics, Chapter 10*”, **Delta Publicaciones**, 2007, 655-722, Spain, ISBN: 84-96477-48-7.
11. J.J. Freire, Esteban Rodríguez and **A.M. Rubio** “*Monte Carlo calculations for the intrinsic viscosity of several dendrimer molecules*”, **J. Chem. Phys.**, 2005, 123, 154901-154915. [doi.org/10.1063/1.2056546](https://doi.org/10.1063/1.2056546)
12. D. de Sancho, L. Prieto, **A. M. Rubio** and A. Rey, “*Evolutionary method for the assembly of rigid protein fragments*”, **J. Comput. Chem**, 2005, 26, 131-141. [doi.org/10.1002/jcc.20150](https://doi.org/10.1002/jcc.20150)
13. **A.M. Rubio** and J.J. Freire, “*Monte Carlo calculation of second virial coefficients for linear and star chains in a good solvent*”, **Macromolecules**, 1996, 29, 6946-6951. [doi.org/10.1021/ma960346n](https://doi.org/10.1021/ma960346n)

---

## C.2. Proyectos

1. *Título del proyecto*: Ciencia y Aplicaciones Tecnológicas de Estructuras Supramoleculares mediadas por Interfases (CATESMI). PID2019-106557GB-C21  
*Entidad financiadora*: **Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades**  
*Entidades participantes*: UCM, Universidad de Almería,  
*Duración*: desde: 01/10/2020 hasta: 31/10/2023 *Cuantía de la subvención*: 65.000,00

*Investigador responsable:* Dr. Francisco Ortega Gómez y Dr. Antonio Rey Gayo.

*Participación:* Investigador

*Número de investigadores participantes:* 9

---

2. *Título del proyecto:* Propiedades de nuevos sistemas nanoestructurados de importancia tecnológica. New Nano Tech. CTQ2016-78895-R

*Entidad financiadora:* **Ministerio de Economía y Competitividad**

*Entidades participantes:* UCM, Universidad de Salamanca,

*Duración:* desde: 01/10/2016 hasta: 31/10/2019 *Cuantía de la subvención:* 111.000,00

*Investigador responsable:* Dr. Ramón González Rubio y Dr. Antonio Rey Gayo.

*Participación:* Investigador

*Número de investigadores participantes:* 9

---

3. *Título del proyecto:* Polímeros en medios iónicos complejos: líquidos iónicos y cristales iónicos. CTQ2010-16414

*Entidad financiadora:* **Ministerio de Economía y Competitividad**

*Entidades participantes:* UNED y UCM

*Duración:* desde: 01/01/2011 hasta: 31/12/2014 *Cuantía de la subvención:* 118.580,00

*Investigador responsable:* Dra. Inés Fernández de Piérola

*Participación:* Investigador

*Número de investigadores participantes:* 9

---

4. *Título del proyecto:* Química a Alta Presión. QUIMAPRES. S2009/PPQ /1551

*Entidad financiadora:* **Comunidad de Madrid (CAM)**

*Entidades participantes:* UCM

*Duración:* desde: 01/01/2010 hasta: 31/12/2014 *Cuantía de la subvención:* 893.300,00

*Investigador responsable:* Dr. Antonio Rey (UCM-SIMPOL); Dr. Valentín García Baonza

*Participación:* Investigador

*Número de investigadores participantes:* 4 en el grupo UCM-SIMPOL

---

5. *Título del proyecto:* Simulación de Sistemas Poliméricos Complejos y Proteínas. Grupo de investigación 910068. Convocatoria GR74/07

*Entidad financiadora:* **Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación, UCM- CAM**

*Entidades participantes:* UCM y UNED

*Duración:* desde: 01/01/2008 hasta: 31/12/2008 *Cuantía de la subvención:* 4.000,00

*Investigador responsable:* Dr. Antonio Rey Gayo

*Participación:* Investigador

*Número de investigadores participantes:* 7

---

6. *Título del proyecto:* Simulación Molecular de la Estructura y Dinámica en Mezclas de Polímeros con Distintas Arquitecturas. CTQ2006-06446/BQU

*Entidad financiadora:* **Ministerio de Educación y Ciencia**

*Entidades participantes:* UNED

*Duración:* desde: 01/10/2006 hasta: 30/09/2009 *Cuantía de la subvención:* 43.560,00

*Investigador responsable:* Dr. Juan J. Freire Gómez

*Participación:* Investigador

*Número de investigadores participantes:* 4

---

7. *Título del proyecto:* Simulación del Plegamiento y Agregación de Proteínas globulares.

*Entidad financiadora:* **Proyecto de Investigación Complutense, UCM**

*Entidades participantes:* UCM

*Duración:* desde: 01/01/2006 hasta: 31/12/2006 *Cuantía de la subvención:* 7.000,00

*Investigador responsable:* Dr. Antonio Rey Gayo

*Participación:* Investigador

Número de investigadores participantes: 4

### **C.5 DIRECCIÓN DE TESIS DE LICENCIATURA / PROYECTOS FIN DE CARRERA / TRABAJOS FIN DE GRADO (últimos 10 años)**

1. Silvia Alonso Martínez. UCM. Fac. de CC. Químicas. Septiembre 2011. Sobresaliente
2. Nerea Arévalo Martín. UCM. Fac. de CC. Químicas. Septiembre 2012. Sobresaliente.
3. Belén Cantó Martorell. UCM. Fac. de CC. Químicas. Septiembre 2012. Sobresaliente.
4. Lidia Matas Viñarás. UCM. Fac. de CC. Químicas. Julio 2013. Notable.
5. Javier Sancho Franco. UCM. Fac. de CC. Químicas. Septiembre 2013. Sobresaliente.
6. Sara Cañizares Bartolomé. UCM. Fac. de CC. Químicas. Julio 2014. Sobresaliente.
7. Nuria Gíl Riaguas. UCM. Facultad de CC. Químicas. Septiembre 2014. Sobresaliente.
8. Diego Moreno Buendía. UCM. Fac. de CC Físicas. Septiembre 2016. Notable.
9. Patricia Viana Peláez. UCM. Facultad de CC. Químicas. Julio 2018. Notable.
10. Sergio Aparicio Álvaro. UCM. Fac. de CC Físicas. Septiembre 2018. Notable.
11. Marianela Gómez Toledo. UCM. Fac. de CC. Químicas. Junio 2019. M. de Honor
12. Beatrice Elena Boghiu. UCM. Fac. de CC. Químicas. Junio 2020. Sobresaliente.

### **C.6 FORMACIÓN DE INVESTIGADORES. TERCER CICLO Y MÁSTER**

**1. Coordinadora en la UCM del curso de Doctorado Interuniversitario** “Materiales Poliméricos, MATPOL”. Cursos 2004-2010 hasta su extinción. Mención de Calidad. Universidades participantes: UCM, UNED, Murcia, Politécnica de Valencia y del País Vasco. Impartido en la Facultad de CC. Químicas de la UCM.

**2. Profesora del Doctorado en Ciencias Químicas**, Fac. CC. Químicas, UCM, 1997-2010

**3. Profesora del Máster de Ciencia y Tecnología Química**, Fac. CC. Químicas UCM, 2010-actualidad.

### **C.7 PARTICIPACIÓN EN TAREAS DE EVALUACIÓN**

1. Miembro de **Tribunales de Tesis Doctorales, Presidenta/Secretaria**: 23 tribunales
2. **Jurado del premio a la Mejor Tesis Doctoral en Química** (2012-2013) de la CAM. RSEQ. Abril 2014.

### **C.8 PARTICIPACIÓN EN LAS PRUEBAS DE ACCESO A LA UNIVERSIDAD: PAU/EvAU**

1. **Vocal** de la UCM en la **Comisión de materia Química** para preparar las Pruebas de Acceso a la Universidad en la Comunidad de Madrid, 2015-actualidad.
2. **Presidenta de Tribunales evaluadores** EvAU en Madrid, 2015-actualidad.

### **C.9 COMISIÓN ORGANIZADORA DEL GRADO Y EL MÁSTER EN INGENIERÍA DE MATERIALES EN LA UCM**

1. **Representante** de la Facultad de Químicas de la UCM en la Comisión que ha elaborado el Grado de Ingeniería de Materiales que se implantó en 2010-2011
2. **Representante** de la Facultad de Químicas de la UCM en la Comisión que estuvo elaborando el Máster de Ingeniería de Materiales.

### **C.10 DESEMPEÑO CARGOS GESTIÓN EN LA UNIVERIDAD**

1. **Vicedecana de Innovación y Calidad de la Docencia**, Fac. CC. Químicas, UCM 2018-actualidad.



**INSTRUCCIONES PARA RELLENAR EL CVA**

**AVISO IMPORTANTE**

En virtud del artículo 11 de la convocatoria **NO SE ACEPTARÁ NI SERÁ SUBSANABLE EL CURRÍCULUM ABREVIADO** que no se presente en este formato.

Este documento está preparado para que pueda rellenarse en el formato establecido como obligatorio en las convocatorias (artículo 11.7.a): letra Times New Roman o Arial de un tamaño mínimo de 11 puntos; márgenes laterales de 2,5 cm; márgenes superior e inferior de 1,5 cm; y espaciado mínimo sencillo.

La extensión máxima del documento (apartados A, B y C) no puede sobrepasar las 4 páginas.

**Parte A. DATOS PERSONALES**

**Researcher ID** (RID) es una comunidad basada en la web que hace visibles las publicaciones de autores que participan en ella. Los usuarios reciben un número de identificación personal estable (RID) que sirve para las búsquedas en la Web of Science. Los usuarios disponen de un perfil donde integrar sus temas de investigación, sus publicaciones y sus citas.

Acceso: Web of Science > Mis herramientas > Researcher ID

**Código ORCID** es un identificador compuesto por 16 dígitos que permite a los investigadores disponer de un código de autor inequívoco que les permite distinguir claramente su producción científico-técnica. De esta manera se evitan confusiones relacionadas con la autoría de actividades de investigación llevadas a cabo por investigadores diferentes con nombres personales coincidentes o semejantes.

Acceso: [www.orcid.org](http://www.orcid.org)

Si no tiene Researcher ID o código ORCID, no rellene estos apartados.

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

Se incluirá información sobre el número de sexenios de investigación y la fecha del último concedido, número de tesis doctorales dirigidas en los últimos 10 años, citas totales, promedio de citas/año durante los últimos 5 años (sin incluir el año actual), publicaciones totales en primer cuartil (Q1), índice h. Adicionalmente, se podrán incluir otros indicadores que el investigador considere pertinentes.

Para calcular estos valores, se utilizarán por defecto los datos recogidos en la Web of Science de Thomson Reuters. Cuando esto no sea posible, se podrán utilizar otros indicadores, especificando la base de datos de referencia.

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

Describa brevemente su trayectoria científica, los principales logros científico-técnicos obtenidos, los intereses y objetivos científico-técnicos a medio/largo plazo de su línea de investigación. Indique también otros aspectos o peculiaridades que considere de importancia para comprender su trayectoria.

Si lo considera conveniente, en este apartado se puede incluir *el mismo resumen* del CV que se incluya en la solicitud, teniendo en cuenta que este resumen solo se utilizará para el proceso de evaluación de este proyecto, mientras que el que se incluye en la solicitud podrá ser difundido.

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

Teniendo en cuenta las limitaciones de espacio, detalle los méritos más relevantes ordenados por la tipología que mejor se adapte a su perfil científico. Los méritos aportados deben describirse de una forma concreta y detallada, evitando ambigüedades.

Los méritos aportados se pondrán en orden cronológico inverso dentro de cada apartado. Salvo en casos de especial importancia para valorar su CV, se incluirán únicamente los méritos de los últimos 10 años.

### **C.1. Publicaciones**

Incluya una reseña completa de las 5-10 publicaciones más relevantes.

Si es un artículo, incluya autores por orden de firma, año de publicación, título del artículo, nombre de la revista, volumen: pág. inicial-pág. final.

Si se trata de un libro o de capítulo de un libro, incluya, además, la editorial y el ISBN.

Si hay muchos autores, indique el número total de firmantes y la posición del investigador que presenta esta solicitud (p. ej., 95/18).

### **C.2. Participación en proyectos de I+D+i**

Indique los proyectos más destacados en los que ha participado (máximo 5-7), incluyendo: referencia, título, entidad financiadora y convocatoria, nombre del investigador principal y entidad de afiliación, fecha de inicio y de finalización, cuantía de la subvención, tipo de participación (investigador principal, investigador, coordinador de proyecto europeo, etc.) y si el proyecto está en evaluación o pendiente de resolución.

### **C.3. Participación en contratos de I+D+i**

Indique los contratos más relevantes en los que ha participado (máximo 5-7), incluyendo título, empresa o entidad, nombre del investigador principal y entidad de afiliación, fecha de inicio y de finalización, cuantía.

### **C.4. Patentes**

Relacione las patentes más destacadas, indicando los autores por orden de firma, referencia, título, países de prioridad, fecha, entidad titular y empresas que las estén explotando.

### **C.5, C.6, C.7... Otros**

Mediante una numeración secuencial (C.5, C.6, C.7...), incluya los apartados que considere necesarios para recoger sus principales méritos científicos-técnicos: dirección de trabajos, participación en tareas de evaluación, miembro de comités internacionales, gestión de la actividad científica, comités editoriales, premios, etc.

Recuerde que todos los méritos presentados deberán presentarse de forma concreta, incluyendo las fechas o período de fechas de cada actuación.

El currículum abreviado pretende facilitar, ordenar y agilizar el proceso de evaluación. Mediante el número de identificación individual del investigador es posible acceder a los trabajos científicos publicados y a información sobre el impacto de cada uno de ellos. Si considera que este currículum abreviado no recoge una parte importante de su trayectoria, puede incluir voluntariamente el currículum en extenso en la documentación aportada, que será facilitado también a los evaluadores de su solicitud.

## Parte A. DATOS PERSONALES

Fecha del CVA 18-IX-2023

|                                      |                                               |                     |  |
|--------------------------------------|-----------------------------------------------|---------------------|--|
| Nombre y apellidos                   | ANTONIO REY GAYO                              |                     |  |
| DNI/NIE/pasaporte                    |                                               | Edad                |  |
| Núm. identificación del investigador | WoS Researcher ID (*)                         | G-7099-2012         |  |
|                                      | SCOPUS Author ID (*)                          | 7202860940          |  |
|                                      | Open Researcher and Contributor ID (ORCID) ** | 0000-0002-8901-4198 |  |

(\*) Al menos uno de los dos es obligatorio

(\*\*) Obligatorio

### A.1. Situación profesional actual

|                       |                                                                                    |                    |                                                      |
|-----------------------|------------------------------------------------------------------------------------|--------------------|------------------------------------------------------|
| Organismo             | UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID                                                  |                    |                                                      |
| Dpto./Centro          | DEPTO. QUÍMICA FÍSICA / FACULTAD CC. QUÍMICAS                                      |                    |                                                      |
| Dirección             | Ciudad Universitaria. 28040 MADRID                                                 |                    |                                                      |
| Teléfono              |                                                                                    | correo electrónico | <a href="mailto:areygayo@ucm.es">areygayo@ucm.es</a> |
| Categoría profesional | CATEDRÁTICO                                                                        | Fecha inicio       | 20-I-2012                                            |
| Área de conocimiento  | QUÍMICA FÍSICA                                                                     |                    |                                                      |
| Espec. cód. UNESCO    | 2307, 230408, 230418                                                               |                    |                                                      |
| Palabras clave        | QUÍMICA COMPUTACIONAL, MODELIZACIÓN MOLECULAR, PLEGAMIENTO DE PROTEÍNAS, POLÍMEROS |                    |                                                      |

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

| Licenciatura/Grado/Doctorado | Universidad           | Año  |
|------------------------------|-----------------------|------|
| LIC. CC. QUÍMICAS            | COMPLUTENSE DE MADRID | 1986 |
| DOCTOR CC. QUÍMICAS          | COMPLUTENSE DE MADRID | 1989 |

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

**6 sexenios de investigación** (el último concedido en 2023 para el periodo 2017-2022).  
 7 quinquenios docentes.

3 Tesis Doctorales dirigidas en los últimos 15 años:

María Larriva Hormigos (defendida en 2010). “Estructura nativa y secuencia en el proceso de plegamiento de proteínas globulares”

Marta Enciso Carrasco (defendida en 2012). “Hydrogen bond models for the simulation of protein folding and aggregation”.

Ramiro G. Perezan Rodríguez (defendida en 2014). “Modelos simples para estudiar el efecto de la presión en el plegamiento de proteínas”.

Más de 30 Trabajos de Fin de Grado y Trabajos de Fin de Máster dirigidos en los últimos 10 años, todos ellos relacionados con el estudio por simulación molecular del plegamiento de proteínas.

### Datos bibliométricos

Total Articles in Publication List: 71 (Scopus) / 72 (WoS) / 73 (ORCID)  
 Articles with Citation Data: 71  
 Sum of the Times Cited: 1395 (Scopus) / 1410 (WoS)  
 h-index: 23 (Scopus/WoS)



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

Como principal característica de la actividad investigadora de Antonio Rey, cabe destacar el esfuerzo de haber introducido y consolidado una nueva línea de investigación en la universidad en la que trabaja, y prácticamente también en España. Su actividad investigadora se centró inicialmente en el estudio del comportamiento de polímeros en disolución, en una etapa muy productiva desde el punto de vista científico en el grupo del Dr. Juan J. Freire (actualmente en la UNED). A raíz de la etapa postdoctoral (en el Instituto Scripps de Investigaciones Biomédicas, La Jolla, California, EE. UU., con una beca MEC-Fulbright), el solicitante empezó a utilizar técnicas de simulación sobre modelos simplificados (“coarse-grained”) para el estudio de aspectos relacionados con la estructura y plegamiento de proteínas. Así, de forma paulatina se ha ido dedicando cada vez con más intensidad a esta línea en su trabajo de investigación. Ha sido una etapa dura, que sin embargo ha dado lugar a una línea de investigación que puede considerarse en la actualidad bastante bien establecida.

Las Tesis Doctorales mencionadas arriba, junto con las dirigidas en periodos anteriores, han obtenido en todos los casos la máxima calificación. Este número de Tesis, que podemos considerar elevado teniendo en cuenta las dimensiones bastante reducidas del grupo, refleja el atractivo que esta línea de investigación tiene para estudiantes motivados, que también en otros niveles (en la actualidad Trabajos de Fin de Grado y Trabajos de Fin de Máster) colaboran activamente en el desarrollo de los proyectos de investigación del grupo, a la vez que adquieren una formación sólida en técnicas de Química Computacional.

Además de los indicadores cuantitativos sobre publicaciones científicas reflejados en el apartado anterior, cabe destacar que en buena parte de los trabajos correspondientes a la etapa de trabajo en sistemas poliméricos el solicitante ha sido primer autor del trabajo, reflejando su papel protagonista en el desarrollo del grueso de la investigación. Lógicamente en las publicaciones de los últimos años, relacionadas con el plegamiento de proteínas, el solicitante figura mayoritariamente como “autor responsable”, al haber diseñado la investigación, preparado los correspondientes algoritmos de modelización y escrito los artículos resultantes. Teniendo en cuenta la naturaleza fundamentalmente metodológica de buena parte del trabajo realizado, y el tamaño del grupo, el impacto alcanzado por las publicaciones del solicitante puede considerarse bastante bueno. De hecho, el desarrollo cuidadoso de modelos de resolución intermedia para estudiar la estabilidad de las proteínas y su proceso de plegamiento/desnaturalización es uno de los hitos más importantes en la carrera investigadora del solicitante.

