











Informe anual / Annual report 2020

Carta del director 3 Letter from director

Grupos de Investigación 6 Research Groups

Personal adscrito al Centro en 2020 14 Directory

Publicaciones 16 Publications

Conferencias impartidas en Congresos y Reuniones Científicas 20 Congresses. Trainning Programmes

Libros. Capítulo de libros 23 Books. Chapter books

Premios. Reconocimientos 25 Awards. Recognitions

Tesis. Trabajos Fin de Grado. Trabajos Fin de Máster 27 Thesis. Final Degree Project. Master Thesis

Proyectos/Contratos 30 Proyects/Contracts

Programa de Seminarios y Conferencias 33 Research Seminars

Carta del director Letter from director



Pedro J. Pérez

Cuando me dispongo a escribir esta introducción a la Memoria anual de actividades de 2020 no me cabe ninguna duda del carácter singular de la misma. A poco de comenzar el año, España se sumergió, al igual que el resto del mundo, en la pandemia suscitada por el virus COVID-19 que aún en estos momentos (enero de 2021) sigue matizando el día a día en el planeta. Es mi primer deseo que cuando se complete la próxima Memoria dentro de un año, el efecto del virus sobre nuestra sociedad haya decaído notablemente, y se haya producido la victoria ansiada por todos.

La situación vivida por todos a lo largo de 2020 nos ha llevado a confinamientos domiciliarios (marzo-mayo) y a numerosas medidas de control y vigilancia, que naturalmente han sido igualmente observadas en el CIQSO. Desde mediados de marzo a mediados de mayo la actividad presencial estuvo limitada en la Onubense, y nuestro Centro estuvo sin actividad presencial, a excepción del Laboratorio de Contaminación Atmosférica, que continuó con sus medidas de control, tan necesarias en nuestro entorno. A mediados de mayo se permitió el retorno y desde entonces el CIQSO mantuvo una incorporación de más del 90% de su personal durante el resto del año.

Conviene señalar que las condiciones del trabajo diario, con mascarillas de manera constante, máxima ventilación, limitación de reuniones personales, etc., no ha sido óbice para que nuestro Centro haya originado una productividad científica en 2020 que no difiere, pese al parón mencionado, de la de años anteriores. Esta Memoria recoge los resultados de la investigación que han visto la luz en 2020. Tan sólo el apartado de conferencias en congresos ha visto reducido su tamaño, debido a la cancelación de numerosos eventos, mientras que el número de publicaciones ha crecido con respecto al del año anterior. Quisiera agradecer a todo el personal que desarrolla su actividad en el Centro por su esfuerzo en unas condiciones bien distintas de las habituales.

La situación vivida en este año llevó asimismo a posponer la celebración de una efeméride especial, el décimo aniversario de la creación del CIQSO, que tuvo lugar a comienzos de 2010. Era nuestro deseo realizar un recorrido por esta década de trabajo, esfuerzo, ilusión y sacrificio, para mostrar el camino recorrido. Queda pendiente hasta que pueda realizarse de manera satisfactoria.

A mediados de este año tuvo lugar la renovación del equipo de dirección, después de cuatro años de servicio. Quisiera agradecer al Director saliente, Tomás R. Belderraín, y a su equipo, la labor desempeñada en ese tiempo, en el que nuestro Centro ha continuado creciendo. Asimismo, extiendo mi agradecimiento a quienes actualmente me acompañan en el equipo de dirección, por haber aceptado, de manera desinteresada como ocurre en estos casos, acompañarme para continuar con esta tarea de seguir mejorando día a día para proporcionar a la sociedad conocimiento sobre una química sostenible.

There is no doubt that this 2020 Annual Report appears as a singularity within the collection of reports generated to date. Shortly after the year started, Spain got into, as well as the whole world, the pandemicgenerated by COVID-19, which still (January 2021) hits our daily way of life. I hope that within a year, when the next Annual Report is written in 2022, this crisis has been beaten or, at least, mitigated as much as possible.

This situation made 2020 a year where we all suffered from lockdowns at homes, or at our cities and villages, and obviously CIQSO was not an exception. From March to May the activity at laboratories was not permitted, with the exception of the Air Pollution Lab which continued with their fundamental measurements, established as an essential activity. In mid-May we got back to action in the R. H. Grubbs building, and since then, we have averaged nearly 90% average of occupation.