En la actualidad, tras haber dedicado unos años al servicio a la universidad en el apartado de gestión (como Director del Departamento de Química Física en el periodo 2014-2018, miembro del Claustro universitario y miembro del Consejo de Gobierno de la UCM), el solicitante vuelve a intensificar su actividad investigadora, colaborando con grupos internos y externos a la UCM en el estudio mediante técnicas de modelización molecular de nuevos sistemas que intentan aproximarse a las condiciones del medio celular.

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

### **C.1. Publicaciones recientes**

Joao N.C. Especial, Antonio Rey and Patrícia F.N. Faísca, "A note on the effect of linear topology preservation in Monte Carlo simulations of knotted proteins". *Int. J. Mol. Sci.* 23, 13871 (2022).

Beatriz Fernández del Río y Antonio Rey, "Behavior of Proteins under Pressure from Experimental Pressure-Dependent Structures". *J. Phys. Chem. B* 125, 6179 – 6191 (2021).

Eduardo Guzmán, Laura Fernández-Peña, Gustavo S. Luengo, Ana María Rubio, Antonio Rey y Fabien Léonforte, "Self-Consistent Mean Field Calculations of Polyelectrolyte-Surfactant Mixtures in Solution and upon Adsorption onto Negatively Charged Surfaces". *Polymers* 12, 624: 1 – 16 (2020).

João N.C. Especial, Ana Nunes, Antonio Rey y Patricia FN Faísca, "Hydrophobic confinement modulates thermal stability and assists knotting in the folding of tangled proteins". *Phys. Chem. Chem. Phys.* 21, 11764 – 11775 (2019).

Ana M. Rubio y Antonio Rey, "Design of a structure-based model for protein folding from flexible conformations". *Phys. Chem. Chem. Phys.* 21, 6544 – 6552 (2019).

Miguel A. Soler, Antonio Rey y Patrícia F.N. Faísca, "Steric confinement and enhanced local flexibility assist knotting in simple models of protein folding". *Phys. Chem. Chem. Phys.* 18, 36391 – 26403 (2016).

Heinrich Krobath, Antonio Rey y Patrícia FN Faísca, "How determinant is N-terminal to C-terminal coupling for protein folding?". *Phys. Chem. Chem. Phys.* 17, 3512 – 3524 (2015).

María Larriva y Antonio Rey, "Design of a rotamer library for coarse-grained models in protein folding simulations". *J. Chem. Inform. Model.* 54, 302 – 313 (2014).

Patrícia F.N. Faísca, Rui D.M. Travasso, Andrea Parisi y Antonio Rey "Why do protein folding rates correlate with metrics of native topology?". *PLoS One* 7, e35599 (2012).

Marta Enciso y Antonio Rey, "Simple model for the simulation of peptide folding and aggregation with different sequences". *J. Chem. Phys.* 136, 215103 (2012).

Marta Enciso y Antonio Rey, "Improvement of Structure-Based Potentials for Protein Folding by Native and Nonnative Hydrogen Bonds". *Biophys. J.* 101, 1474 – 1482 (2011).

Rui D.M. Travasso, Patrícia F.N. Faísca y Antonio Rey, "The protein folding transition state: Insights from kinetics and thermodynamics". *J. Chem. Phys.* 133, 125102 (2010).

### **C.2. Proyectos recientes**

Título del proyecto: "interfases para la generación de orden supramolecular"

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación. Proyecto PID2019-106557GB-C21.

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración desde: 2020 hasta: 2023

Cuantía de la subvención: 134.310 €

Investigador principal: Francisco Ortega Gómez

Título del proyecto: "Propiedades de nuevos sistemas nanoestructurados de importancia tecnológica"

Entidad financiadora: Ministerio de Economía, Industria y Competitividad. Proyecto CTQ2016-78895-R

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración desde: 2016 hasta: 2019

Cuantía de la subvención: 134.310 €

Investigador principal: Ramón González Rubio y Antonio Rey Gayo (coIPs)

Título del proyecto: “Modelos físicos para la simulación de tránsitos conformacionales en proteínas”

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación. Proyecto FIS2009-13364-C02-02

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid y Universidad de Zaragoza

Duración desde: 2010 hasta: 2013

Cuantía de la subvención: 35.000 € (para la UCM)

Investigador principal: Antonio Rey Gayo

Título del proyecto: “Química a alta presión, QUIMAPRES”

Entidad financiadora: Comunidad de Madrid. Proyecto S2009/PPQ-1551

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, CSIC

Duración desde: 2010 hasta: 2014

Cuantía de la subvención: 893.300 € (para los seis grupos participantes)

Investigador principal: Antonio Rey Gayo (en el grupo UCM-SIMPOL). Valentín García Baonza (coordinador)

### **C.3. Contratos**

Título: “Análisis y Calibración Espectral Raman”.

Empresa: Raman Health Technologies

Investigador principal: Álvaro Lobato Fernández (UCM)

Fechas: enero 2018 – junio 2018

Título: “Study of mixtures of biodegradable and biocompatible polymers and surfactants for improving hair conditions”.

Empresa: L’Oreal (Francia)

Investigador principal: Ramón González Rubio (UCM)

Fechas: enero 2015 – junio 2016

### **C.5, C.6, C.7... Otros**

Tutor del trabajo de investigación de los siguientes investigadores que han realizado estancias postdoctorales en el grupo de investigación en los últimos 10 años:

- Sebastián Andújar. Estancia 09/2013 – 12/2013. Actualmente es profesor adjunto en el Departamento de Química, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis, Argentina.

Miembro adjunto del “Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos” (BIFI) de la Universidad de Zaragoza

Miembro de la Junta Directiva de la Sociedad Española de Biofísica (desde junio de 2014 hasta junio de 2018).

Censor de las siguientes revistas científicas:

The Journal of Chemical Physics (EE.UU.).

Macromolecular Theory and Simulations (Alemania).

Macromolecules (EE.UU.).

Biophysical Chemistry (EE.UU.).

Biophysical Journal (EE.UU.).

European Biophysics Journal (Alemania).

Journal of the American Chemical Society (EE.UU.).

Proteins (EE.UU.).

Journal of Computer-Aided Molecular Design (Holanda).

Medalla de Honor de la Universidad Complutense de Madrid (septiembre 2018).



## CURRICULUM VITAE (CVA)

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

### Part A. PERSONAL INFORMATION

CV date 29.11.2021

|                                                |                     |                         |      |
|------------------------------------------------|---------------------|-------------------------|------|
| First name                                     | Ignacio             |                         |      |
| Family name                                    | Sola Reija          |                         |      |
| Gender (*)                                     | ████                | Birth date (dd/mm/yyyy) | ████ |
| ID number                                      | ██████████          |                         |      |
| e-mail                                         | isolarei@ucm.es     | URL Web                 |      |
| Open Researcher and Contributor ID (ORCID) (*) | 0000-0003-1613-5965 |                         |      |

(\*) Mandatory

#### A.1. Current position

|                   |                                                                                                    |               |            |
|-------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------|------------|
| Position          | Profesor Titular de Universidad                                                                    |               |            |
| Initial date      | 05/11/2007                                                                                         |               |            |
| Institution       | Universidad Complutense de Madrid                                                                  |               |            |
| Department/Center | <a href="#">Dep. de Química Física/ Fac. Ciencias Químicas</a>                                     |               |            |
| Country           | Spain                                                                                              | Teleph.number | ██████████ |
| Key words         | Quantum Control, Femtochemistry, Attophysics, Quantum Chemistry, Quantum Computing, Quantum Optics |               |            |

#### A.2. Previous positions (research activity interruptions, art. 14.2.b))

| Period                | Position/Institution/Country/Interruption cause       |
|-----------------------|-------------------------------------------------------|
| 01.12.2004-04.11.2007 | Profesor Contratado Doctor in Universidad Complutense |
| 01.01.2002-30.11.2004 | Profesor Asociado in Universidad Complutense          |
| 01.09.2001-30.09.2003 | Visiting Research Fellow in Princeton University      |
| 11.03.1999-31.12.2001 | Ayudante de Escuela Universitaria in UCM              |

#### A.3. Education

| PhD, Licensed, Graduate | University/Country                | Year |
|-------------------------|-----------------------------------|------|
| Ph.D. in Chemistry      | Universidad Complutense de Madrid | 2000 |
| Licensed in Chemistry   | Universidad Complutense de Madrid | 1994 |

### Part B. CV SUMMARY (max. 5000 characters, including spaces)

I obtained an MS Degree (Licenciatura, 5 years) in the Faculty of Chemistry at Complutense University (UCM) in 1994 with an extraordinary career prize, and a Ph. Degree with extraordinary prize by the same university in January 2000.

I began to study Quantum Dynamics and Quantum Control during my Ph.D. (1995-2000). My dissertation was the first published in Spain dealing with Quantum Control. In several short stays abroad during my Ph.D. and postdoctoral studies, I worked directly with most of the founders of the field. At the Weizmann Institute of Science (1996-1998), David Tannor taught me what optimal control is about and when does it really works. From Klaas Bergmann, (Kaiserslautern, 1998) I learned the basics of STIRAP and the simplicity of adiabatically controlled dynamics. Jeffrey Krause (University of Gainesville, USA, 1999) introduced me the advantages (and disadvantages) of using strong fields, while Herschel Rabitz (Princeton, 2001-2003) armed me with more theoretical tools for the analysis of quantum control with



special emphasis on general properties of the kinematics of the quantum dynamics and the "unreasonable" effectiveness of learning algorithms.

On my return to Spain, I created the Quantum Control group together with Prof. Jesus Santamaría and obtained my Habilitation in the first and only Habilitación Nacional in Physical Chemistry (February 2007) with the highest qualification. I have been Profesor Titular in the Department of Physical Chemistry at UCM since November 2007.

I have published around 100 research articles in international journals (J. Chem. Phys., J. Phys. Chem A, Phys. Rev. A, Phys. Rev. Lett, J. Phys. Chem. Lett., Nature Chemistry, etc.), of which I am a regular referee, and have directed research projects funded by the Ministry of Science in Spain from 2008 to 2016. I participate in several collaborative projects and European networks and have teamed with a South Korean research group obtaining several projects. I have recently collaborated with prestigious researchers such as Leticia González (Vienna), Jesús Gonzalez Vazquez, Alicia Palacios, Fernando Martín (UAM), Luis Bañares (UCM), Rebeca de Nalda and Alberto García Vela (CSIC), Volker Engel (Würzburg), Christoph Meier (Toulouse), Agnes Vibok (Debrecen), Manfred Lein (Hannover), Herschel Rabitz (Princeton), Vladimir Malinovsky (ARL), Profs Rogan and Valdivia (Universidad de Chile) and Boyoung Chang (Seoul). I have conducted research stays of a month or longer in the Weizmann Institute, Toulouse University, Princeton University, Ann Arbor's MCTP, Korea's Advanced Research Institute of Technology (KAIST), Harvard University, Seoul National University (SNU) and the Army Research Lab (ARL), totaling more than 30 months after my Postdoc at Princeton. I recently held an Adjunct professorship at SNU and received a Brain Pool fellowship from South Korea (2015), as well as a VSP from the ARL (2018) and another award from SNU (2021).

My field of research is the dynamics of quantum systems, typically molecules, in the presence of external fields. I have contributed to the study of the principles and methodologies of Quantum Optimal Control and to the development of approximate algorithms to solve the dynamics of more complex systems in the presence of external fields (e.g., the SHARC method with Prof. Leticia Gonzalez); I have proposed novel ways to manipulate the structure and properties of molecules with very intense laser pulses, developing so-called adiabatic schemes like APLIP (Adiabatic passage with light-induced potentials) and LAMB (laser adiabatic manipulation of the bond). Recently, I am working on control techniques applied to electronic and nuclear dynamics beyond the Born-Oppenheimer approximation. I am also developing novel adiabatic schemes and optimization methods applied to Quantum Computing. In general, my research aims at understanding phenomena and searching for general principles, rather than applications to specific systems.

Research indicators: 111 indexed publications (including proceedings). Total citations: 2297 (Google scholar). Citations/year during the last 5 years: 207. H index: 25.

I have supervised 4 Ph. D. thesis and 8 Ms. Thesis. Currently I am supervising 2 Ms. Thesis.

**I have 4 "sexenios de investigación".**

I have given 20 conferences at international conferences and workshops and around 30 seminars at different institutions. I have contributed to the organization of Summer Courses in El Escorial and workshops and conferences, as secretary or committee member. I have organized the Pioneer Session of the Korean Physical Society Meeting (2015).

As a professor in Physical Chemistry, I have taught short courses on Quantum Control at different venues (University of Jena, Seoul National University, Debrecen University, also at the European Master Mundus on Theoretical Chemistry and Computational Modelling, UAM).





## Part C. RELEVANT MERITS (sorted by typology)

### C.1. Publications (see instructions)

#### Publications in international journals:

1. S. Carrasco, J. Rogan, J. A. Valdivia, I. R. Sola, **Phys. Chem. Chem. Phys.** 2021, 23, 1936–1942.
2. B. Y. Chang, S. Shin, J. Gonzalez-Vazquez, F. Martin, V.S. Malinovsky, I.R. Sola, **Phys. Chem. Chem. Phys.** 2019, 21, 23620-23625.
3. B.Y. Chang, I. R. Solá, V. S. Malinovsky, **Phys. Rev. Lett.** 2018, 120, 133201.
4. P. Sampedro, B.Y. Chang, I. R. Solá, **Phys. Chem. Chem. Phys.** 2016, 18, 25265-25270.
5. B. Y. Chang, S. Shin, I. R. Solá, **J. Phys. Chem. Lett.** 2015, 6, 1724.
6. B. Y. Chang, S. Shin, I. R. Solá, **J. Chem. Theory Comput.** 2015, 11, 4005-4010.
7. I. R. Sola, J. González-Vázquez, R. de Nalda, L. Bañares, **Phys. Chem. Chem. Phys.** 2015, 17, 13183-13200.
8. M. E. Corrales, J. González-Vázquez, G. Balerdi, I. R. Solá, R. de Nalda, L. Bañares, **Nature Chem.**, 2014, 6, 785.
9. B.Y. Chang, S. Shin, A. Palacios, F. Martín, I.R. Sola, **J. Chem. Phys.** 2013, 139, 084306.

#### Book Chapters:

1. I. R. Solá, B. Y. Chang, S. Malinovskaya, V. S. Malinovsky, **Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics** 2018, 67, 151-256. Elsevier. ISBN: 978-0-12-814215-8.

### C.2. Congress

1. IMAMPC2019, 10th International Meeting on Atomic and Molecular Physics and Chemistry, Madrid (11-14 June 2019). Invited talk. Title: “Quantum mining the hidden Rabi”.
2. Gordon Research Conference on Quantum Control of Light & Matter, Mount Holyoke College (6-11 August 2017, South Hadley, MA, US). Hot Topic. Oral contribution. Title: Ultrafast Electronic Absorption by Parallel Transfer.
3. MOLEC, Toledo (11-16 September 2016). Invited talk. Title: “Ultrafast Electronic Absorption by Parallel Transfer”.
4. XLIC Meeting, Edinburgh, (29-31 August 2016). Invited talk. Title: “Actor-Spectator-Referee Games in Electron-Ion Processes”
5. Coherent Control of Complex Quantum Systems, Okinawa, Japan, (18-21 April 2016). Invited talk. Title: “Ultrafast Control in Quantum Structures via Geometrical Optimization”
6. Meeting of the Korean Physical Society 2015 (Pioneer Session on Quantum Control for Emerging Quantum Technologies), Daejeon (22-24 April 2015). Invited talk. Title: “Quantum Control via Geometrical Optimization”
7. CCQW (Coherence and Control in a Quantum World: Current and Future Trends), Weizmann Institute of Science, Israel (15-18 December 2014). Invited talk. Title: “Quantum Control via Geometrical Optimization”

8. CAMEL 10 (Control of Quantum Dynamics of Atoms, Molecules and Ensembles by Light), Nessebar, Bulgaria (23-27 June 2014). Invited talk. Title: "Coherent electronic motion in femtoscale: generating giant molecular antennas"

9. XLIC Control of Chemical Reactivity 2014, Birmingham (14-16 April 2014). Invited. Title: "Coherent electronic motion in femtoscale: creating and controlling giant molecular antennas"

### C.3. Research projects

1. Dynamics of Chemical Reactions and Nanomaterials induced by Ultrafast Laser Irradiation (ULTRADYN). Subdirección General de Proyectos de Investigación. Ministerio de Ciencia e Innovación. Project PGC2018-096444-B-I00. PI: Javier Aoiz, Luis Bañares. Period: 2019-2022. Budget: 254.100 €.
2. *"Coherent control of trapped Rydberg atoms in non-symmetric assemblies"*, from the "Quantum computing technology development project" Program N. 041-2005-1-C00115, funded by South Korea. IP: B.Y.Chang. Period: 2020-2023. Budget: 290 MW (230.000€).
3. ERC Synergy Grants TOMATTO, funded by the European Union. IP: Fernando Martín (IMDEA Nanociencia and UAM). Period: 2018-2024. Budget for three groups: 11.7 M€ (7M€ to Madrid).
4. Estudio de los procesos moleculares fotoinducidos y colisionales por medio de experimentos con láseres y métodos teóricos. Subdirección General de Proyectos de Investigación. Ministerio de Ciencia e Innovación. Proyecto CTQ2015-65033-P. PI: Javier Aoiz and Luis Bañares. Period: 2016-2019. Financiación: 270.314 €.
5. Simulation and control of molecules under strong ultrashort pulses: From Femtochemistry to the attosecond regime. Subdirección General de Proyectos de Investigación. Ministerio de Ciencia e Innovación. Project CTQ2012-36184. PI: Ignacio Sola. Period: 2013-2016. Budget: 71.070 €.
6. Optimal control of electron dynamics in the attosecond regime. The International Cooperation Program, National Research Foundation of South Korea N. 2013K2A1A2054518. Period: 2013-2014. IP: B.Y. Chang (SNU). Budget: 60MW (48.000€)
7. Characterization and control of coherent dynamical status of molecules with laser pulses. Subdirección General de Proyectos de Investigación. Ministerio de Ciencia e Innovación. Proyecto CTQ2008-06760. PI: Ignacio Solá. Period: 2009-2012. Budget: 87.000 €.
8. XFEL: Chemistry with ultrashort pulses and free-electron lasers. COST Action CM0702. More than 70 from 21 countries. PI: Fernando Martín (UAM). Ignacio Solá was Committee member from Spain. Period: 2008-2012. Budget: 20 M€.

### C.4. Contracts, technological or transfer merits

I was a Visiting researcher under a Visiting Science Project (W911NF-18-1-0241) termed "Toward understanding essential Hamiltonian structures that support Quantum Control" in the Army Research Laboratory, Adelphi, MD, US (June-August 2018).

I am currently collaborating in a Korean Project under the Program "Quantum computing technology development project" (project # 041-2005-1-C00115) committed to the production of a quantum computer prototype.



## CURRICULUM VITAE (CVA)

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

### Part A. PERSONAL INFORMATION

|         |           |
|---------|-----------|
| CV date | 8/12/2022 |
|---------|-----------|

|                                                |                          |                                     |                                                                           |
|------------------------------------------------|--------------------------|-------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------|
| First name                                     | Juan Carlos              |                                     |                                                                           |
| Family name                                    | Lopez Alonso             |                                     |                                                                           |
| Gender (*)                                     |                          | Birth date (dd/mm/yyyy)             |                                                                           |
| ID number                                      |                          |                                     |                                                                           |
| e-mail                                         | juancarlos.lopeza@uva.es |                                     | URL Web <a href="http://gier.blogs.uva.es/">http://gier.blogs.uva.es/</a> |
| Open Researcher and Contributor ID (ORCID) (*) |                          | <a href="#">0000-0003-1028-779X</a> |                                                                           |

(\*) Mandatory

#### A.1. Current position

|                   |                                                                                                                                       |                      |  |
|-------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------|--|
| Position          | Catedrático de Universidad / Full Professor                                                                                           |                      |  |
| Initial date      | 11/09/2002                                                                                                                            |                      |  |
| Institution       | Universidad de Valladolid                                                                                                             |                      |  |
| Department/Center | Química Física y Q.Inorgánica                                                                                                         | Facultad de Ciencias |  |
| Country           | Spain                                                                                                                                 | Teleph. number       |  |
| Key words         | Rotational Spectroscopy, laser ablation, biomolecules, non-covalent interactions, microsolvation, structure, theoretical calculations |                      |  |

#### A.2. Previous positions (research activity interruptions, art. 14.2.b))

| Period                  | Position/Institution/Country/Interruption cause         |
|-------------------------|---------------------------------------------------------|
| 10/04/1982 - 30/09/1987 | Prof. Ayudante/Univ. Valladolid                         |
| 1/10/1984 - 30/06/1985  | Becario P.F.P.I. en el Extranjero/CNR Bologna, Italia   |
| 1/10/1987 - 9/12/1989   | Ayudante L.R.U./ Univ. Valladolid                       |
| 10/12/1989 - 15/09/1991 | Prof. Titular de Universidad Interino/ Univ. Valladolid |
| 16/9/1991 - 10/09/2002  | Prof. Titular de Universidad/ Univ. Valladolid          |

#### A.3. Education

| PhD, Licensed, Graduate                              | University/Country | Year |
|------------------------------------------------------|--------------------|------|
| Licenciado Ciencias Químicas (Licensed in Chemistry) | Univ. Valladolid   | 1978 |
| Doctor en Ciencias Químicas PhD. Chemical Science    | Univ. Valladolid   | 1982 |

### Part B. CV SUMMARY (max. 5000 characters, including spaces)

Juan Carlos López Alonso is **Professor of Physical Chemistry** at the Department of Physical Chemistry of the University of Valladolid (UVA). Following Chemistry studies at the University of Valladolid (1978) he concluded his **Ph. D in 1982** under the supervision of Prof. J. L. Alonso. He worked in different non-permanent positions at the University of Valladolid and in 1991 he was appointed as Lecturer Professor (Prof. Titular de Universidad, permanent position) and in 2002 as full professor. Throughout his research life in the Group of Molecular Spectroscopy (GEM – UVA), he has worked with different spectroscopic techniques and a variety of molecular systems, cooperating with different research groups. In 1984-85 was in Bologna (Italy) with a P.F.P.I Spanish postdoc grant where he was working with MW and millimeter-wave (MMW) spectroscopy (RF-MW double resonance, MMW source modulation). In 1989 he was visiting the lab of prof. Demaison (Lille, France) working with MMW superheterodyne detection and Gunn diode sources. This cooperation was extended for several years with bilateral and European projects. During the decade of 1990-2000, he visited the laboratories of Profs. Guarnieri and Dreizler in Kiel (Germany) working with MMW, FTMW and MBFTMW

techniques. Later, he had active cooperation with Prof. Caminati (Bologna, Italy) and with prof. J.-U. Grabow (Hannover, Germany) visited several times their laboratories to work with free-jet absorption MMW spectroscopy and MB-FTMW. In 2015 he was for four months visiting the laboratory of Dr. M. Schnell (Hamburg, Germany), pioneer of the three-wave mixing techniques to detect the chiral properties of isolated molecules, working with CP-FTMW techniques. From the Ph. D. period in which he used Stark modulation microwave (MW) he had contributed to incorporate new spectroscopic techniques in the GEM group: MW and MMW absorption techniques, stark modulation or source modulation, superheterodyne detection, FTMW in the waveguide, and supersonic jets (MB-FTMW), as well as broadband FTMW techniques and TOF mass detection spectrometry. He has also contributed to incorporating the different sample manipulation techniques associated with the MB-FTMW, including laser ablation, electrical discharge, and fast mixing nozzles. With this instrumentation, he had studied different molecular systems. Using static samples, molecules with large amplitude vibrations and molecules of atmospheric interest. Using supersonic jets, molecular clusters, solid biomolecules, or unstable molecules of astrochemical interest. From 1984 he has participated in different European, national, and regional projects and contracts with private and administration institutions. In the last ten years, he has participated in projects: Consolider Ingenio CSD2009-00038 (IP: J. Cernicharo), CTQ2010-19008/BQU, and CTQ2013-40717-P (IP: J.L. Alonso). From 2014 he started research as a new group (GIER) and participated as a petitioner of an infrastructure project bringing to Valladolid a new broadband chirped pulse FTMW-M3WM spectrometer. In that period he has been IP in the regional project VA334U14 (JCyL) and in the project CTQ-2016-75253-P in which a new laser-ablation nozzle has been incorporated to the CP-FTMW-M3WM spectrometer. In the first research period, he contributed to studying large amplitude vibrations with outstanding results in the characterization of large amplitude vibrations and arising the vibration-rotation interactions. He also contributed within an European project to characterize the rotational spectra of freons with the purpose of detection in the atmosphere and modelization of climate change. He also contributed to the characterization of weak and moderate hydrogen bonds in aggregates. Within this line is to highlight is the detection of axial and equatorial hydrogen bonds in complexes of heterocycles with H-X (X = Cl, F). He has also contributed to analyzing the conformational panorama of a large number of solid biomolecules like amino acids, sugars, and nitrogen bases. In the last years, he was involved in the analysis of different aspects of microsolvation of biomolecules and the detection of non-conventional non-covalent interactions through the detection of the corresponding molecular aggregates in the gas phase. Related to laser ablation he has investigated the structure a conformational behavior of biomolecules, drugs, and natural compounds. All of this work has been part of 50 competitive projects of investigation (international, national, and regional) and has led to 214 papers published in international journals and numerous contributions to international meetings. In all these years, he been always involved in the formation of young researchers. In total, he has supervised 17 Ph. D. Theses, more than 25 degree or master theses. This activity has given rise to 6 "sexenios" with a positive evaluation.

## Part C. RELEVANT MERITS (sorted by typology)

### C.1. Publications: 216 publications in JCR journals, H-index: 38

| Publication Summary in Q1 (WOS)                                      | No. | 5Y-Impact Fact 2016-20 |
|----------------------------------------------------------------------|-----|------------------------|
| Chemistry, Multidisciplinary                                         |     |                        |
| <b>ACIE</b> – <i>Angewandte Chemie Int. Ed.</i>                      | 15  | 14.205                 |
| <b>JACS</b> – <i>Journal of the American Chemical Society</i>        | 10  | 15.419                 |
| <b>PNAS</b> – <i>Proceedings of the National Academy of Sciences</i> | 1   | 12.291                 |
| <b>CS</b> – <i>Chemical Science</i>                                  | 1   | 9.658                  |
| <b>CC</b> – RSC Chemical Communications                              | 2   | 5.996                  |
| <b>CEJ</b> – <i>Chemistry: A European Journal</i>                    | 12  | 5.635                  |
| <b>CAJ</b> – <i>Chemistry: An Asian Journal</i>                      | 1   | 4.588                  |
| Chemistry, Physical, Physics, Atomic, Molecular and Chemical         |     |                        |

|                                                     |    |       |
|-----------------------------------------------------|----|-------|
| <b>JPCL – Journal of Physical Chemistry Letters</b> | 7  | 7.463 |
| <b>PCCP – Physical Chemistry Chemical Physics</b>   | 25 | 4.449 |
| <b>CPC – ChemPhysChem</b>                           | 6  | 3.102 |
| <b>JCP – Journal of Chemical Physics</b>            | 17 | 3.488 |
| <b>Astronomy &amp; Astrophysics</b>                 |    |       |
| <b>AJ – Astrophysical Journal</b>                   | 1  | 5.745 |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1- <b>“How Aromatic Fluorination Exchanges the Interaction Role of Pyridine with Carbonyl Compounds: The Formaldehyde Adduct”</b> ; J. C. López, A. Macario, A. Maris, I. Alkorta and S. Blanco., <b>Chemistry: A European Journal</b> , (2021), 27, 13870-13878.<br><a href="https://doi.org/10.1002/chem.202102163">https://doi.org/10.1002/chem.202102163</a> ; Impact index (2018): 5.160 – <b>Q1</b> Article                                                                                                                                                              |
| 2- <b>“The Microwave Detection of Wet Triacetone Triperoxide (Tatp): Non-Covalent Forces and Water Dynamics”</b> , S. Blanco, A. Macario, J. García-Calvo, A. Revilla-Cuesta, T. Torroba, J.C. López., <b>Chemistry: A European Journal</b> , (2021), 27, 1680-1687. (Inside Cover)<br><a href="https://doi.org/10.1002/chem.202003499">https://doi.org/10.1002/chem.202003499</a> , Impact index (2018): 5.236 – <b>Q1</b> Article                                                                                                                                            |
| 3- <b>“Competition Between Intra- and Intermolecular Hydrogen Bonding: O-Anisic Acid...Formic Acid Heterodimer”</b> , A. Macario, S. Blanco, J. Thomas, Y. Xu, and J.C. López, <b>Chemistry: A European Journal</b> , 25, 12325-12331 (2019). (Inside Cover), <a href="https://doi.org/10.1002/chem.201902086">https://doi.org/10.1002/chem.201902086</a><br>Impact index (2019): 5.160 – <b>Q1</b> , Article                                                                                                                                                                  |
| 4- <b>“Rotational Characterization of an n → π* Interaction in Pyridine–Formaldehyde Adduct”</b> , Susana Blanco and Juan Carlos López, <b>The Journal of Physical Chemistry Letters</b> , 9, 4632-4637 (2018).<br><a href="https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.8b01719">https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.8b01719</a> ; Impact index (2018): 7.329 – <b>Q1</b> Article                                                                                                                                                                                                    |
| 5- <b>“Structure and Dynamics In Formamide–(H<sub>2</sub>O)<sub>3</sub>: A Water Pentamer Analogue”</b> , Susana Blanco, Pablo Pinacho, and Juan Carlos López, <b>The Journal of Physical Chemistry Letters</b> , 8, 6060-6066 (2017).<br><a href="https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.7b02948">https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.7b02948</a> , Impact index (2017): 8.709 – <b>Q1</b> Article                                                                                                                                                                             |
| 6- <b>“Water-Induced Structural Changes In Crown Ethers From Broadband Rotational Spectroscopy”</b> C. Pérez, J.C. López, S. Blanco, and M. Schnell, <b>The Journal of Physical Chemistry Letters</b> , 7, 4053-4058 (2016). <a href="https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.6b01939">https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.6b01939</a><br>Impact index (2016): 9.353 – <b>Q1</b> Article                                                                                                                                                                                         |
| 7- <b>“Hydrogen-Bond Cooperativity in Formamide<sub>2</sub>-Water: A Model For Water – Mediated Interactions”</b> , S. Blanco, P. Pinacho, and J.C. López, <b>Angewandte Chemie International Edition</b> , 55, 9331-9335 (2016). <a href="https://doi.org/10.1002/ange.201603319">https://doi.org/10.1002/ange.201603319</a><br>Impact Index (2016): 11.994 – <b>Q1</b> Article                                                                                                                                                                                               |
| 8- <b>“Water-Water and Water-Solute Interactions In Microsolvated Organic Complexes.”</b> , C. Pérez, J.L. Neill, M.T. Muckle, D.P. Zaleski, I. Peña, J.C. Lopez, J.L. Alonso, B.H. Pate., <b>Angewandte Chemie International Edition</b> , 54, 979-982 (2015). <a href="https://doi.org/10.1002/anie.201409057">https://doi.org/10.1002/anie.201409057</a><br>Impact index: 11.261 – <b>Q1</b> Article                                                                                                                                                                        |
| 9- <b>“The Conformational Behaviour of Free D-Glucose at Last”</b> , J. L. Alonso, M. A. Lozoya, I. Peña, J. C. López, C. Cabezas, S. Mata, S. Blanco, <b>Chemical Science</b> , 5, 515-522 (2014).<br><a href="https://doi.org/10.1039/C3SC52559G">https://doi.org/10.1039/C3SC52559G</a> , Impact Index: 8.601 – <b>Q1</b> Article                                                                                                                                                                                                                                           |
| 10. <b>“Microwave Spectroscopy of Biomolecular Building Blocks”</b> , J.C. López, J.L. Alonso; Book Chapter: <b>Gas-Phase IR Spectroscopy and Structure of Biological Molecules</b> . Topics in Current Chemistry, Vol. 364, 335-401 (2015) Edit by A. M. Rijs and J. Oomens, DOI: 10.1007/128_2014_601; Book DOI 10.1007/978-3-319-19204-8; ISBN: 978-3-319-19204-8; 978-3-319-19203-1; ISSN: 0340-1022<br><a href="https://link.springer.com/chapter/10.1007/128_2014_601">https://link.springer.com/chapter/10.1007/128_2014_601</a> , Impact index: 4.464 – <b>Q1</b> Book |

## C.2. Congress

Assistance and participation in The Molecular Universe (IAU Symposium 280), “66<sup>th</sup>, 67<sup>th</sup>, 68<sup>th</sup>, 71<sup>st</sup>, 73<sup>rd</sup>, 74<sup>th</sup> International Symposium on Molecular Spectroscopy”, “The 23<sup>rd</sup> and 25<sup>th</sup> International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy”, XIII Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics. More than 40 contributions including oral communications, posters, and author contributions



**Invited Talks:** 66th International Symposium on Molecular Spectroscopy. The Ohio State University, Columbus, Ohio (USA). 22-26 Junio 2011

**INVITED PLENARY LECTURE** - 40min 22 Junio 10:20

Watching Conformations of Biomolecules: A Microwave Spectroscopy Approach

### C.3. Research projects

Participation as researcher (54) and IP (7) in Research Projects, including: a) 1 European Project (1993, Mobility & Training), b) 5 Infrastructure Projects, c) 12 Tri-annual national Projects, d) 14 Regional Projects, e) 10 International Joint Projects “*Acciones Integradas*” (3 with France, 4 with Germany, 1 with Italy, 1 with the UK, 1 with Portugal).

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Infrastructure Projects (last 10 years)</b>                                                                                                                                                                                                                                                                               |
| Title: <i>Espectrómetro isoMRR</i> , PI: Susana Blanco<br>Reference: IR2020-1-UVA02 - FEDER, 13/11/2020-31/10/2021 Funding: 485.000 €                                                                                                                                                                                        |
| Title: <i>Espectrómetro de Resonancia de Rotación Molecular Quiral</i> , PI: Alberto Lesarri<br>Reference: UNVA13-3E-2103 - MINECO, 1/1/2015-31/12/2015, Funding: 512.547,53 €                                                                                                                                               |
| <b>National Projects (last 10 years)</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| Title: <i>Caracterización espectroscópica en fase gas de la estructura y propiedades quirales de biomoléculas y moléculas orgánicas de interés biológico y sus microsolvatos</i><br>PI: Juan Carlos López, Susana Blanco<br>Reference: CTQ2016-75253-P - MICIN, 01/01/2016 – 31/12/2019, Funding: 87.120 €                   |
| Title: <i>Biomoléculas y moléculas del medio interestelar: estructura, interacciones y caracterización espectroscópica</i> , PI: José L. Alonso, Reference: CTQ2010-19008 - MINECO, 01/01/2014 – 31/12/2016 Funding: 186.000 €                                                                                               |
| Title: <i>Estructura e interacciones en biomoléculas</i> PI: José L. Alonso Hernández<br>Reference: CTQ2010-19008 - MINECO, 01/01/2011 – 31/12/2013, Funding: 402.930 €                                                                                                                                                      |
| Title: <i>Astrofísica molecular: la era de Herschel y Alma</i> . PI: J. Cernicharo (Centro de Astrobiología CAB-CSIC); Reference: Programa Consolider Ingenio – 2010 CSD2009-00038 - MICINN, 17/12/2009 – 16/12/2014, Funding: 4.000.000 €/ Univ.                                                                            |
| <b>Regional Projects (last 10 years)</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| Title: <i>Identificación de microorganismos de interés microbiológico y agroalimentario mediante desorción láser y espectrometría de masas (MALDI-TOF)</i> , PI: Juan C. López<br>Reference: VA334U14 - Junta de Castilla y León, 2014-2016, Funding: 29.000 €                                                               |
| Title: <i>Estudios estructurales de peptidos</i> . PI: José L. Alonso, Reference: GR125 (convocatoria Grupos Reconocidos – Grupos de Excelencia), Junta de Castilla y León, 2009-2011, Funding: 121.550 €                                                                                                                    |
| <b>Grants</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
| Estancias de movilidad de profesores e investigadores seniors en centros extranjeros de enseñanza superior e investigación, “Programa Salvador de Madariaga” Ministerio de Educación, Cultura y Deporte: Max Plank Institute for the Structure Dynamics of Matter, Hamburg (Germany) March-June 2015 (prof. Melanie Schnell) |

### C.4. Institutional responsibilities

At the Univ Valladolid he was Head of the Chemistry Section of the Science Faculty and coordinator of the degree in Chemistry (2009-2013) and is Coordinator of the Ph. D. program in Chemistry (2014-today)

**C.5. Memberships of scientific societies:** RSQ (Real Sociedad de Química).

### C.6. Evaluation Committees

Referee for ANEP (2007-16), MICINN (2009, 2011), MIUR (Italia, 2011-2016)

Member of the International Steering Committee “International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy”. (2008-2016)

Referee of J. Phys. Chem. Letters, J. Phys. Chem. A, J. Mol. Spectrosc., Chem. Phys. Lett., PCCP, Chemistry: A Eur. Journal, J. Organic Chemistry.