Working conditions have been, however, marked by the disease. Wearing masks at all times, continuous ventilation of laboratories and offices, meetings performed via videoconferences, even between researchers in wall-to-wall offices, etc, have not been a drawback to maintain the scientific production. Actually, the number of entries in Web of Science published in 2020 is slightly larger than that in 2018 or 2019. This Report shows the main production obtained along 2020. Only the sections corresponding to Meetings displays a significant decrease, due to the cancellation of most of the Meetings along the year. On the other hand, publications in journals has increased, 2020 being the year with the highest value for this indicator in the history of CIQSO. I would like to thank all members of the Center for their commitment to maintain the standards despite the non-favorable situation along this year.

Another collateral damage induced by COVID-19 has been the cancellation of several actions to celebrate the 10th anniversary of the creation of CIQSO, which started in January 2010. We wanted to show the society the work carried out during this decade, with devotion, illusion as well as sacrifice under certain non-favorable conditions. This is postponed until the situation in Spain sufficiently improves.

At the middle of the year, the Direction Team ended the term, after four years of service. I would like to thank the former Director, Tomás R. Belderraín, and his team, for their work during that time, and for the actions promoted to enhance the value and visibility of CIQSO. I also wish to thank the availability of the current members of the Direction Team for having accepted the challenge to continue with this task of improving our Center day by day to develop knowledge that is useful for society.



Grupos de Investigación Research Groups



Laboratorio de Catálisis Homogénea Homogeneous Catalysis Laboratory

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Los hidrocarburos (saturados e insaturados) son sustratos procedentes de la industria petroquímica que por su disponibilidad y bajo coste relativo les hace excelentes candidatos para su uso como materiales de partida en reacciones que permitan su conversión en otras moléculas más complejas con un alto valor añadido. Nuestro grupo de investigación ha centrado sus esfuerzos en los últimos años en el desarrollo de catalizadores basados en metales de transición (principalmente del grupo 11) que induzcan estas transformaciones mediante procesos que transcurran a temperatura ambiente (o moderada), con un alto grado de selectividad atómica (reducción de subproductos no deseados) y que lleven a la obtención de productos de interés para el sector de la química fina o farmacéutica.

Funcionalización de enlaces C-H sp³ de hidrocarburos o sp² de arenos mediante reacciones de inserción de grupos carbeno (desde diazocompuestos), nitreno (desde iminoiodonanos o cloramina-T) u oxo (desde peróxido de hidrógeno). Una de las líneas más recientes aborda la realización de estos procesos en condiciones supercríticas. Reacciones de adición radicalaria/de polimerización por transferencia de átomo (ATRA/ATRP). Este tipo de reacciones hace uso de catalizadores basados en cobre y permite la adición selectiva de sustratos polihalogenados a dobles enlaces (ATRA) o la polimerización controlada de olefinas mediante un proceso radicalario inducido por un complejo metálico (ATRP).

Reacciones de acoplamiento de haluros de arilo con aminas o amidas. Esta línea de investigación se centra en el desarrollo de catalizadores de cobre y níquel bien definidos para reacciones de acoplamiento del tipo Goldberg o Ulmann.

Reacciones de cicloadición [3+2] de alquinos y azidas. El empleo de catalizadores de cobre ha permitido el desarrollo de procesos de síntesis de triazoles o de oxazoles, según se empleen sulfonil- o acil-acidas, respectivamente.





RESEARCH PROJECTS

Hydrocarbons, either saturated or unsaturated, are readily available from oil refineries at a low price. Because of this, they are potentially good candidates as raw materials for the synthesis of other, more complex, value-added molecules. The overall goal of our group is, following previous work from these laboratories, the development of metal-based catalysts for reactions that lead to such achievement. Moderate reaction conditions and high degree of atomic selectivities with minimization of nondesired byproducts are required features in these synthetic processes.

Functionalization of $\rm sp^3$ C-H bonds of hydrocarbons or $\rm sp^2$ C-H bonds of arenes. This goal can be achieved either by carbene insertion (from diazo compounds), nitrene insertions (from iminoiodonanes or chloramine-T) or oxo insertions (from hydrogen peroxide). Recently we have started to expand these systems to the use of supercritical fluids as the reaction medium.

Atom transfer radical additions (ATRA) and atom transfer radical polymerization (ATRP) reactions. Copper-based complexes have already been developed in our laboratory as good catalysts for ATRA reactions. We continue improving the catalytic capabilities of our catalysts and expanding the scope from ATRA to ATRP reactions. Coupling reactions of aryl halides with amines or amides. We are also interested in the development of isolated, well-defined copper complexes as catalysts for this transformation, so-called Goldberg and Ulmann coupling reactions.

[3+2] cycloaddition reactions. The use of copper-based catalysts has alloed the conversion

al alkynes and sulfonyl- or acyl-azides into triazoles or oxazoles, respectively.



Laboratorio de Síntesis y Fotoquímica Orgánica Organic Synthesis and Photochemistry Laboratory

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Las líneas de investigación de nuestro grupo se basan en la fotoquímica orgánica aplicada en una variedad de contextos. Estos incluyen:

a) El diseño y explotación de fotointerruptores moleculares y cromóforos fluorescentes para la implementación de información a escala nanomolar y lógica molecular. b) El desarrollo de ensamblaies supramoleculares anfitrión-huésped como vehículos activados por luz para el transporte y liberación de moléculas biológicamente relevantes. c) El diseño de novedosos cromóforos organoboros con aplicaciones en bioimagen de fluorescencia.

Nuestros esfuerzos van dirigidos a desarrollar arquitecturas orgánicas que puedan ser usadas en agua y bajo condiciones fisiológicamente relevantes. Nuestra metodología integra el diseño molecular, la síntesis orgánica, con caracterización completa por espectroscopía óptica, química supramolecular, y otras técnicas aplicadas tales como la microscopía de fluorescencia confocal.

RESEARCH PROJECTS

The research program of our group is focused on applied organic photochemistry in a variety of contexts. These include:

- a) The design and exploitation of molecular photoswitches and fluorescent chromophores for the implementation of nanoscale information processing and molecular logic
- b) The development of supramolecular host-quest assemblies as light-activatable vehicles for the transport and release of biologically relevant cargo c) The design of novel organoboron chromophore platforms with applications in fluorescence bioimaging.

We strive especially to develop organic architectures that can be used in water and under physiologically relevant conditions. Our methodological approach integrates informed molecular design, organic synthesis, thorough characterization by optical spectroscopies, supramolecular chemistry, and application-oriented techniques such as confocal fluorescence microscopy.





Laboratorio de Contaminación Atmosférica Atmospheric Pollution Laboratory

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

La principal línea de investigación del grupo de Contaminación Atmosférica está relacionada con la obtención de nuevas técnicas y protocolos para cuantificar y evaluar las fuentes (naturales y antropogénica) de contaminación del aire empleando herramientas geoquímicas y modelización.

Los resultados de la monitorización del aire analizando más de 65 componentes inorgánicos y elementos, además de especies de elementos y relaciones isotópicas, permiten elaborar mapas geoquímicos a nivel regional. De esta forma se evalúan:

- 1) Cumplimientos de los límites de las Directivas europeas.
- 2) El fondo y máximos para cada componente inorgánico y elementos y evaluar el origen de los aerosoles derivados de emisiones industriales, tráfico e intrusiones saharianas. Finalmente, en colaboración con ARL-NOAA se pronostica la calidad del aire empleando el modelo HYSPLIT con alta resolución espacial y temporal.
- 3) El análisis de especiación de elementos de interés ambiental, como el arsénico o el antimonio, mediante técnicas acopladas de cromatografía y espectroscopia atómica/espectrometría de masas, que permite distinguir entre sus formas químicas y/o estados de oxidación.

Finalmente, en colaboración con ARL_NOAA se pronostica la calidad del aire.

RESEARCH PROJECTS

The main research project in our group es focussed toward the development of new tecniques and protocols to quantify the sources (natural as well as anthropogenic in origin) of air pollution. To accomplish such goals, we use several geochemical as well as computer- aid modelization tools.