**CURRICULUM VITAE (CVA)**

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

**Part A. PERSONAL INFORMATION**

| Part A. PERSONAL INFORMATION                   |                      | CV date                            | 19/09/2023 |
|------------------------------------------------|----------------------|------------------------------------|------------|
| First name                                     | Susana               |                                    |            |
| Family name                                    | Blanco               |                                    |            |
| Gender (*)                                     | ██████               | Birth date (dd/mm/yyyy)            | ██████     |
| ID number                                      | DNI: ██████          |                                    |            |
| e-mail                                         | susana.blanco@uva.es | URL Web: http://gier.blogs.uva.es/ |            |
| Open Researcher and Contributor ID (ORCID) (*) |                      | 0000-0002-1196-3844                |            |

(\*) Mandatory

**A.1. Current position**

|                   |                                                                                                                                |                                                                |        |
|-------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------|--------|
| Position          | Full Professor                                                                                                                 |                                                                |        |
| Initial date      | 19/04/2021                                                                                                                     |                                                                |        |
| Institution       | University of Valladolid                                                                                                       |                                                                |        |
| Department/Center | Dpt. Physical Chemistry<br>Fac Sciences                                                                                        | <a href="mailto:susana.blanco@uva.es">susana.blanco@uva.es</a> |        |
| Country           | Spain                                                                                                                          | Teleph. number                                                 | ██████ |
| Key words         | Rotational spectroscopy, molecular complex, microsolvation, structure, biomolecules, laser ablation, theoretical calculations. |                                                                |        |

**A.2. Previous positions (research activity interruptions, art. 14.2.b)):**

| Period                  | Position/Institution/Country/Interruption cause |
|-------------------------|-------------------------------------------------|
| 01/01/1995 – 01/11/1995 | Becaria FPU / UVa                               |
| 01/01/1997 – 31/12/1997 | Becaria FPI / Oxford, U.K.                      |
| 01/11/1995 – 24/08/2005 | AYEU – PRAS-3/2 – AYUN / UVa                    |
| 25/08/2005 – 12/12/2007 | CDoc / UVa                                      |
| 13-12-2007 – 18/04/2021 | PTUN / UVa                                      |

**A.3. Education**

| PhD, Licensed, Graduate                              | University/Country | Year |
|------------------------------------------------------|--------------------|------|
| Licenciada Ciencias Químicas (Graduate in Chemistry) | Valladolid         | 1991 |
| Doctora en Ciencias PhD. Science                     | Valladolid         | 1995 |

**Part B. CV SUMMARY** (max. 5000 characters, including spaces)

Susana Blanco is **Full Professor of Physical Chemistry** at the Department of Physical Chemistry of the University of Valladolid (UVa) from 19/04/2021. Previously, she was Senior Lecture (national **habilitation**) in the same department in 2007. Following Chemistry studies in the Faculty of Sciences at UVa (1991) he concluded his **doctorate in 1995 (Cum Laude)** under the supervision of Prof.J.L. Alonso and Prof. J.C. López with a **FPU grant**. In this time, she used different microwave (MW) spectroscopy techniques in the frequency range 8-250 GHz (RF-MW double resonance, MW Stark modulation, MW Fourier transformation, MMW source modulation, MMW superheterodyne detection), getting involved in its electronic design and control programing, to measure the rotational spectrum of some freons (CFC's molecules). In that period, she got different grants to visit the laboratories of Prof. A.C. Legon (Exeter Univ., U.K - 1993) and Prof. J. Demaison (CRNS of Lille, France - 1994) extending their knowledge with new spectroscopic techniques: Fourier transform MW in supersonic jets and millimeter-wave (MMW) spectroscopy with superheterodyne detection, respectively. In **1997** she worked in the laboratory of Prof. B.J. Howard, **Physical and Theoretical Chemistry Laboratory (PTCL) at Oxford University (U.K), with a postdoctoral FPI grant**. She has also worked in the laboratory of Prof. A.C. Legon (Exeter, UK) (1996) as Research Fellow Grade IA, visited several times the laboratory of Prof. W. Caminati (Bologna, Italy) with research

contracts and grants (2001, 2006, 2013) and in 2016 for 4 months working in the laboratory of Prof. N. Walker in Newcastle (UK).

In her Ph.D. period, she studies freons, air pollutants responsible for the **ozone layer depletion**, as part of a European project dedicated to the study environmental problems, recording and analyzing the rotational spectra of different freons. The data provided were used for the detection and monitoring of these pollutants, and to develop predictive models of climate change, data essential for **environmental protection**.

She has investigated the disposition of high electron density regions associated to heteroatom nonbonding orbitals through the analysis of the hydrogen bonds of their complexes with HX. This research has experimentally contributed to deepen the knowledge of **basic chemistry concepts**, such as structural properties and non-covalent interactions that are basic for the understanding of reactivity.

She contributed to implement, in the laboratory of the Group of Molecular Spectroscopy (GEM – UVA), an **electric discharge system** coupled to the sample injection valve with which could generate and study unstable systems of **astrophysical interest**.

She has also participated in the implementation of **laser ablation** system to study the MW spectrum of solid samples, as **biomolecules** like amino acids, sugars, neurotransmitters, etc. In these studies, the great flexibility of the systems was demonstrated by the detection of a large number of conformers, and different non-covalent interactions, that stabilize them and explain properties of peptides or proteins.

In 2014 she started a new group (**GIER**) with Prof. J.C. Lopez. She **led as IP2** the project **CTQ2016-75253-P (Proyectos I+D+i «Generación de Conocimiento»)** focused on development of several experimental research lines as the **microsolvation** where the cooperative effects of hydrogen bonding, competitiveness between functional groups have been analyzed. For the first time, predicted cooperative effects have been experimentally detected, interactions of a carboxyl group in trans arrangement with water (and other acid groups) has been experimentally described, the dynamics of solvation, as the structure changes of crown ethers when they complex with water, has been detected. She has contributed to the implementation of a **laser ablation vaporization** nozzle in the broadband spectrometer analyzing drugs or unusual amionoacid, comparing the different effects in the spectra when the sample is heating or laser ablated.

During this period, she has **supervised** two Ph. D. Thesis, Dr. Pinacho, (von Humboldt research. Hamburg – Germany, and Dr. Macario, (postdoctoral position, Rennes – France), different TFM (master) and TFG (Garde) Recently she became the **leader of the Unidad de Investigación Consolidada UIC-293 - JCyL** and has obtained an **Infraestructuras en Red de JCyL (INFRARED) project (IR2020-1-UVA02)** with FEDER co-financing to acquire an isoMRR spectrometer with analytical orientation to attend **regional strategic objectives**.

She has four sexenios, and this year she will apply for the fifth.

She has given several invited talks in different **national and international PhD programs**, to **science divulgation** for high school students, and has participated in conferences to bring **women closer to science**.

## Part C. RELEVANT MERITS (sorted by typology)

### C.1. Publications (see instructions)

- |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1- THE ROLE OF THE TRANSIENT ATROPISOMERISM AND CHIRALITY OF FLURBIPROFEN UNVEILED BY LASER-ABLATION ROTATIONAL SPECTROSCOPY<br>A. Verde, J. C. López, S. Blanco<br><b>Chemistry: A European Journal</b> , e202300064, 1-6, (2023).<br>Impact index (2021): 5.020 – <b>Q2</b> ; Article [DOI: 10.1002/chem.202300064] |
| 2- THE CONFORMATIONS OF ISOLATED GALLIC ACID: A LASER-ABLATION ROTATIONAL STUDY<br>A. Verde, S. Blanco, J.C. López.<br><b>Molecules</b> , <u>28</u> , 159 (2022).<br>Impact index (2021): 4.927 – <b>Q1</b> ; Article [DOI: 10.3390/molecules28010159]                                                                |
| 3- THE MICROWAVE DETECTION OF WET TRIACETONE TRIPEROXIDE (TATP): NON-COVALENT FORCES AND WATER DYNAMICS                                                                                                                                                                                                               |

| <p>S. Blanco, A. Macario, J. Garcia-Calvo, A. Revilla-Cuesta, T. Torroba, J.C. López.<br/> <b>Chemistry: A European Journal</b>, <u>27</u>, 1680-1687 (2021). <i>hot paper</i>.<br/> Impact index (2020): 5.236 – <b>Q2</b>; Article [DOI: 10.1002/chem.201902086]</p>                                                                                                                                                     |        |                        |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|------------------------|
| <p>4- MICROSOLVATION OF ETHYL CARBAMATE CONFORMERS: EFFECT OF CARRIER GAS ON THE FORMATION OF COMPLEXES<br/> P. Pinacho, J. C. López, Z. Kisiel, S. Blanco.<br/> <b>Physical Chemistry Chemical Physics</b>, <u>22</u>, 18351-18360 (2020).</p>                                                                                                                                                                            |        |                        |
| <p>5- COMPETITION BETWEEN INTRA- AND INTERMOLECULAR HYDROGEN BONDING: <i>o</i>-ANISIC ACID ... FORMIC ACID HETERODIMER<br/> A. Macario, S. Blanco, J. Thomas, Y. Xu, and J.C. López.<br/> <b>Chemistry: A European Journal</b>, <u>25</u>, 12325-12331 (2019).<br/> Impact index (2019): 5.160 - <b>Q1</b>; Article [DOI: 10.1002/chem.201902086]</p>                                                                      |        |                        |
| <p>6- ROTATIONAL CHARACTERIZATION OF AN <math>n \rightarrow \pi^*</math> INTERACTION IN A PYRIDINE-FORMALDEHYDE ADDUCT<br/> Susana Blanco and Juan Carlos López.<br/> <b>The Journal of Physical Chemistry Letters</b>, <u>9</u>, 4632-4637 (2018).<br/> Impact index (2018): 7.329 - <b>Q1</b>; Article [DOI: 10.1021/acs.jpclett.8b01719]</p>                                                                            |        |                        |
| <p>7- “STRUCTURE AND DYNAMICS IN FORMAMIDE-(H<sub>2</sub>O)<sub>3</sub>: A WATER PENTAMER ANALOGUE”<br/> Susana Blanco, Pablo Pinacho, and Juan Carlos López.<br/> <b>The Journal of Physical Chemistry Letters</b>, <u>8</u>, 6060-6066 (2017).<br/> Impact index (2017): 8.709 - <b>Q1</b>; Article [DOI: 10.1021/acs.jpclett.7b02948]</p>                                                                               |        |                        |
| <p>8- “WATER-INDUCED STRUCTURAL CHANGES IN CROWN ETHERS FROM BROADBAND ROTATIONAL SPECTROSCOPY”<br/> C. Pérez, J.C. López, S. Blanco, and M. Schnell<br/> <b>The Journal of Physical Chemistry Letters</b>, <u>7</u>, 4053-4058 (2016).<br/> Impact index (2016): 9.353 - <b>Q1</b> (1/35) Physics, Atomic, Molecular &amp; Chemical<br/> Article [DOI: 10.1021/acs.jpclett.6b01939]</p>                                   |        |                        |
| <p>9- “HYDROGEN-BOND COOPERATIVITY IN FORMAMIDE<sub>2</sub>-WATER: A MODEL FOR WATER – MEDIATED INTERACTIONS”<br/> S. Blanco, P. Pinacho, and J.C. López<br/> <b>Angewandte Chemie International Edition</b>, <u>55</u>, 9331-9335 (2016).<br/> Impact Index (2016): 11.994 - <b>Q1</b>; Article [DOI: 10.1002/anie.201603319]</p>                                                                                         |        |                        |
| <p>10- “THE CONFORMATIONAL BEHAVIOUR OF FREE D-GLUCOSE -AT LAST”<br/> José L. Alonso, María A. Lozoya, Isabel Peña, Juan C. López, Carlos Cabezas, Santiago Mata, Susana Blanco<br/> <b>Chemical Science</b>, <u>5</u>, 515-522 (2014) (Universidad de Valladolid)<br/> Impact Index (2013): 8.601 - <b>Q1</b>; Article [DOI: 10.1039/C3SC52559G]</p>                                                                      |        |                        |
| <p>11- “SIX PYRANOSIDE FORMS OF FREE 2-DEOXY-D-RIBOSE”<br/> I. Peña, E.J. Cocinero, C. Cabezas, A. Lesarri, S. Mata, P. Écija, A.M. Daly, A. Cimas, C. Bermúdez, F.J.Basterretxea, S.Blanco, J.A.Fernández, J.C. López, F. Castaño, J.L.Alonso<br/> <b>Angewandte Chemie International Edition</b>, <u>52</u>, 11840-11845 (2013).<br/> Impact Index (2013): 11.336 - <b>Q1</b>; Article [DOI: 10.1002/anie.201305589]</p> |        |                        |
| Publication Summary in Q1 (WOS)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | Publs. | 5Y-Impact Fact 2018-22 |
| Chemistry, Multidisciplinary                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |        |                        |
| ACIE – Angewandte Chemie Int. Ed.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | 5      | 14.205                 |
| CS – Chemical Science                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | 1      | 9.658                  |
| CEJ – Chemistry: A European Journal                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | 5      | 4.843                  |
| JACS – Journal of the American Chemical Society                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 4      | bf 2011                |
| PNAS – Proceedings of the National Academy of Sciences USA                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | 1      | bf 2011                |
| Chemistry, Physical / Physics, Atomic, Molecular and Chemical                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |        |                        |
| JPCL – Journal of Physical Chemistry Letters                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | 4      | 7.643                  |
| PCCP – Physical Chemistry Chemical Physics                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | 19     | 3.802                  |
| CPC – ChemPhysChem                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 3      | bf 2011                |
| JCP – Journal of Chemical Physics                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | 5      | bf 2011                |
| Astronomy & Astrophysics                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |        |                        |



|                                                               |   |                |
|---------------------------------------------------------------|---|----------------|
| <b>AJSS</b> – <i>Astrophysical Journal: Supplement Series</i> | 1 | <i>bf 2011</i> |
| <b>AJ</b> – <i>Astrophysical Journal</i>                      | 1 | <i>bf 2011</i> |

|                                                                                                      |           |                        |           |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|------------------------|-----------|
| <b>h-index:</b>                                                                                      | <b>29</b> | <i>Nº publications</i> | <b>98</b> |
| <b>Research Evaluations/Sexenios investigación: 5 (last evaluation 2022)</b>                         |           |                        |           |
| <b>Ph. D. Thesis Supervised: 2</b> (both 10 (sobresaliente) <i>Cum Laude</i> ) International mention |           |                        |           |

## C.2. Congress

Assistance and participation in the “66<sup>th</sup>, 68<sup>th</sup>, 71<sup>st</sup>, 73<sup>rd</sup> International Symposium on Molecular Spectroscopy” and “The 25<sup>rd</sup> International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy” with several oral communications. Author contribution to others national and international oral and poster communications.

## C.3. Research projects

| National Projects (2009-2019)                                                                                                                                                                                                                    |                          |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------|
| <b>Title:</b> <i>Modelización y caracterización estructural de interacciones no covalentes, solvatación y reactividad por espectroscopia de microondas</i> <b>PI1:</b> Juan Carlos López; <b>PI2:</b> Susana Blanco                              |                          |
| <b>Reference:</b> PID2021-125207NB-C33 - MCIN, 01/09/2022 – 31/8/2025 <b>Funding:</b> 90.750 €                                                                                                                                                   |                          |
| <b>Title:</b> <i>Caracterización espectroscópica en fase gas de la estructura y propiedades quirales de biomoléculas y moléculas orgánicas de interés biológico y sus microsolvatos</i> <b>PI1:</b> Juan Carlos López; <b>PI2:</b> Susana Blanco |                          |
| <b>Reference:</b> CTQ2016-75253-P - MCIN, 01/01/2016 – 31/12/2019 <b>Funding:</b> 87.120 €                                                                                                                                                       |                          |
| <b>Title:</b> <i>Biomoléculas y moléculas del medio interestelar: estructura, interacciones y caracterización espectroscópica</i> <b>PI:</b> José L. Alonso                                                                                      |                          |
| <b>Reference:</b> CTQ2010-19008 - MINECO, 01/01/2014 – 31/12/2016 <b>Funding:</b> 186.000 €                                                                                                                                                      |                          |
| <b>Title:</b> <i>Estructura e interacciones en biomoléculas</i> <b>PI:</b> José L. Alonso Hernández                                                                                                                                              |                          |
| <b>Reference:</b> CTQ2010-19008 - MINECO, 01/01/2011 – 31/12/2013 <b>Funding:</b> 402.930 €                                                                                                                                                      |                          |
| <b>Title:</b> <i>Astrofísica molecular: la era de Herschel y Alma.</i>                                                                                                                                                                           |                          |
| <b>PI:</b> J. Cernicharo (Centro de Astrobiología CAB-CSIC); J.L. Alonso (co-dir Univ. Valladolid)                                                                                                                                               |                          |
| <b>Reference:</b> Programa Consolider Ingenio – 2010 CSD2009-00038 - MICINN, 17/12/2009 – 16/12/2014 <b>Funding:</b> 4.000.000 € / Univ. Valladolid: 767.000 €.                                                                                  |                          |
| Regional Projects                                                                                                                                                                                                                                |                          |
| Grupo de Investigación en Espectroscopia de Rotación – GIER. Unidad de Investigación Consolidada de la Junta de Castilla y León: UIC 293.                                                                                                        |                          |
| 28/02/2019                                                                                                                                                                                                                                       | <b>PI:</b> Susana Blanco |
| <b>Title:</b> <i>Identificación de microorganismos de interés microbiológico y agroalimentario mediante desorción láser y espectrometría de masas (MALDI-TOF)</i> <b>PI:</b> Juan C. López                                                       |                          |
| <b>Reference:</b> VA334U14 - Junta de Castilla y León, 2014-2016 <b>Funding:</b> 29.000 €                                                                                                                                                        |                          |

Participation 32 Research Projects, including: a) **1 European Project**, b) **6 Infrastructure Projects**, c) **11 Tri-annual national Projects**, d) **11 Regional Projects**, e) **6 International Joint Projects “Acciones Integradas”**

## C.4. Contracts, technological or transfer merits

| Infrastructure Projects                                                |                              |
|------------------------------------------------------------------------|------------------------------|
| <b>Title:</b> Espectrómetro isoMRR                                     | <b>PI:</b> Susana Blanco     |
| <b>Reference:</b> IR2020-1-UVA02 - FEDER, 13/11/2020-31/12/2021        | <b>Funding:</b> 485.000 €    |
| <b>Title:</b> Espectrómetro de Resonancia de Rotación Molecular Quiral | <b>PI:</b> Alberto Lesarri   |
| <b>Reference:</b> UNVA13-3E-2103, 1/1/2015-31/12/2015                  | <b>Funding:</b> 512.547,53 € |

## C.4. Institutional responsibilities

Secretary of the Department of Physical Chemistry and Inorganic Chemistry. (2010 – 2014)

## C.5. Evaluation Committees

Referee for ANEP, PCCP, J. Phys. Chem. A, J. Mol. Spectrosc., J. Mol. Struct., Chem. Phys. Lett., RSQ Advances, Spectrochim. Acta, RSC Advances, Am. J. Quantum Chem. Mol. Spectrosc.