Our lab routinely monitor ca. 65 elements or inorganic compounds, along with several species and isotopic ratios that provide the relevant information required to generate geochemical maps of the Andalusian region. The control of the industrial emissions, trafic as well as dust from North Africa is also controlled.

Speciation analysis of elements of environmental interest, such as arsenic and antimony, using liquid chromatography coupled to atomic spectroscopy/mass spectrometry. This allows the determination of the different chemical compounds. Finally, in collaboration with the ARL-NOAA, our lab provides the forecast of air quality usin the HYSPLIT model at a very high spatial as well as temporal resolution.





Laboratorio de Simulación Molecular y Química Computacional

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

- 1. Desarrollo y aplicación de la Teoría Estadística de Fluidos Asociantes (Statistical Associating Fluid Theory) SAFT para la predicción del equilibrio de fases. 2. Determinación de propiedades interfaciales mediante Teoría Funcional de la Densidad (DFT).
- 3. Aplicación de la Teoría de la Densidad del Gradiente para la predicción de propiedades interfaciales de mezclas.
- 4. Determinación de propiedades interfaciales mediante simulación Monte Carlo. 5. Desarrollo de nuevas técnicas de simulación para sistemas inhomogéneos.
- 6. Equilibrio de fase de mezclas de clatratos hidratos.
- 7. Aplicación de métodos analíticos basados en EPMA (electro-microprobeanalizer), XRF (X Rayfluorescense), XRD (X Raydifracction), CSD (Crystalsize Distribution) y SEM (scanning electro microscope).
- 8. Aplicación de la técnica computacional de modelado CFD (Computacional Fluid Dynamics).

RESEARCH LINES

- 1. Development and application of the Statistical Associating Fluid Theory or SAFT for predicting phase equilibria.
- 2. Determination of interfacial properties using Density Functional Theory (DFT). 3. Application of Density Gradient Theory for predicting interfacial properties of mixtures.
- 4. Determination of interfacial properties using Monte Carlo simulation...
- 5. Development of new computer simulation techniques for inhomogeneous systems.
- 6. Phase equilibria of mixtures of clathrate hydrates.
- 7. Application of anylitical methods base don EPMA (electro-microprobe analyzer), XRF (X Ray fluorescense), XRD (X Ray difraction), CSD (Crystal size Distribution) and SEM (scanning electro microscope).
- 8. Application of Computational Fluid Dynamics for solving dynamic problems involving copper recovery.





Laboratorio de Química Organometálica Supramolecular y de los Grupos Principales Laboratory of Supramolecular Organometallic and Main Group Chemsitry

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

La investigación de este joven equipo de investigación se divide en dos vertientes principales. Por un lado, el estudio de la reactividad de sistemas organometálicos de elementos de los grupos principales en bajo estado de oxidación y su combinación con metales de transición; y por el otro, la encapsulación de sistemas organometálicos catalíticos en estructuras supramoleculares. Ambas líneas tienen como objetivo común la aplicación de estos sistemas moleculares y supramoleculares en procesos de catálisis para la activación de moléculas poco reactivas para la producción de productos con un valor añadido. Específicamente, este equipo tiene un marcado interés por activar y transformar dióxido de carbono (CO2), de relevancia en el sector industrial, concretamente en el sector energético, por sus implicaciones en el calentamiento global, y en la búsqueda de procesos sostenibles de energía renovable con emisiones cero de carbono.

Esta investigación se centra en explorar y comprender la química de los sistemas organometálicos de metales de los grupos principales en bajos estados de oxidación cuando están enlazados a metales de transición. Este tipo de interacciones entre metales con distintas reactividades en la primera esfera de coordinación del metal de transición proporciona sistemas catalíticos con una estabilidad y patrones de reactividad y selectividad mejorados. Por otro lado, una forma alternativa de influenciar y mejorar tanto la estabilidad, como de incrementar la reactividad y selectividad de un sistema catalítico se consigue mediante modificación de la segunda esfera de coordinación. Esto es posible mediante la encapsulación de estos sistemas en cavidades de tipo macromolecular y supramolecular. Este efecto de encapsulación permite controlar la segunda esfera de coordinación de forma precisa e influenciar el modo que las moléculas tienen para combinarse con el catalizador (control de las interacciones intermoleculares en catálisis). Se trata de una estrategia muy potente para controlar tanto la reactividad, como la selectividad y estabilidad de un centro catalitico activo, muy semejante al modo de funcionamiento de una enzima en catálisis.





Actualmente, este grupo de investigación lo forman, Hellen Videa (estudiante de doctorado), Noelia Jiménez Sierra (estudiante de Máster), Patricia Porras Suárez (estudiante de proyecto de fin de grado), y está liderado por el Dr. Antonio Martínez (IP, investigador Ramón y Cajal). A pesar de las adversas circunstancias de este año 2020 derivadas de la situación en que vivimos de pandemia mundial por el virus SARS-COV-2, este equipo ha mantenido siempre la ilusión dentro y fuera del laboratorio, y un alto nivel de trabajo experimental. Asimismo, este equipo ha consequido dos proyectos del Ministerio durante este año, uno del Plan Estatal 2019, y el otro en la selecta convocatoria "Europa Excelencia 2020". También ha firmado un primer contrato de transferencia hacia el sector industrial onubense y con AIQBE (Asociación de Industrias Químicas, Básicas y Energéticas de Huelva).

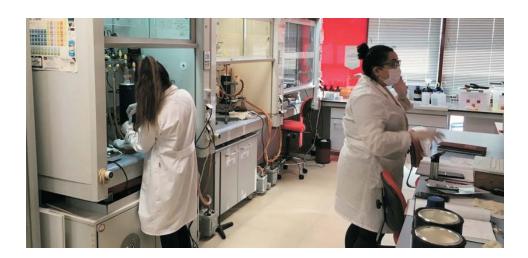
RESEARCH PROJECTS

The research from this young team can be divided into two main streams. On one side, the study of low-valent main group organometallics systems' reactivity and their bonding to transition metals. On the other side, the encapsulation of organometallic catalytic systems inside supramolecular hosts. Both research avenues respond to the same call, finding molecular and supramolecular catalytic systems able to activate "inert" molecules. In particular, the activation of CO2 is of interest to this research team because of its environmental implications to the chemical and energy industries in developing a sustainable way to transform energy with cero carbon emissions.

This research focuses on exploring and understanding the chemistry of organometallic systems of low-valent Main Group metals when they are bonded to a transition metal. This metal-metal interaction allows the tune of the transition metal's first coordination sphere, providing fine control over stability, reactivity, and selectivity to the system. An additional and powerful way to control the system's properties is to modify the second coordination sphere. The latter is possible by designing a supramolecular host able to encapsulate the organometallic system inside. This allows controlling how molecules are combined in the near surroundings to the catalyst (control over intermolecular interactions). This is a powerful tool to increase the catalyst selectivity, reactivity, and stability, similar to enzymatic catalysis.

This team is currently formed by Hellen Videa (PhD student), Noelia Jiménez Sierra (Master student), Patricia Porras Suárez (Final Year project student), and Dr. Antonio Martínez (IP. Ramón y Caial Researcher), 2020 has been an unprecedented year for many of us because of the worldwide pandemic situation from the SARS-COV-2 virus. However, this team has been working at the top level and never losing their extreme enthusiasm for research.

This team has secured funding from the Spanish Ministry during this year, with two projects. One from the Spanish I+D+i statal research funding 2019 call, and another from the selected "Europe Excellence 2020" call. Also, one research contract and collaboration with the industrial sector in Huelva, specifically with AIQBE (Asociación de IndustriasQuímicas, Básicas y Energéticas de Huelva).