## Part A. PERSONAL INFORMATION

CV date 20/09/2023

|                                                |                 |                            |         |
|------------------------------------------------|-----------------|----------------------------|---------|
| First name                                     | ALEJANDRO       |                            |         |
| Family name                                    | CUETOS MENÉNDEZ |                            |         |
| Gender (*)                                     | ██████          | Birth date<br>(dd/mm/yyyy) | ██████  |
| ID number                                      | ██████████      |                            |         |
| e-mail                                         | ACUEMEN@UPO.ES  |                            | URL Web |
| Open Researcher and Contributor ID (ORCID) (*) |                 | 0000-0003-2170-0535        |         |

(\*) Mandatory

### A.1. Current position

|                   |                                                                                                                                                                                             |                   |        |
|-------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------|--------|
| Position          | Prof. Titular Univer.                                                                                                                                                                       |                   |        |
| Initial date      | 11/11/2011                                                                                                                                                                                  |                   |        |
| Institution       | Universidad Pablo Olavide                                                                                                                                                                   |                   |        |
| Department/Center | <u>Departamento Sistemas Físicos, Químicos y Naturales</u>                                                                                                                                  |                   |        |
| Country           | Spain                                                                                                                                                                                       | Teleph.<br>number | ██████ |
| Key words         | 220401-Colloids; 220408- Liquids; 220510- Statistical Mechanics; 221018 Liquid State Physics; 221021 Phase Equilibrium; 221309 Liquid Crystals; 221311 Transport Phenomena; Cell Simulation |                   |        |

### A.2. Previous positions (research activity interruptions, art. 14.2.b))

| Period                | Position/Institution/Country/Interruption cause                                 |
|-----------------------|---------------------------------------------------------------------------------|
| 01/03/2005-31/12/2007 | Postdoctoral Researcher · Utrecht University                                    |
| 01/02/2008-28/09/2009 | Postdoctoral Researcher (Juan de la Cierva Fellowship) · Universidad de Almería |

### A.3. Education

| PhD, Licensed, Graduate          | University/Country           | Year |
|----------------------------------|------------------------------|------|
| Doctor Universidad Pablo Olavide | Universidad Pablo de Olavide | 2004 |
| Licenciado en Ciencias Físicas   | Universidad de Sevilla       | 1996 |

## Part B. CV SUMMARY

Graduated in Physics from the University of Seville, and Doctor from the Pablo Olavide University. My postdoctoral experience includes periods at the University of Utrecht and at the University of Almería (as Juan de la Cierva researcher). Since 2009 I have been researcher and lecturer at the Pablo Olavide University. I have published more than 50 research articles in peer reviewed scientific journals.

The thematic of my investigations is oriented to the theoretical and computer simulation of properties of complex liquids and soft condensed matter. Along these lines, I have contributed to advances in the knowledge of non-spherical particle fluids, with the development of new research techniques. I have broad experience and an important list of relevant scientific publications on the thermodynamic, structural and dynamic properties of liquid crystals of elongated, cuboidal and disk-shaped particles.

The methods that we have proposed for the study of discotic particle fluids are noteworthy. Our algorithms have made it possible to carry out a significant number of studies on these systems. In collaboration with the group of Dra. Marjoleine Dijkstra (University of Utrecht,



The Netherlands) I have lead the study for the calculation of the phase diagram of this kind of particles

Among the methodological advances to which I have contributed is the proposal of new simulation algorithms to be able to perform dynamic simulations using Monte Carlo techniques. This advance is fruit of a long collaboration with the group of Dr. Alessandro Patti, from University of Manchester. The use of these techniques, known as Dynamic Monte Carlo (DMC), has made it possible to carry out studies on the transport properties in systems with molecules with different forms and interaction potentials.

Related to all of the above, the studies in which I have participated on systems capable of forming biaxial nematic phases and the study of the dynamic properties in these phases are relevant. In this way, also in collaboration with Dr. Patti's group, we have pointed out the characteristics of the particles and situations in which it is expected to find this liquid crystal phase, defining its main characteristics.

In recent years I have promoted a new line for the study by simulation of the development of cell colonies. In this line of research I have taken advantage of my previous experience in non-spherical particle systems, introducing the modeling of cell growth and division processes. In the context of this line of research we have developed a computational model for the study of cell colonies. Until now, this model has been applied to two-dimensional and three-dimensional biofilms, as well as to the development of the eye of the fly, publishing the results obtained in high-impact journals.

I have supervised a doctoral thesis defended in 2019 on the dynamic and structural properties of liquid crystals and another on simulation of bacterial biofilms (defended in 2023). I have been Principal Investigator of four projects of the Plan Nacional I+D, of one project financed by the Junta de Andalucía and of several projects financed by the Pablo Olavide University.

I have been Director of the Department of Physical, Chemical and Natural Systems at the Pablo Olavide University. At present, I am the director of a research group recognized by the Junta de Andalucía (Grupo PAIDI FQM205). I have recognized 3 six-year research periods (last 01/01/2020)

**Number of sexenios:** 3 (último 01/01/2020), **Índice h:** 20

**Times Cited:** 997; **Cites per year in the last five years:** 85 cites/year

**Publicaciones totales en indexadas en JCR:** 51 **Publicaciones totales en Q1:** 31

## **Part C. RELEVANT MERITS** (sorted by typology)

### **C.1. Publications** (Last ten years)

**1 Book.** *Chemical thermodynamics and kinetics for life and environmental sciences 100 solved problems*. Juan Antonio Anta, Sofía Calero y Alejandro Cuetos. Ediciones Pirámide. Madrid 2021. ISBN: 978-84-368-4395-8

**2 Book.** *Termodinámica y cinética química para ciencias de la vida y del medioambiente 100 problemas resueltos*. Juan Antonio Anta, Sofía Calero y Alejandro Cuetos. Ediciones Pirámide. Madrid 2020. ISBN: 978-84-368-4369-9

**3 Book.** *Fases fluidas ordenadas mediante modelos moleculares rígidos con potenciales de interacción sencillos*. Alejandro Cuetos. Ed. Anavia, Sevilla (2005) ISBN: 84-934302-0-X

**1 Article.** Fabián A. García Daza, Antonio M. Puertas, Alejandro Cuetos. Alessandro Patti Insight into the Viscoelasticity of Self-Assembling Smectic Liquid Crystals of Colloidal Rods from Active Microrheology Simulations. *Journal of Chemical Theory and Computation* 10.1021/acs.jctc.3c00356 (2023)

**2 Article.** Álvaro Rodríguez-Rivas, Alessandro Patti, Alejandro Cuetos. Dynamics in field-induced biaxial nematic liquid crystals of board-like particles. *Journal of Molecular Liquids* **367**, 120371 (2022).

- 3 Article.** Andrés Delgado-Campos and Alejandro Cuetos. Influence of homeostatic mechanisms of bacterial growth and division on structural properties of microcolonies: A computer simulation study. *Phys. Rev. E.* **106**, 034402 (2022). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.106.034402>
- 4 Article.** Fabián A. García Daza, Antonio M. Puertas, Alejandro Cuetos, Alessandro Patti. Microrheology of isotropic and liquid-crystalline phases of hard rods by dynamic Monte Carlo simulations. *Journal of Molecular Liquids* **365**, 120146 (2022).
- 5 Article.** Fabián A. García Daza, Antonio M. Puertas, Alejandro Cuetos, Alessandro Patti. Microrheology of colloidal suspensions via dynamic Monte Carlo simulations. *J. Colloid Interface Sci.* **605**, 182-192 (2022)
- 6 Article.** Neftalí Morillo, Bruno Martínez-Haya and Alejandro Cuetos. Tailoring the phase diagram of discotic mesogens. *Soft Matter* **17**, 8693-8704 (2021).
- 7 Article.** Alessandro Patti and Alejandro Cuetos. Dynamics of colloidal cubes and cuboids in cylindrical nanopores. *Physics of Fluids* **33**, 097103 (2021)
- 8 Article.** Francisco Javier Lobo-Cabrera, Tomás Navarro, Antonella Iannini, Fernando Casares and Alejandro Cuetos A. Quantitative Relationships Between Growth, Differentiation, and Shape That Control Drosophila Eye Development and Its Variation. *Front. Cell Dev. Biol.* **9**, 681933 (2021) <https://doi.org/10.3389/fcell.2021.681933>
- 9 Article.** Efran M. Rafael, Luca Tonti, Daniel Corbett, Alejandro Cuetos, and Alessandro Patti, Dynamics of uniaxial-to-biaxial nematics switching in suspensions of hard cuboids, *Physics of Fluids* **33**, 067115 (2021)
- 10 Article.** Francisco. J. Lobo-Cabrera, Alessandro Patti, Fernando Govantes, and Alejandro Cuetos, *Polymer-induced microcolony compaction in early biofilms: A computer simulation study.* *Phys. Rev. E* **103**, 052407 (2021)
- 11 Article.** A. González García, R. Tuinier, G. de With and A. Cuetos. *Directional-dependent pockets drive columnar-columnar coexistence.* *Soft Matter*, **16**, 6720-6724. (2020)
- 12 Article.** F. A. García Daza, A. Cuetos and A. Patti. *Dynamic Monte Carlo simulations of inhomogeneous colloidal suspensions.* *Physical Review E.* **102**, 013302 (2020)
- 13 Article.** E. M. Rafael, D. Corbett, A. Cuetos and A. Patti. *Self-assembly of freely-rotating polydisperse cuboids: unveiling the boundaries of the biaxial nematic phase.* *Soft Matter* **16**, 5565-5570 (2020)
- 14 Article.** A. Cuetos and A. Patti. *Dynamic of hard colloidal cuboids in nematic liquid crystals.* *Physical Review E.* **101**, 052702 (2020)
- 15 Article.** A. Cuetos, N. Morillo and B. Martinez-Haya. *Coadsorption of Counterionic Colloids at Fluid Interfaces: A Coarse-Grained Simulation Study of Gibbs Monolayers.* *Langmuir* **36**, 2877-2855 (2020)
- 16 Article.** N. Morillo, A. Patti and A. Cuetos. *Brownian dynamics simulation of oblate and prolate colloidal particles in nematic liquid crystals.* *J. Chem. Phys.* **150**, 204905 (2019)
- 17 Article.** A. Cuetos, E.M. Rafael, D. Corbett, A. Patti. *Biaxial nematics of hard cuboids in an external field.* *Soft Matter* **15**, 1922-1926 (2019)
- 18 Article.** A. Cuetos, N. Morillo y A. Patti., *Fickian yet non-Gaussian diffusion is not ubiquitous in soft matter.* *Phys. Rev. E* **98**, 042129 (2018)
- 19 Article.** D. Corbett, A. Cuetos, M. Dennison y A. Patti. *Dynamic Monte Carlo algorithm for out-of-equilibrium processes in colloidal dispersions.* *Phys. Chem Chem. Phys* **20**, 15118-15127 (2018)
- 20 Article.** R. Domínguez-Acemel, F. Govantes y A. Cuetos. *Computer simulation study of early bacterial biofilm development.* *Scientific Reports*, **8**, 5340 (2018)
- 21 Article.** Alessandro Patti y Alejandro Cuetos, *Monte Carlo simulation of binary mixtures of hard colloidal cuboid.* *Mol. Sim.* **44**, 516-522 (2018)
- 22 Article.** Alejandro Cuetos, Matthew Denison, Andrew Masters, Alessandro Patti. *Phase behaviour of hard board-like particles.* *Soft Matter*, **13**, 4720-4732 (2017)

### C.3. Research projects

**1.- Toma de decisiones en poblaciones bacterianas: señalización integrada en la interfase planctónico/biofilm.** PID2021-126121NB-I00. Ministerio de Ciencia e Innovación.

**2.- Modelos computacionales/individual-based models para el estudio de comportamientos multicelulares.** P20\_00816. Proyectos i+d+i a Agentes del Sistema Andaluz del Conocimiento (PAIDI 2020), Consejería de Transformación Económica, Industria, Conocimiento y Universidades de la Junta de Andalucía/FEDER. PI: Alejandro Cuetos. 30.000 €. Duration: 04/10/2021-31/12/2022. Type of Participation: Principal Investigator. IPs: Fernando Govantes Romero y **Alejandro Cuetos Menéndez** (Universidad Pablo de Olavide). 181.200,00 €. Duration 4 years (2022-2026).

**3.- Descifrando las claves del cambio de estilo de vida bacteriano.** PGC2018-097151-B-I00 . Call 2018 «Proyectos De I+D de Generación de Conocimiento, Ministerio De Ciencia, Innovación Y Universidades. IPs: Fernando Govantes Romero y **Alejandro Cuetos Menéndez** (Universidad Pablo de Olavide). 145.200,00 €. Duration 3 years (2019-2020). Type of Participation: Principal Investigator

**4.- Consolidación del Centro de Cálculo Científico de la UPO mediante la ampliación y mejora del cluster de procesadores de alta capacidad para cálculo científico.** UNPO15-CE-3208 MINECO. IP: Dr. **Alejandro Cuetos Menéndez**. (Universidad Pablo de Olavide). 01/01/2016- 31/12/2017. 19.935.700 €. Duration: 2 years. Type of Participation: Principal Investigator.

**5.- Grant for Plan Propio de la Universidad Pablo Olavide for the Organization of Congreso XXI CONGRESO DE FISICA ESTADISTICA FISES17.** Universidad Pablo Olavide. PI: Dr. **Alejandro Cuetos**. 1012 €. 1 año. Type of Participation: Responsable.

**6. Sensores químicos y células solares basados en nanomateriales y porfirinas.** Consejería de Economía, Innovación, Ciencia y Empleo. Junta de Andalucía.. IP: Dr. Jose María Pedrosa Poyato. (Universidad Pablo de Olavide). 159.894€. From 27/06/2014. Duration: 4 years. Type of Participation: Researcher, Team Member

**7. Complejos supramoleculares de inclusión y de ensamblaje: un estudio mediante espectroscopía láser, espectrometría de masas y técnicas computacionales.** CTQ2012-32345 MINECO (Plan Nacional i+D). IP: Dr. Bruno Martínez-Haya. 90.090 €. From 2013. Duration: 3 years. Type of Participation: Researcher, Team Member

**8. Nuevas estructuras desde la auto-organización de moléculas discóticas.** MAT2011-29464 MICINN (Plan Nacional i+D+i 2008-2011). IP: Dr. **Alejandro Cuetos Menéndez**. 11.999.57€. From 2012. Duration: 1 year. Type of Participation: Principal Investigator

**9. El poder de las diferencias en ciencia coloidal: nuevas estructuras y fases en mezclas de partículas diferentes.** PPI1101 Universidad Pablo Olavide (PPI1101). IP: Dr. **Alejandro Cuetos Menéndez**. Desde 09/09/2011. 4.000€. Duration: 2 years. Type of Participation: Principal Investigator

|                                      |  |                      |                     |            |
|--------------------------------------|--|----------------------|---------------------|------------|
| <b>Parte A. DATOS PERSONALES</b>     |  | <b>Fecha del CVA</b> |                     | 01/02/2023 |
| Nombre y apellidos                   |  | Ocón Esteban, Pilar  |                     |            |
| DNI/NIE/pasaporte                    |  | [REDACTED]           |                     | Edad       |
| Núm. identificación del investigador |  | Researcher ID        | L-2443-2013         |            |
|                                      |  | Código Orcid         | 0000-0003-4595-7298 |            |

**A.1. Situación profesional actual**

|                       |                                                                                                                                                   |                                                          |      |
|-----------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------|------|
| Organismo             | Universidad Autónoma de Madrid                                                                                                                    |                                                          |      |
| Dpto./Centro          | Química Física Aplicada                                                                                                                           |                                                          |      |
| Dirección             | Tomás y valiente nº 7                                                                                                                             |                                                          |      |
| Teléfono              | correo electrónico                                                                                                                                | <a href="mailto:pilar.ocon@uam.es">pilar.ocon@uam.es</a> |      |
| Categoría profesional | Catedrática Universidad                                                                                                                           | Fecha inicio                                             | 2011 |
| Espec. cód. UNESCO    | 221005 Electroquímica, 221012 Teoría de las Células de Combustible, 330309 Operaciones Electroquímicas, 330310 Recubrimiento Por Electrólisis     |                                                          |      |
| Palabras clave        | Acumulacion y transformación de energia: baterías y pilas de combustible. Electrocatalizadores. Polímeros conductores, Membranas intercambiadoras |                                                          |      |

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

|                              |                                |      |
|------------------------------|--------------------------------|------|
| Licenciatura/Grado/Doctorado | Universidad                    | Año  |
| Doctorado en Química         | Universidad Autónoma de Madrid | 1987 |

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

Tesis doctorales dirigidas: en los últimos años: 6

Citas totales: 3220

Promedio de citas/año durante los últimos 5 años (sin incluir el año actual): 41

Publicaciones totales en primer cuartil (Q1): 105 de 143

**7 (6 sexenios de investigación +1 sexenio de transferencia (2020))**

Índice h. 38

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

Soy Doctora en Ciencias Químicas (Premio Extraordinario) por la Universidad Autónoma de Madrid (1987). Realicé una estancia posdoctoral en 1987, con beca del programa Mercurio en Universidad de Poitiers (Francia). Posteriormente ha realizado diferentes estancias: tres en la U. de Poitiers (Francia), tres en el Fraunhofer Institut Verfahrenstechnik und Verpackung, Freising (Alemania), dos en U. de NewCastle (UK), una en el instituto Nacional de Tecnología Industrial (INTI) Argentina y una en el Politécnico de Turín (Italia).

He sido profesora Titular de Universidad (1993-2011) y soy Catedrática de Universidad desde 2011 desarrollando mi labor profesional en la Universidad Autónoma de Madrid. La investigación desarrollada se ha centrado en el campo de la Electroquímica, con especial proyección en: Cinética Electroquímica, Electroquímica de Semiconductores, Recubrimientos Electroquímicos y Desarrollo de Materiales para acumulación de Energía. Dentro del campo de materiales para aplicaciones tecnológicas he trabajado en síntesis y aplicación de Polímeros Conductores estudiando propiedades de protección anticorrosivas en atmosferas agresivas, además he realizado estudios de aleaciones de base aluminio para aplicaciones aeroespaciales. También he realizado la evaluación y desarrollo de sistemas de acumulación de energía, baterías primarias, secundarias y pilas de combustible.

Dentro de este contexto cabe destacar mis aportaciones en las líneas de investigación indicadas, tanto a nivel más fundamental mediante el estudio de mecanismo de reacción,



estudio de propiedades estructurales, desarrollo de modelos por técnicas químico físicas tanto in situ como ex situ, como a nivel aplicado desarrollando evaluaciones de diversos materiales y dispositivos de aplicación tecnológica. En este último ámbito es importante destacar su participación como co-inventora de las patentes: Procedimiento de anodizado de aluminio o aleaciones de aluminio y de la patente Celda electroquímica de Aluminio-manganeso.

Actualmente me encuentro trabajando en el desarrollo electrocatalizadores y membranas intercambiadoras para celdas de combustible de baja temperatura, materiales de base aluminio para batería Metal/aire y aditivos para elemento negativo de batería de Pb/ácido AGM e inundada para mejora en procesos de aceptación de carga. A lo largo de mi carrera investigadora he publicado más de 100 artículos en revistas de alto índice de impacto (J. of Phys. Chem. C, Lagmuir, J. Catal, Appl. Catal. B, J. of Power Sources, J. of Mat. Chem. A., J. American Chemical Soc. ...). He sido conferenciante invitado en varias Universidades y centros de Investigación (U. Cartagena, CENIM-CSIC, U. Lima, CNHidrogeno, INTI, CIC Energigune). Además, he presentado más de 109 comunicaciones en congresos Nacionales e Internacionales. He participado en 27 Proyectos y Contratos de investigación, en once de los cuales ha sido el investigador principal.

He sido Vicedecana de Estudiantes (2002-2003) y Vicedecana de Practicum (2003-2004) en la Fac. Ciencias UAM. Coordinadora del Programa de Intercambio y Movilidad de estudiantes ERASMUS. Coordinadora del Master de Energías y Combustibles para el Futuro (2007-2011) y Coordinadora (UAM) del Master Interuniversitario Electroquímica Ciencia y Tecnología (2017-2019).

## **Parte C. APORTACIONES DEL CV RELACIONADAS CON LA TRANSFERENCIA E INVESTIGACION**

### **C.1. PARTICIPACION EN CONTRATOS DE INVESTIGACION DE ESPECIAL RELEVANCIA CON EMPRESAS**

#### **Optimización de procesos de anodizado libres de cromatos para aplicación en aleaciones de aluminio aeroespacial**

Entidad Financiadora: **AIRBUS ESPAÑA**. 2006-2009. Entidades participantes: AIRBUS - Universidad Autónoma de Madrid. Investigador responsable: **P. Ocón** (UAM), I. Garcia Diego (AIRBUS). Numero de investigadores participantes: 4. Subvención 83.427 €

#### **Desarrollo de batería Al-aire recargable.**

Entidad financiadora: **CDTI - ALBUFERA ENERGY STORAGE S.L. 2013 – 2015**. Entidades participantes: ALBUFERA ENERGY STORAGE S.L.- IMDEA Energía - Universidad Autónoma de Madrid. Investigadores Principales: E. Fatás (UAM), **P. Ocón** (UAM), J. Chacón (ALBUFERA) Número de investigadores participantes: 7. Subvención: 48.400 €

#### **SPECTRA (Smart Personal CO2 free Transport).**

Entidad financiadora: **CDTI Programa Estratégico de Consorcios de Investigación Empresarial Nacional (CIEN)**. Consorcio de I+D multidisciplinar y en colaboración efectiva creado por 8 empresas de primer nivel nacional e internacional. OPI Línea de trabajo 2.3 Nuevas baterías de Pb. 2015 – 2019. Investigadores Principales: E. Fatás (UAM), **P. Ocón** (UAM) y F. Trinidad (EXIDE) Número de investigadores participantes: 7 Subvención 98.200 €

#### **Producción de Combustibles Limpios para Transporte a Partir de Residuos Agro-Forestales y Oleaginosos. RESTOENE-II.**

Entidad Financiadora: **Comunidad de Madrid..** Programa de investigación de la *Subvención: 110.886 € (UAM) de un total de 890.000 €* Duración: desde Octubre 2014 hasta: Noviembre 2018. Entidades participantes: URJC; UAM; ICP\_CSIC; CIEMAT e IMDEA Energía. Coordinador: José Luis García Fierro. (Investigador Principal) UAM **Pilar Ocón**. Investigadores participantes: (25).

#### **Sistemas Electroquímicos Avanzados para la Producción Eficiente de Energía: Pilas Poliméricas y Baterías Metal/ Aire**

Entidad Financiadora: **Ministerio de Economía y Competitividad**. SERENA. ENE2016-77055-C3-1-R. Entidades participantes: ICP-CSIC, UAM. Duración, desde: Enero 2017 hasta: Diciembre 2019. CUANTIA DE LA SUBVENCION: 135.520 € UAM. Investigador responsable: (Coordinadora) **Pilar Ocon**. Investigadores participantes: 6

### **Bioeconomía Urbana: Transformación de Biorresiduos en Biocombustibles y Bioproductos de Interés Industrial**

Entidad financiadora: **Comunidad de Madrid**. (P2018/EMT-4344 BIOTRES-CM). Entidades participantes: ICP-CSIC, CIEMAT, IMDEA ENERGIA, URJC, UAM. Duración, desde: 1/01/2019 hasta: 31/12/2023. Cuantía de la subvención: 1.023.585,35 €. Investigador responsable: Coordinador (J. A. Melero), IP(UAM). **Pilar Ocón**. Número de investigadores participantes: (25), UAM (4)

**Affordable High-Performance Green Redox Flow Batteries (HIGREEW)**. Proyecto europeo: H2020: LC-BAT-4-2019 topic. Research and Innovation Action. Participants Institutions: Coordinator CICE (CICEnergigune), SGRE (Gamesa Electric), UAM (Pilar Ocón), U.Lorraine (CNRS), C-TECH INNOVATION LIMITED, HEIGHTS Limited, UWB (University West Bohemia), PINFLOW Energy Storage and UNIREchear. Período: 1/09/2019-31/12/22. (Granted July 2019). Cuantía de la subvención: 3.786.747,50€

## **C.2 PUBLICACIONES**

A. L. Gonçalves Biancolli, D. Herranz, L. Wang, G. Stehlíková, R. Bance-Soualhi, J. Ponce-González, **P. Ocón**, E. A. Ticianelli, D. K. Whelligan, J. R. Varcoe, and E. I. Santiago (2018). **ETFE-based anion-exchange membrane ionomer powders for alkaline membrane fuel cells: a first performance comparison of head-group chemistry**. Journal of Materials Chemistry A, 6 (47), 24330-24341. Índice de Impacto (ISI): 9.931. <https://doi.org/10.1039/C8TA08309F9F>

Royuela, J. Almarza, M. J. Mancheño, J. C. Pérez-Flores, E. G. Michel, M. M. Ramos, F. Zamora, Pilar Ocón, José L. Segura (2019). **Synergistic effect of covalent bonding and physical confinement of sulfur in the pores of a microporous COF to improve cycling performance in Li-S batteries**. Chemistry - A European Journal 2019, 25, 1 – 12. Índice de Impacto (ISI): 5,16. <https://doi.org/10.1002/chem.201902052>

R.E. Coppola, D. Herranz, R. Escudero-Cid, N. Ming, N.B. D'Accorsoc, P. Ocón, G.C. Abuin. (2020). **Polybenzimidazole-crosslinked-poly(vinyl benzyl chloride) as anion exchange membrane for alkaline electrolyzers**. RENEWABLE ENERGY 2020, 157, 71-82. Índice de Impacto (ISI): 6,274. [DOI: 10.1016/j.renene.2020.04.140](https://doi.org/10.1016/j.renene.2020.04.140)

A. Domínguez-Bajo, J. M. Rosa, Ankor González-Mayorga, B. L. Rodilla, A. Arché-Núñez, E. Benayas, P. Ocón, L. Pérez, J. Camarero, R. Miranda, M. T. González, J. Aguilar, E. López-Dolado, M. C. Serrano.(2021) **Nanostructured gold electrodes promote neural maturation and network connectivity**. Biomaterials, 2021, 279, 121186- 121201. Impacto (ISI): 15.304. <https://doi.org/10.1016/j.biomaterials.2021.121186>

I. Salmeron-Sánchez, J. Asenjo-Pascual, J. R. Avilés-Moreno, J.C. Pérez- Flores P. Mauleón, P. Ocón (2022). **Chemical physics insight of PPy-based modified ion exchange membranes: A fundamental approach**. J, Membran. Sci. 643 (2022) 120020-12003. Índice de Impacto (ISI): 9,567. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2021.120020>.

C. Larrea, D. Torres, JR. Aviles-Morena and P. Ocón. (2022). **Multi-parameter study of CO<sub>2</sub> electrochemical reduction from concentrated bicarbonate feed**. Journal of CO<sub>2</sub> rUtilization. 659 (2022), 101878. Índice de Impacto (ISI): 8,321. <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2021.101878>

I. Salmeron-Sánchez, J. Asenjo-Pascual, J. R. Avilés-Moreno, P. Ocón (2022). Microstructural description of ion exchange membranes: The effect of PPy-based

modification. J, Membran. Sci. 659 (2022), 120771. Índice de Impacto (ISI): 9,567.  
<https://doi.org/10.1016/j.memsci.2022.120771>.

J.A. Martin-Illan, L. Sierra, P.Ocon and F. Zamora (2022). **Electrochemical Double-Layer Capacitor based on Carbon@ Covalent Organic Framework Aerogels**. Angew. Chem.Int. 61 (48), e202213106. Impacto (ISI): 16.8231.  
<https://doi.org/10.1002/anie.202213106>.

J. Asenjo-Pascual, I. Salmerón-Sánchez, Pablo Mauleón, Maddalen Aguirre, Ana Catarina Lopes, Oihane Zugazua, Eduardo Sánchez-Díez, Juan Ramón Avilés-Moreno, Pilar Ocón. **DFT calculation, a practical tool to predict the electrochemical behaviour of organic electrolytes in Aqueous Redox Flow Batteries**. J.Power Sources, 564 (2023) 232817 Impacto (ISI): 9,07. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2023.232817>

#### C.4. Patentes

Inventores: Mikel Pino, Enrique Fatás, **Pilar Ocón**, Paloma Rodriguez, Joaquin Chacón.

Título: **Celda electroquímica de Aluminio-manganeso**.

Número de solicitud: P201530580. Fecha de solicitud: 29 Abril 2015. País de prioridad. España. Entidad Titular. ALBUFERA ENERGY STORAGE. Países a los que se ha extendido: España, Unión Europea, Japón, Estados Unidos pendiente de concesión.

Inventores: **P. Ocón Esteban**, M. García Rubio, A. Lavía González, I García Diego.

Título: **Procedimiento de anodizado de aluminio o aleaciones de aluminio**.

Número de solicitud: P200702842/ Número de Patente 08380076.3-122.

No: PCT/C25D11/06 Priority country: España. Fecha Concesión: 07/06/2010

Entidad Titular: AIRBUS ESPAÑA S.L. Países a los que se ha extendido: Europa, Japón, Estados Unidos, Brasil, Canadá.

#### C5: Tesis en colaboracion con empresas

-Estudio de la influencia de aditivos de base sílice en baterías de Plomo-ácido. Mejora del funcionamiento en estado parcial de carga DOCTORANDO: Almudena Muñoz Babiano. Sobresaliente Cum Laude. UAM 2008. Directores (UAM) **Pilar Ocon** y Enrique Fatas.

-Optimisation of a non-chromium-containing tartaric acid/sulphuric acid anodising bath for aluminium alloys for aerospace industry application. DOCTORANDO: Manuel García Rubio. CALIFICACION: Doctorado Europeo: Sobresaliente Cum Laude UAM 2006. Directora (UAM) **Pilar Ocón**.

-Desarrollo de baterías Plomo-ácido reguladas por válvula para nuevas aplicaciones de automoción. DOCTORANDO: Enrique García-Quismondo Hernaiz. Sobresaliente Cum Laude. UAM 2010. Directores (UAM) **Pilar Ocon** y Enrique Fatas.

-Aluminium-air batteries: study of commercial aluminium alloys as anodes. DOCTORANDO: Mikel Pino Martínez. Sobresaliente Cum Laude UAM 2017. Directores (UAM) **Pilar Ocon** y Enrique Fatas

#### C6. Otros

##### **Desarrollo y fabricación de Potenciostato/Galvanostato, y software de control para PC. Modelo AUTOPG**

AUTORES. Juan Antonio Huertas, Mariano Cuenca y Pilar Ocón

Desarrollo: UAM Año: 2002-2009. Fabricación de 22 unidades.

#### C.5 Participación en comités científicos, de gestion y evaluación

Evaluada para la ANEP (2007, 2008, 2010, 2011, 2014, 2015), ERA Chemistry (2010), Evaluadora de Proyectos de Investigación de la Agencia Andaluza de Evaluación, de la calidad y Acreditación universitaria (AGAE) (2010), Evaluadora de proyectos Agencia Nacional de Promoción Científica y Técnica (ANPCyT) Argentina. (2011, 2014).

## CURRÍCULUM ABREVIADO (CVA)

**Lea detenidamente las instrucciones que figuran al final de este documento para rellenar correctamente el CVA**





## CURRICULUM VITAE (CVA)

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

### Part A. PERSONAL INFORMATION

CV date

20/09/2023

|                                                |                     |                         |      |
|------------------------------------------------|---------------------|-------------------------|------|
| First name                                     | Fernando            |                         |      |
| Family name                                    | Martínez Pedrero    |                         |      |
| Gender (*)                                     | ████                | Birth date (dd/mm/yyyy) | ████ |
| Social Security, Passport, ID number           | ████                |                         |      |
| e-mail                                         | fernandm@ucm.es     | URL Web                 |      |
| Open Researcher and Contributor ID (ORCID) (*) | 0000-0002-5304-6278 |                         |      |

(\*) Mandatory

### A.1. Current position

|                   |                                                                           |                               |      |
|-------------------|---------------------------------------------------------------------------|-------------------------------|------|
| Position          | Associated Professor                                                      |                               |      |
| Initial date      | 31/03/2022                                                                |                               |      |
| Institution       | Universidad Complutense de Madrid                                         |                               |      |
| Department/Center | Química Física                                                            | Facultad de Ciencias Químicas |      |
| Country           | Spain                                                                     | Teleph. number                | ████ |
| Key words         | <b>Micron-sized robots, Magnetic colloids, Driven Matter, Lithography</b> |                               |      |

### A.2. Previous positions (research activity interruptions, art. 13.2.b))

| Period    | Position/Institution/Country/Interruption cause                                                |
|-----------|------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 2017-2022 | Investigador Contratado Ramón y Cajal/Universidad Complutense de Madrid/Spain                  |
| 2009-2010 | Postdoctoral Position at ESPCI (Ecole Supérieure de Physique et de Chimie Industrielle, Paris) |
| 2011-2013 | Postdoctoral Position, Campus of excellence, at the Complutense University of Madrid           |
| 2014-16   | Postdoctoral Position, in the framework of the ERC project, at the University of Barcelona.    |

### A.3. Education

| PhD, Licensed, Graduate | University/Country             | Year |
|-------------------------|--------------------------------|------|
| Graduate                | Universidad de Granada (Spain) | 2002 |
| PhD Science             | Universidad de Granada (Spain) | 2008 |

### Part B. CV SUMMARY (max. 5000 characters, including spaces)

I completed my PhD thesis at the University of Granada, in the Department of Applied Physics. My research focused on the study of colloidal suspensions of super and ferromagnetic particles. We analyzed different aspects of aggregation induced by an external field. In this period, I started a collaboration with the **Jerome Bibette** group, at **ESPCI** (Paris). Later, I continued the collaboration in a project funded by **Michelin**. We studied and proposed new

processes to obtain materials composed of natural and synthetic polymers, doped with nano particles of silica and carbon. Later I did a second post-doc in the Department of Chemistry-Physics of the **Complutense University of Madrid**, establishing a collaboration with the Complex Systems laboratory of the Department of Fundamental Physics of the **UNED**. We designed and built an interfacial rheometer and studied sublimation processes in two-dimensional structures. I made a third post-doc at the University of Barcelona, in the **Pietro Tierno** group. Here we designed different microswimmers constituted by magnetic microparticles. I have been the recipient of different grants, comprising an Introductory Research Grant, a FPI grant, a short time mobility fellowship, enjoyed during the PhD, a contract of Young Doctors PICATA, financed by the CEI Campus Moncloa, and a Ramón y Cajal contract. I have the experience in training and supervising two Master's Thesis and several end of degree projects, being the tutor of one PhD thesis. During my career I have had a leading role in the research developed, being **first author in 24 of the 39 articles**, in journals like **Science Advances**, **Physical Review Letters** or **Small**, and corresponding author in 12 articles, in journals like **Advanced Functional Materials**, **Small**, **ACS Applied Materials and Interfaces** or **Journal of Colloids and Interfaces**. 4 of the articles have appeared as covers, 2 as editor's suggestions and 2 others have been the subject of synopses. The articles have received **1211 citations** (*google-scholar*), my h-index is 19 and i10 is 30. In 3 of the 4 Patents, I appear as second author, being de facto the sole responsible for the experimental measures. I have been a member of 10 research projects. I have been IP in four of them. I made stays abroad for more than 24 months. I am reviewer of Science, Nature Communications, Physical Review Letters, or Journal of Colloids and Interfaces. I have taught for more than 250 hours in different university courses, including General Chemistry, Physical Chemistry, Advanced Spectroscopy (Complutense University of Madrid) and Physics (University of Granada). Since the beginning of 2022, I am hired as Associated Professor in the Department of Physical Chemistry of this University. In my current research I intend to combine the experience acquired in microswimmers, hydrodynamic phenomena and magnetic colloidal systems, with the experience that the Complex Systems Laboratory has in interfacial systems. Currently, I maintain different collaborations, with Professor **Chantal Valeriani**, from Complutense University of Madrid (Spain), Dr. **Carles Calero** and Professor **Demian Levis**, University of Barcelona (Spain), and I am co-tutoring one Thesis student. I have 3 and 2 six-years and five-years periods recognized research and teaching, respectively.

## Part C. RELEVANT MERITS (sorted by typology)

### C.1. Publications

1. [Static and Dynamic Self-Assembly of Pearl-Like-Chains of Magnetic Colloids Confined at Fluid Interfaces](#) **Martínez-Pedrero, F\***, Gonzalez-Banciella, A, Camino, A, Mateos-Maroto, A et al. **Small** 17 25 2101188, 2021 **Impact parameter (2021): 13.281. Inside Back Cover. Citas: 8**
2. [Static and dynamic behavior of magnetic particles at fluid interfaces](#) Autores: **Martínez-Pedrero, F\*** **Advances in Colloid and Interface Science** 284,102233, 2020. **Impact parameter (2020): 12.984. Citas: 14**
3. [Collective Transport of Magnetic Microparticles at a Fluid Interface through Dynamic Self-Assembled Lattices](#) **Martínez-Pedrero, F\***; Ortega, F.; Rubio R.G.; Calero C.. **Advanced Functional Materials**. 30, 2002206, 2020. **Impact parameter (2020): 18.808 Inside Back Cover. Citas: 12**
4. [Controlled Disassembly of Colloidal Aggregates Confined at Fluid Interfaces Using Magnetic Dipolar Interactions](#). **Martínez-Pedrero F.**; Ortega F.; Codina J.; Calero C.; Rubio R.G. **Journal of Colloid and Interface Science**, 560, 388-397 2020. **Impact parameter (2020): 8.128. Citas: 10**
5. [Magnetic Biohybrid Vesicles Transported by an Internal Propulsion Mechanism](#). Mateos-Maroto, A; Guerrero-Martinez, A; Rubio, R G; Ortega, F; **Martínez-Pedrero, F.** **ACS Applied Materials & Interfaces**. 10 35 29367-29377 2018. **Impact parameter (2018): 8.694. Citas: 7**
6. [Emergent hydrodynamic bound states between magnetically powered micropropellers](#).

- Martínez-Pedrero, F.**; Navarro-Argemi, E.; Ortiz-Ambriz, A.; Pagonabarraga, I., Tierno, Pietro. **Science Advances** 4 1 eaap9379 2018 **Impact parameter (2017): 11.511. Citas: 53**
7. **Assembly and Transport of Microscopic Cargos via Reconfigurable Photoactivated Magnetic Microdockers.** **Martínez-Pedrero, F.**; Massana-Cid, H.; Tierno, Pietro. **Small.** 2017 **Impact parameter (2017): 9.598. Citas: 40**
  8. **Colloidal Microworms Propelling via a Cooperative Hydrodynamic Conveyor Belt.** **Martínez-Pedrero, F.**; Ortiz-Ambriz, A.; Pagonabarraga, I.; et al. **Physical Review Letters** 115 13 2015 **Impact parameter (2015): 7.645. Citas: 101**
  9. **Magnetic Propulsion of Self-Assembled Colloidal Carpets: Efficient Cargo Transport via a Conveyor-Belt Effect.** **Martínez-Pedrero, F.**; Tierno, Pietro. **Physical Review Applied** 3 2015. **Impact parameter (2015): 4.070. Citas: 101**
  10. **Particle laden fluid interfaces: Dynamics and interfacial rheology.** Mendoza, Alma J.; Guzman, Eduardo; **Martínez-Pedrero, F.**; et al. **Advances in Colloid and Interface Science** 206 303-319 2014. **Impact parameter (2014): 7.776. Citas: 176**

## C.2. Congresses

1. **Magnetic Colloids Adsorbed at Fluid Interfaces Acting as Interfacial Swimmers and Colloid Adsorption Probes.** **Oral.** Confit 2022. **Corresponding author: Yes.** Grenoble, France. 11/10/2022-13/10/2022. INSTITUT LAUE-LANGEVIN. **F. Martínez-Pedrero**, et al. 2. **Transport of magnetic colloidal particles adsorbed at fluid interfaces.** **Oral.** RICI 9. **Corresponding author: Yes.** Santiago de Compostela, Spain. 10/07/2022-13/07/2022. Grupo Especializado de Coloides e Interfases. **F. Martínez-Pedrero** et al. 3. **Microparticles on a Self-Assembled 2D Lattice through an Externally Monitored Potential.** **Oral.** 35th ECIS Conference. **Corresponding author: Yes.** Athens, Greece. 05/09/2021-10/09/2021. European Colloids Interface Society **F. Martínez-Pedrero**; F. Ortega; G Rubio; C. Calero. 4. **Giant Vesicles with Encapsulated Magnetic Particles as Deformable Micro-Transporters.** **Oral.** Biological and bio-inspired materials: From responsiveness to activity. **Author of correspondence: Yes.** Madrid, Spain. 2019 Universidad Autónoma de Madrid. A. Mateos Maroto; F. Ortega; R. González Rubio; J. F. Berret; **F. Martínez-Pedrero**. 5. **Magnetic Biohybrid Giant Vesicles Transported by an Internal Propulsion Mechanism.** **Oral.** 6TH NANO TODAY. **Corresponding author: Yes.** Lisbon, Portugal. 2019. ELSEVIER PUBLISHING. A. Mateos Maroto; F. Ortega; R. González Rubio; J. F. Berret; **F. Martínez-Pedrero**. 6. **Linear Shear Rheology of Aging beta-Casein Films Adsorbing at Air/water Interface.** **Oral.** Annual European Rheology Conference. **Corresponding author: Yes** Sorrento, Italy. 2018 University of Campania. **F. Martínez-Pedrero**; et al. 7. **Magnetic Biohybrid Vesicles Transported by an Internal Propulsion Mechanism.** **Oral.** 16th conference of the International Association of Colloid and Interface Scientists. **Corresponding author: Yes.** Rotterdam, The Netherlands. 2018. International Association of Colloid and Interface Scientists. **A. Mateos Maroto**; A. Guerrero Martínez; R. González Rubio; F. Ortega; **F. Martínez-Pedrero**. 8. **Magnetic Biohybrid Vesicles Transported by an Internal Propulsion Mechanism.** **Oral.** Fises 2018 **Corresponding author: Yes.** Madrid, 2018 Real Sociedad Española de Física. A. Mateos Maroto; A. Guerrero Martínez; R. González Rubio; F. Ortega; **F. Martínez-Pedrero**. 9. **Magnetic Biohybrid Vesicles Transported by an Internal Propulsion Mechanism.** **Oral.** Bio-inspired Magnetic Systems. **Corresponding author: Yes.** Exeter, United Kingdom. 2018. University of Exeter. A. Mateos Maroto; A. Guerrero Martínez; R. González Rubio; F. Ortega; **F. Martínez-Pedrero**. 10. **Magnetic Microdockers.** **Oral.** 7th International Colloid Conference. **Corresponding author: Yes** Sitges, Spain. 2017 Elsevier. **F. Martínez-Pedrero**; et al.

## C.3. Research Projects

1. **Autoorganización y dinámica en sistemas de partículas activas y actuadas interactuantes: simulaciones y experimentos.** Funding Entity: Ministry of Education and Universities. PID2022-

140407NB-C21. Complutense University of Madrid. Amount: 121,000 from 10/2023 to 10/2026. **Principal Investigator: Fernando Martínez Pedrero, Chantal Valeriani.** Number of participating researchers: 4 **2.** *Active particles in synthetic and biological confined media.* Funding Entity: Ministry of Education and Universities. PID2019-105343GB-I00. Complutense University of Madrid. Amount: 38,000 from 06/2020 to 06/2023. **Principal Investigator: Fernando Martínez Pedrero, Chantal Valeriani.** Number of participating researchers: 4 **3.** *Dissipative processes in magnetic colloids.* Funding Entity: Banco SANTANDER. UCM/SANTANDER 2019 (PR87/19)-22536 Complutense University of Madrid. Amount: 11,960. 01/2020 to 06/2021. **Principal Investigator: Fernando Martínez Pedrero.** Number of participating researchers: 2 **4.** *Interfacial and colloidal systems for the realization of new technological applications.* Funding Entity: MINECO. Grant No. RYC-2015-18495 Complutense University of Madrid. Amount: 40.000. 01/2017 to 01/2022. **Principal Investigator: Fernando Martínez Pedrero.** Number of participating researchers: 2 **5.** *Dynamics and Assemblies of Colloidal Particles under Magnetic and Optical forces.* Funding Entity: European Research Council. University of Barcelona. Amount: 1.300.305. 2014 to 2018. **Principal Investigator: Pietro Tierno.** Number of participating researchers: 4 **6.** *Investigador. Electrical, Structural and Dynamic Properties of Nanoparticle Dispersions with Biotechnological Applications (MAT2006-12918-C05-01).* Funding Entity: National Materials Program. Ministry of Science and Technology (Spain). University of Granada. Amount: 160,930 euros. 2006 to 2009. **Principal Investigator: José Callejas Fernández.** Number of participating researchers: 5 **7.** *Investigador. Structures and Properties of Colloidal Systems in 2 and 3D (FQM 392).* Funding Entity: Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa de la Junta de Andalucía. University of Granada. Amount: 154,800 euros. 2006 to 2009. **Principal Investigator: Roque Hidalgo Álvarez.** Number of participating researchers: 31 **8.** *Investigador. Aggregation of Superparamagnetic Particles: Influence of Electrostatic Interaction, Sedimentation, Field Strength and the Degree of Magnetic Saturation of the Particles (HF2007-0007).* Funding Entity: National Program of Integrated Actions. Ministry of Education and Science (Spain). University of Granada and ESPCI (Paris) Amount: 11,270 euros. 2008 to 2009. **Principal Investigator: María Tirado Miranda** Number of participating researchers: 6 **9.** *Investigador. Micro and Nano Particles at Interfaces.* Funding Entity: Ministry of Education and Science (Spain). Universidad Complutense de Madrid. Amount: 115,000 euros. 2013 to 2016. **Principal Investigator: Francisco Ortega Gómez.** **10.** *Investigador. Treatment of elastomers from a homogeneous phase inversion.* Funding Entity: MICHELIN RECHERCHE ET TECHNIQUE S.A ESPCI (Paris). 2009 to 2010. **Principal Investigator: Jerome Bibette** Number of participating researchers: 2.

#### C.4. Contracts, technological or transfer merits

(No patent is under exploitation) **1** Miguel Ángel Rubio González; Javier Tajuelo Rodríguez; Fernando Martínez Pedrero; Ramón González Rubio; Francisco Ortega Gómez; Juan Manuel Pastor Ruiz. P201431106. Procedimiento de calibración para sondas magnéticas de reómetros interfaciales de cizalla por aguja magnética España. 23/07/2014. Universidad Nacional de Educación a Distancia. **2** Jerome Bibette; Fernando Martínez Pedrero; Benoit De Gaudemaris; Julien Berriot. 9637601. PROCESS FOR PREPARING A MASTERBATCH IN THE LIQUID PHASE Estados Unidos de América. 12/12/2012. Compagnie Generale Des Etablissements Michelin, Michelin Recherche Et Technique S.A. **3** Jerome Bibette; Fernando Martínez Pedrero; Benoit De Gaudemaris; Julien Berriot. 9145489. PROCESS FOR PREPARING A MASTERBATCH IN THE LIQUID PHASE Estados Unidos de América. 21/12/2011. MICHELIN RECHERCHE ET TECHNIQUE S.A., COMPAGNIE GENERALE DES ETABLISSEMENTS MICHELIN. **4** Jerome Bibette; Fernando Martínez Pedrero; Benoit De Gaudemaris; Julien Berriot. 9512281. PROCESS FOR PREPARING A MASTERBATCH IN THE LIQUID PHASE Estados Unidos de América. 21/12/2011. MICHELIN RECHERCHE ET TECHNIQUE S.A., COMPAGNIE GENERALE DES ETABLISSEMENTS MICHELIN.



## CURRICULUM VITAE ABREVIADO (CVA)

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

### Part A. PERSONAL INFORMATION

|                                             |                       |                                    |          |
|---------------------------------------------|-----------------------|------------------------------------|----------|
| First name                                  | ALBERTINA             |                                    |          |
| Family name                                 | CABAÑAS POVEDA        |                                    |          |
| Gender (*)                                  | ████████              | Birth date (dd/mm/yyyy)            | ████████ |
| Social Security,<br>Passport, ID number     | ██████████            |                                    |          |
| e-mail                                      | a.cabanas@quim.ucm.es | URL Web: https://www.ucm.es/leffs/ |          |
| Open Research and Contributor ID (ORCID)(*) |                       | 0000-0001-7922-5752                |          |

(\*) Mandatory

#### A.1. Current position

|                   |                                                                                                                 |                 |            |
|-------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------|------------|
| Position          | Full Professor (Catedrática)                                                                                    |                 |            |
| Initial date      | February 2022                                                                                                   |                 |            |
| Institution       | Universidad Complutense de Madrid                                                                               |                 |            |
| Department/Center | Physical Chemistry/ School of Chemical Sciences                                                                 |                 |            |
| Country           | Spain                                                                                                           | Telephon number | ██████████ |
| Key words         | Physical Chemistry, Supercritical Fluids, Phase Equilibrium, Materials, Nanoparticles, Drug delivery, Catalysis |                 |            |
| Knowledge Area    | <b>Physical Chemistry</b>                                                                                       |                 |            |

#### A.2. Previous positions (research activity interruptions, indicate total months)

| Period                    | Position/Institution/Country/Interruption cause                      |
|---------------------------|----------------------------------------------------------------------|
| Enero 1999-Diciembre 2000 | Postdoctoral Researcher/University of Nottingham/England (24 months) |
| Enero 2001-Mayo 2003      | Postdoctoral Researcher/University of Massachusetts/USA (28 months)  |
| 8 Mayo 2003- 23 Nov. 2003 | Teaching Assistant/UCM/Spain (7.5 months)                            |
| 24 Nov. 2003-4 Nov. 2007- | Ramon y Cajal Fellow/UCM/Spain (47.5 months)                         |
| 5 Nov. 2007-16 feb 2022   | Associate Professor/UCM/Spain                                        |
| 17 feb 2022- present      | Full Professor/UCM/Spain                                             |

#### A.3. Education

| PhD, Licensed, Graduate                          | University/Country                | Year      |
|--------------------------------------------------|-----------------------------------|-----------|
| Chemical Sciences PhD                            | Universidad Complutense de Madrid | Dic. 1998 |
| Chemistry Degree (5-years)<br>Physical Chemistry | Universidad Complutense de Madrid | 1988-1993 |

### Part B. CV SUMMARY (max. 5000 characters, including spaces)

Albertina Cabañas Poveda is Full Professor in the **Physical Chemistry** Department at Complutense University of Madrid (UCM) since February 2022. She obtained her PhD degree in Chemistry from UCM (best PhD Award, 1998), carrying out a thermodynamic study of mixtures with supercritical fluids. Afterwards, she made two postdoctoral stays at the University of Nottingham (U.K.) (1999-2000) where she was a Marie Curie Fellow and at the University of Massachusetts (USA) (2001-2003), investigating different techniques for making materials using supercritical fluids. In August 2003, she returned to UCM after winning a "Ramón & Cajal" contract (2003-2007).

Her research focuses on the synthesis of nanomaterials using supercritical fluids as sustainable solvents. To this end, she studies the fundamentals physicochemical properties required to carry out these processes (solubility and adsorption/impregnation of the





precursors) and their application in catalysis, gas adsorption, and pharmacology. She has pioneered the incorporation of metal nanoparticles into mesoporous supports using supercritical CO<sub>2</sub>.

She currently investigates the impregnation of drugs on biodegradable and/or biocompatible supports, and the micronization of pharmaceutical formulations using supercritical CO<sub>2</sub> as an anti-solvent. She also studies the deposition of metal nanoparticles on porous supports for biomedical applications. The aim is to achieve controlled drug release systems using more sustainable technologies.

She is particularly interested in the impregnation of antimicrobial drugs into porous and polymeric supports to avoid biofilm formation in healthcare materials and bone replacement implants. As active materials, she investigates the use of antimicrobial and natural compound mixtures that form liquid therapeutic deep eutectic Solvents (THEDES) for their improved solubility and bioavailability. Using supercritical CO<sub>2</sub> as a solvent to impregnate the drugs into the scaffolds leads to a better dispersion of the drug. She also investigates the use of sol-gel chemistry combined with supercritical CO<sub>2</sub> drying to prepare aerogel structures that can drive cell attachment.

She collaborates with research groups from the Universities of Nottingham (U.K.), University of Massachusetts (USA), University Nova of Lisbon (Portugal) and the Karlsruhe Institute of Technology (Germany), among others.

Her current scientific production according to WoS is 79 articles in international journals: 62 in Q1 (23 of them in D1), 14 in Q2 and the rest without available data; 2 book chapters; 2738/2963 total citations (WoS/Google Scholar); h index =24/26 (WoS/Google Scholar). She is co-author of one patent. She has presented numerous papers at international conferences (3 invited, 1 keynote and 24 oral presentations). She has been a visiting researcher at the University of Nottingham (UK) from August 2017 to February 2018 (6 months). She has participated in 18 research projects funded by the MEC/MICINN, the EU, the CAM and the UCM and another five with companies, and has been principal investigator of seven. **She has four six-years periods of recognized research or "Sexenios" (last 2012-2017).**

She has supervised 6 PhD Theses (one with the Best PhD Award UCM and two with European/International Mention). He has supervised 7 Master's theses (TFM) and 20 final degree projects (TFG).

Her teaching activities are carried out at UCM since 2003. **She has three five-year teaching periods or Quinquenios** (last 2013-2017). Since September 2022, she has been the Coordinator of the Ph.D. program in Advanced Chemistry at UCM (member of the commission since 2015). She has also participated in the Multidisciplinary Master in Sustainable Chemistry (previously, PhD programme) coordinated by the University Jaume I of Castellón, since 2003. In July 2021 she organized the "Sustainable Chemistry: Challenges and Opportunities" course as part of the El Escorial summer courses.

She has coordinated different outreach activities during the Science Week in Madrid at UCM in 2012, 2013, 2014 and 2015. The activities included informative talks (given by Dr. Cabañas) and guided tours to the laboratory.

She is a member of RSEQ, the Spanish Association of Compressed fluids (FLUCOMP), the International Society for the Advancement of Supercritical Fluids (ISSASF) and the Spanish Sustainable Chemistry Network. She is a member of the Journal of Supercritical Fluids Editorial Board.

## **Part C. RELEVANT MERITS** (sorted by typology)

### **C.1. Publications** (see instructions)

#### *Drug delivery: Impregnation and Micronization*

1. González J., Pérez E., Pepczynska M., Calvo L., **Cabañas A.**, Supercritical Fluid Impregnation of naproxen into mesoporous SiO<sub>2</sub> SBA-15, J CO<sub>2</sub> Utilization (2023), 73,102518. I.F.: 7.7 (2022) Position: 37/178 Engineering Chemical (**Q1**) <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2023.102518>



2. Ruiz H.K.; Serrano D.R; Calvo L.; **Cabañas A.**, Current Treatments for COVID-19: Application of Supercritical Fluids in the Manufacturing of Oral and Pulmonary Formulations, *Pharmaceutics*, 2022, 14(11):2380.I.F.: 5.4 (2022) (37/262 Pharmacology and Pharmacy **Q1**) DOI: <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics14112380> 6.525
3. Cuadra I.A., **Cabañas A.**, Cheda J.A.R., Türk M., Pando C. Cocrystallization of the anticancer drug 5-fluorouracil and coformers urea, thiourea or pyrazinamide using supercritical CO<sub>2</sub> as an antisolvent (SAS) and as a solvent (CSS), *J. Supercrit Fluids* 159, 104813 (2020) I.F.: 3.744 (2019) Posición: 39/142 Engineering Chemical **Q2**. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.supflu.2020.104813>.
4. Cuadra I., Zahran F., Martín D., Cabañas A., Pando, C., Preparation of 5-fluorouracil microparticles and 5-fluorouracil/poly(L-lactide) composites by a supercritical CO<sub>2</sub> antisolvent process, *J. Supercrit. Fluids*, 143, 64-71 (2019), I.F.: 3.481, (29/138, Engineering Chemical **Q1**), DOI <https://doi.org/10.1016/j.supflu.2018.07.027>
5. I.A. Cuadra, A. Cabañas, J.A.R. Cheda, C. Pando, Polymorphism in the co-crystallization of the anticonvulsant drug carbamazepine and saccharin using supercritical CO<sub>2</sub> as an antisolvent, *J. Supercrit. Fluids*, 136, 60–69(2018), I.F.: 3.481 (29/138 Engineering Chemical **Q1**), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.supflu.2018.02.004>
6. I. Cuadra, A. Cabañas J.A.R. Cheda, F.J Martínez-Casado y C. Pando., Pharmaceutical co-crystals of the anti-inflammatory drug diflunisal and nicotinamide obtained using supercritical CO<sub>2</sub> as an antisolvent, *J. CO<sub>2</sub> Utilization* 13, 29-37 (2016) I.F. 4.292, (15/135 Engineering Chemical **Q1**), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2015.11.006>

#### *Deposition of metal nanoparticles on porous supports for biomedical applications.*

7. E. Chamorro, M.J. Tenorio, L. Calvo, M.J. Torralvo, R. Sáez-Puche R. and **A. Cabañas**, One-step Sustainable Preparation of Superparamagnetic Iron Oxide Nanoparticles Supported on Mesoporous SiO<sub>2</sub>, *J. Supercrit Fluids* 159, 104775, (2020) I.F.: 3.744 (2019); (29/142, Engineering Chemical **Q2**), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.supflu.2020.104775>
8. A. Huerta, M.J. Torralvo, M.J. Tenorio, E. Pérez, J. Bermúdez, L. Calvo, **A. Cabañas**, Deposition of Au nanoparticle into mesoporous SiO<sub>2</sub> SBA-15, *J. Supercrit Fluids* 184, 105582184 (2022) I.F.:4.514 (2021) (48/143, Engineering Chemical **Q2**). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.supflu.2022.105582>

#### *Therapeutic Deep Eutectic Solvents (THEDES):*

9. E. Pérez,\* S. Rato, G. Loaisa, A. Cabañas, Phase equilibria for the mixtures of the deep eutectic solvent menthol + thymol plus CO<sub>2</sub> at high pressure, *Journal of Industrial & Engineering Chemistry*, 121, 312-32 (2023) IF:6.1, (23/140, Engineering Chemical **Q1**)

#### *Surface modification:*

10. M.J. Tenorio, J. Morère, C. Carnerero, M.J. Torralvo, C.Pando, and A. Cabañas, Thiol group functionalization of mesoporous SiO<sub>2</sub> SBA-15 using supercritical CO<sub>2</sub>, *Microporous and Mesoporous Materials*, 256,147-154 (2018) I.F.: 3.649 (66/284 Material Science, Multidisciplinary **Q1**), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2017.07.056>

**C.2. Congress**, indicating the modality of their participation (invited conference, oral presentation, poster)

**A. Cabañas**, "Synthesis of Nanostructured Materials Using Supercritical CO<sub>2</sub>" **Oral – Invited conference**, Scientific Discussion Meeting organized by the Royal Society, Londres (Reino Unido) Abril 13-14 (2015).

**A. Cabañas**, J. Morere, M.J. Tenorio, S. Royuela, C. Pando,"Strategies to deposit metal nanoparticles into porous supports from supercritical CO<sub>2</sub> solutions", **Oral – Invited**



**conference**, "Sustainable Manufacturing of Nanomaterials and their Organization for Hybrid Device Structures" (SMNOHDS 2013), Ile d'Oléron, France, Junio 11-14 (2013).

**A. Cabañas**, J. Morére, M.J. Tenorio, C. Pando, J.A.R. Renuncio, Metal Deposition on Porous Supports Using Supercritical CO<sub>2</sub>, **Oral – Invited conference**, 3<sup>rd</sup> International Solvothermal and Hydrothermal Association (ISHA) Conference, Austin, Texas (USA), Enero 13-17, 2013

**C.3. Research projects**, indicating your personal contribution. In the case of young researchers, indicate lines of research for which they have been responsible.

#### *Health and Drug delivery*

PID2022-137847OB-I00, Esterilización y materiales estériles usando técnicas basadas en CO<sub>2</sub>SC. Aplicación en la inactivación de biofilms en prótesis ortopédicas. **P.I.:** Lourdes Calvo y **Albertina Cabañas** 01/01/2024 hasta: 01/01/2027, Funding: 201.250,00€.

Anticipación y prevención de COVID-19 en la Comunidad de Madrid, Fondo Europeo de Desarrollo Regional de la UE a través de CAM, 1/12/2021-31/12/2022, P.I.: Lourdes Calvo, 187.501 € **A. Cabañas** is involved in the characterization of the contaminated health care material after its sterilization with supercritical CO<sub>2</sub>.

RTI2018-097230-B-I00, Engineering advanced drug delivery systems incorporating metallic nanoparticles based on supercritical CO<sub>2</sub> technologies (ENDER), MICINN, **P.I.:** **Albertina Cabañas** y Lourdes Calvo, 01/01/2019 hasta: 31/12/2021, Funding: 98.010 €.

PR75/18-21583, Preparación de nanomateriales híbridos de metales y fármacos sobre soportes biocompatibles para liberación controlada utilizando CO<sub>2</sub> supercrítico. UCM-Santander, **P.I.:** **Albertina Cabañas**, 1/01/2019 01/06/2020 Funding: 9.000€

CTQ2013-41781-P, Preparación de nanomateriales en CO<sub>2</sub> supercrítico y su aplicación en catálisis y farmacología, MICINN, **P.I.:** **Albertina Cabañas** y Concepción Pando, 1/01/2014-31/12/2016, Funding: 119.790 €

CTQ2010-16940, Síntesis de materiales Nanoestructurados y precipitación de micro y nanopartículas utilizando CO<sub>2</sub> supercrítico, MICINN, P.I.: Concepción Pando, UCM, 1/01/2011-31/12/2014, Funding: 101.000 €. **A. Cabañas** led the research on nanostructured materials using supercritical CO<sub>2</sub>.

*Others:* (18/15ACT/21), Rompiendo la brecha de género en I+D+i: emprendimiento de mujeres con vocaciones STEM, Ministerio de Igualdad P.I.: Dolores R. Serrano, 01/01/2021 – 31/12/2021 Funding: 18.033,34 €.

**C.4. Contracts, technological or transfer merits**, Include patents and other industrial or intellectual property activities (contracts, licenses, agreements, etc.) in which you have collaborated. Indicate: a) the order of signature of authors; b) reference; c) title; d) priority countries; e) date; f) Entity and companies that exploit the patent or similar information, if any

Art. 83 Project- 83-2020, "Extracción de planta de cáñamo industrial", Good Earth, S.L. 26/02/2020 to 26/03/2021 I.P.: Lourdes Calvo. Funding: 2.250 €

Art. 83 Project, "Reciclado de envases y plásticos mediante el uso de Fluidos Supercríticos", Empresa/Administración financiadora: C INST.TECNOLÓGICO EMBALAJE, TRANSPORTE Y LOGÍSTICA (613-2019) I.P.: Lourdes Calvo y **Albertina Cabañas**, UCM,

Art. 83 Project, " Extracción de impurezas de polímeros naturales con gases supercríticos ", Empresa/Administración financiadora: Corticeira Amorim & Irmãos, S.A., I.P.: Lourdes Calvo y **Albertina Cabañas**, UCM, 15/12/2010 to 30/04/2011 Funding: 30.000 €

|               |            |
|---------------|------------|
| Fecha del CVA | 20/09/2023 |
|---------------|------------|

## Parte A. DATOS PERSONALES

|                                            |                      |                     |  |
|--------------------------------------------|----------------------|---------------------|--|
| Nombre                                     | Cristina             |                     |  |
| Apellidos                                  | Sanz Sanz            |                     |  |
| Sexo                                       |                      | Fecha de Nacimiento |  |
| DNI/NIE/Pasaporte                          |                      |                     |  |
| URL Web                                    |                      |                     |  |
| Dirección Email                            | cristina.sanz@uam.es |                     |  |
| Open Researcher and Contributor ID (ORCID) |                      |                     |  |

### A.1. Situación profesional actual

|                         |                                                                                                              |          |  |
|-------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|--|
| Puesto                  | Associate Professor, Tenured (Profesora Titular)                                                             |          |  |
| Fecha inicio            | 2023                                                                                                         |          |  |
| Organismo / Institución | Universidad Autónoma de Madrid                                                                               |          |  |
| Departamento / Centro   | Departamento de Química Física Aplicada / Facultad de Ciencias                                               |          |  |
| País                    |                                                                                                              | Teléfono |  |
| Palabras clave          | Química cuántica; Química atmosférica y ambiental; Dinámica molecular; Química computacional; Espectroscopía |          |  |

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

| Periodo     | Puesto / Institución / País                                                                |
|-------------|--------------------------------------------------------------------------------------------|
| 2019 - 2019 | Postdoctoral researcher / Universidad de Salamanca / España                                |
| 2013 - 2018 | PhD assistant professor (Profesora Ayudante Dra) / Universidad Autónoma de Madrid / España |

### A.3. Formación académica

| Grado/Master/Tesis                                          | Universidad / País              | Año  |
|-------------------------------------------------------------|---------------------------------|------|
| European PhD on Applied Physical Chemistry                  | Autonomous University of Madrid | 2005 |
| DEA-Advanced studies certificate                            | Autonomous University of Madrid | 2002 |
| Master in Science                                           | Autonomous University of Madrid | 2000 |
| Degree in Chemical Sciences, Physical Chemistry orientation | Autonomous University of Madrid | 1998 |

## Parte B. RESUMEN DEL CV

I'm an associate professor (tenured) in the department of Applied Physical Chemistry, in Autonomia University of Madrid (UAM) (starting on 1 Septiembre 2023). I am part of a partner unit UAM-CSIC(Institute of Fundamental Physics (CSIC) in Madrid). I obtained the bachelor's degree in Chemistry (Physical Chemistry specialisation) in 1998 and the PhD in 2005 at UAM. The PhD thesis was supervised by Prof. Miguel Paniagua (UAM) and Prof. Octavio Roncero (CSIC) and was carried out at the Autonomia University, Institute of Fundamental Physics (CSIC) and the Catholic University of Nijmegen (The Netherlands). In the PhD thesis I studied the collision and photoinitiated processes of harpoon mechanisms in two triatomic systems.

My postdoctoral activity started with a temporary position in the department of Applied Physical Chemistry at UAM (Spain). In 2006 I was granted with a Ministry of Education (Spain) 2 years fellowship to work in the University of Bristol (UK) under the supervision of Prof. Gabriel Balint-Kurti, studying Optimal Control of photodissociation processes. Together with Prof. Graham A. Worth (Universtiy of Birmingham) we were granted with a three years project from the Engineering and Physical Science Research Council (EPSRC) in 2008. The project was funded

to study the Dynamic Stark control of photodissociation processes. In 2010 I was back in Spain as a postdoctoral fellow under a Consolidator national project grant to study the photodissociation and collision processes of molecules of interstellar interest. I joined the group of Prof. Octavio Roncero in CSIC (Spain) for three years under this project before obtaining the PhD assistant professor at UAM. The tenure track finished in December of 2018 and I was promoted to associate professor. As part of the Applied Physical Chemistry department I continue with the research in the fields of electronic structure calculations and quantum dynamics as well as the control of reactivity. I have also started a collaboration with the group of Dr. Pablo Jambrina in the University of Salamanca studying spin forbidden transitions in enzymes.

I maintain several collaborations with national and international groups, all funded with national and European projects. Working in the university I fulfill with the teaching duties given by the department and I'm fully involved in the coordination tasks of the department. In 2017 I obtained the accreditation to be part of the DoIng (from "Docencia en Inglés", English teaching) plan started by the University providing Spanish/English bilingual degrees.

My research activity has been recognised by ANECA agency with three six-years periods (3 sexenios investigación).

## Parte C. LISTADO DE APORTACIONES MÁS RELEVANTES

### C.1. Publicaciones más importantes en libros y revistas con "peer review" y conferencias

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

- Artículo científico.** Pablo Ortega; Dr; Dr; Dr; Dr. (4/5). 2023. Spin-forbidden addition of molecular oxygen to stable enol intermediates decarboxylation of 2-methyl-1-tetralone-2-carboxylic acid. International Journal of Molecular Science. MDPI.
- Artículo científico.** Jorge Alonso de la Fuente; Dr; Dr; Dr; Dr; Prof. (2/6). 2023. The CH-anion: Inelastic rate coefficients from collisions with He at interstellar conditions. Journal of Physical Chemistry A. American Chemical Society. 127, pp.765-774.
- Artículo científico.** Dr; Daniel Félix González; Dr; Dr; Dr; Dr. (4/6). 2023. Vibrational, non-adiabatic and isotopic effects in the dynamics of the  $H_2 + H_2^+ \rightarrow H_3^+ + H$  reaction: application to plasma modelling. Molecular Physics. Taylor and Francis. e2183071.
- Artículo científico.** ; Dr; Dr; Dr; Dr; Dr; Prof. (3/6). 2022. Mixed-quantum-classical or fully-quantized dynamics? A unified code to compare methods. Philosophical transactions of the royal society A. The royal society publishing. 380, pp.20200386-1-20200386-18.
- Artículo científico.** Dr; Prof.; Dr; Cr. (4/4). 2021. Vibrational effects in the quantum dynamics of the  $H + D_2^+$  charge transfer reaction. Molecular Physics. Taylor and Francis.
- Artículo científico.** Pablo Ortega; Dr; Anzhela Veselinova; Dr; Dr; Dr; Cr (AC). (7/7). 2021. Multi- and single-reference methods for the analysis of multi-state peroxidation of enolates. Journal of Chemical Physics. American Institute of Physics. 154, pp.144303-1-144303-10.
- Artículo científico.** Dr; Dr; Prof. (1/3). 2021. Near-resonant effects in the quantum dynamics of the  $H + H_2^+ \rightarrow H_2 + H^+$  charge transfer reaction and isotopic variants. Journal of Chemical Physics. American Institute of Physics. 154, pp.104104-1-104104-12.
- Artículo científico.** Pablo Ortega; Dr; Dr; Dr; Dr; Dr. (3/5). 2021. DpgC-Catalyzed Peroxidation of 3,5-Dihydroxyphenylacetyl-CoA (DPA-CoA): Insights into the Spin-Forbidden Transition and Charge Transfer Mechanisms. Chemistry - A European Journal. 27, pp.1700-1713.
- Artículo científico.** Dr; Dr; Dr (AC). (3/3). 2020. Three states global fittings with improved long range: singlet and triplet states of  $H_3^+$ . Physical Chemistry Chemical Physics. 21, pp.7735-7747.



- 10 **Artículo científico.** Dr; Dr; Dr; Prof. (1/4). 2019. Quantum Effects on the  $D + H_3^+ \rightarrow H_2D + + H$  Deuteration Reaction and Isotopic Variants. The Journal of Physical Chemistry A. American Chemical Society. 123, pp.8766-8775.
- 11 **Artículo científico.** Dr (AC); Prof. (1/2). 2019. Field modified spin-orbit potential curves of IBr. Preliminary dynamical results. Physical Chemistry Chemical Physics. 21, pp.14429-14439.
- 12 **Artículo científico.** Dr; Dr; Prof; Dr. (1/4). 2015. Non-adiabatic couplings and dynamics in proton transfer reactions of  $H_n^+$  systems: Application to  $H_2 + H_2^+?$   $H + H_3^+$  collisions. Journal of Chemical Physics. American Institute of Physics. 143-23, pp.234303.

## C.2. Congresos

- 1 Dr; Dr; Dr. Multi-state global fitting of the singlet and triplet potential energy surfaces of  $H_3^+$ . Quantum dynamics calculations.. International meeting on atomic and molecular physics and chemistry - IMAMPC2022. J. Heyrovsky Institute of Physical Chemistry. 2022. República Checa. Participativo - Póster. Congreso.
- 2 Dr. Control of the dissociation of IBr: Stark effect or pulse delayed excitation/de-excitation effect?. 2021 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies - PACIFICHEM2021. The Chemical Society of Japan. 2021. Estados Unidos de América. Participativo - Ponencia invitada/ Keynote. Congreso.
- 3 Dr; Dr; Dr. DIM-based multi-state global fitting of + the potential energy surfaces of  $H_3$ . Preliminary dynamic calculations.. 2021 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies - PACIFICHEM2021. The Chemical Society of Japan. 2021. Estados Unidos de América. Participativo - Póster. Congreso.
- 4 Pablo Ortega; Anzhela Veselinova; Dr; Dr; Dr; Dr; Dr. Multi and single-reference study of spin-forbidden addition of  $O_2$  catalyzed by DpgC. 2021 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies - PACIFICHEM2021. The Chemical Society of Japan. 2021. Estados Unidos de América. Participativo - Póster. Congreso.
- 5 Javier Hernández; Dr; Dr; Prof. A chemical system of astrochemical interest,  $LiH_2^+$ : New Potential Energy Surfaces and Dynamics studies.. RSEQ Symposium. Real Sociedad Española de Química. 2021. España. Participativo - Póster. Congreso.
- 6 Javier Hernández; Dr; Dr; Prof. Potential energy surfaces of  $LiH_2^+$  for singlet and triplet states and quasiclassical trajectory study of  $LiH^+ + H$  and  $LiH + H^+$ . International Symposium on Molecular Beams - ISMB2021. FORTH - Institute of electronic structure and laser. 2021. Grecia. Participativo - Póster. Congreso.
- 7 Dr; Dr; Dr. DIM-based multi-state global fitting of the potential energy surfaces of  $H_3^+$ . Preliminary dynamic calculations. Multi and single-reference study of spin-forbidden addition of  $O_2$  catalyzed by DpgC. Processes in Atmospheric and Astrochemical environments (PATAS2021) - MD-Gas COST Action CA18212. COST. 2021. España. Participativo - Póster. Congreso.
- 8 Dr. Multisheeted global fit of CBS energies of the lowest singlet and triplet states of  $H_3^+$ . Collisional Excitation of Hydrides in the Interstellar Medium. Universidad de Salamanca. 2019. España. Participativo - Póster. Congreso.
- 9 Dr. Field-modified-potential-energy-curves-control of the dissociation branching ratio in the IBr system. 26th International Symposium on Ion-Atom Collisions (ISIAC). Sorbonne University. 2019. Francia. Participativo - Ponencia oral (comunicación oral). Congreso.
- 10 Dr. How to control the photodissociation of a diatomic molecule modifying the potential energy curves with a laser pulse: Application to IBr system. Extended software development workshop in quantum dynamics. University of Durham. 2019. Reino Unido. Participativo - Ponencia oral (comunicación oral). Jornada.
- 11 Dr; Prof.. IBr branching ratio using excitation and control pulses parallel to molecular axis. High Dimensional Quantum Dynamics 2018 (HDQD). Université des Sciences et Technologies de Lille. 2118. Francia. Participativo - Ponencia oral (comunicación oral). Congreso.
- 12 Dr; Dr; Prof.. Multi-states global fitting of Singlets and Triplets of  $H_3^+$ : analytical description of potential surfaces and non-adiabatic couplings. 11th Congress on Electronic Structure Principles and Applications (ESPA-2018). Universidad Autónoma de Madrid. 2018. España. Participativo - Póster. Congreso.

- 13 Dr; Dr; Prof.. Three triplet and singlet states global fitting of H3+ with improved Long-Range description. IMAMPC2018: 9th International Meeting on Atomic and Molecular Physics and Chemistry. Helmholtz zentrum Berlin. 2018. Alemania. Participativo - Póster. Congreso.

### C.3. Proyectos o líneas de investigación

- 1 **Proyecto.** PID2021-122549NB-C22, Potenciales de interacción de sistemas poliatómicos - PID2021-122549NB-C22. Cristina Sanz Sanz. (Universidad Autónoma de Madrid). 01/09/2022-31/08/2025. 84.700 €. Investigador principal.
- 2 **Proyecto.** FIS2017-83473-C2-2-P, Colisiones y fotodisociación de interés astrofísico en fase gas y en hielos y dinámica en superficies(FIS2017-83473-C2-2-P). Alfredo Aguado Gómez. (Universidad Autónoma de Madrid). 01/01/2018-31/12/2020. 48.400 €. Miembro de equipo.
- 3 **Proyecto.** FIS2014-52172-C2-2-P, Dynamic and stochastic processes in molecular astrophysics and in the gas-surface interaction (FIS2014-52172-C2-2-P). Alfredo Aguado Gómez. (Universidad Autónoma de Madrid). 01/01/2015-31/12/2017. Miembro de equipo.