Personal adscrito al Centro en 2020 Directory



Personal Investigador	Puesto	Mail	Teléfono	Laboratorio
Pérez Romero, Pedro J. Rodríguez Belderraín, Tomás Díaz Requejo, M. Mar Caballero Bevia, Ana R. Prieto Cárdenas, Auxiliadora Romero Fructos-Vázquez, M. Muñoz Molina, José María Álvarez Martínez, María Menéndez Rodríguez, Gabriel Pizarro Javier, Juan D. Ramírez Rodríguez, Manuel Borrego Blanco, Elena Martínez Laguna, Jonathan Moreno Rodríguez, Anabel De la Rosa Díaz, Jesús Sánchez-Rodas Navarro, D. Márquez Martínez, Gonzalo Fernández Caliani, Juan Carlos S. de la Campa, Ana Mª González de las Torres, Anabel Milán Martínez, María Pischel, Uwe Fernández Arteaga, Jesús Remón Ruíz, Patricia Mª González Delgado, José A. Guzmán Ríos, David B. Romero Carrasco, Miguel A. Blas, Felipe J. Moreno-Ventas Bravo, Ignacio Míguez Díaz, José M. Gómez Álvarez, Paula Feria Delgado, Esther Bacedoni, María Martínez Martínez, Antonio J. Fuentes Domínguez, Mª Ángeles Videa, Hellen Gutiérrez Fernández, Natalia Molina González, Francisco Avilés Martín, Marisa Ortega Martín, Marisa	Catedrático Univ. Catedrático Univ. Catedrático Univ. Titular Univ. Titular Univ. Titular Univ. Prof. Contrat. Dr. Contr. Posdoctoral Contr. Posdoctoral Doctorando Doctorando Doctorando Doctorando Doctorando Catedrático Univ. Titular Univ. Titular Univ. Titular Univ. Prof. Contrat. Dr. Doctoranda Catedrático Univ. Titular Univ. Prof. Ayudante Dra. Prof. Ayudante Dra. Prof. Ayudante Dr. Contr. Posdoctoral Catedrático Univ. Titular Univ. Prof. Ayudante Dr. Contr. Posdoctoral Catedrático Univ. Titular Univ. Prof. Ayudante Dr. Contr. Posdoctoral Catedrático Univ. Titular Univ. Prof. Ayudante Dr. Contr. Rayudante Dr. Contr. Rayudante Dr. Prof. Ayudante Dr.	perez@ciqso.uhu.es trodri@ciqso.uhu.es mmdiaz@ciqso.uhu.es ana.caballero@ciqso.uhu.es maria.prieto@ciqso.uhu.es maria.prieto@ciqso.uhu.es manuel.romero@ciqso.uhu.es maria.alvarez@ciqso.uhu.es maria.alvarez@ciqso.uhu.es gabriel.menendez@ciqso.uhu.es juandiego.pizarro@ciqso.uhu.es manuel.ramirez@ciqso.uhu.es elena.borrego@ciqso.uhu.es jonathan.martinez@ciqso.uhu.es jonathan.martinez@ciqso.uhu.es anabel.moreno@ciqso.uhu.es gonzalo.marquez@ciqso.uhu.es caliani@ciqso.uhu.es gonzalo.marquez@ciqso.uhu.es ana.sanchez@ciqso.uhu.es anaisabel.delastorres@ciqso.uhu.es maria.millan@ciqso.uhu.es jesus.fernandez@ciqso.uhu.es jesus.fernandez@ciqso.uhu.es jose.gonzalez@ciqso.uhu.es jose.gonzalez@ciqso.uhu.es miguelangel.romero@ciqso.uhu.es felipe@ciqso.uhu.es bravo@ciqso.uhu.es bravo@ciqso.uhu.es jose.miguez@ciqso.uhu.es paula.gomez@ciqso.uhu.es estherferia.2g@gmail.com maria.bacedoni@ciqso.uhu.es antonio.martinez@ciqso.uhu.es hellen.videa@ciqso.uhu.es hellen.videa@ciqso.uhu.es francisco.molina@ciqso.uhu.es aerosol@ciqso.uhu.es manuel.ortega@ciqso.uhu.es	9956 9955 9950 9952 9967 9948 9946 9970 9970 9970 9970 9970 9970 9970 9821 9963 9460 9820 9855 9831 9831 9831 9831 9831 9837 9982 9999 9876 9876 9876 9876 9876 9877 9786 9817 9786 9817 9786 9812 9909 9970 9970 9970 9970 9970 9970 9488	Laboratorio LCH LCH LCH LCH LCH LCH LCH LCH LCH LC

Publicaciones

Publications



Artículos publicados en 2020 en revistas recogidas en el Journal of Citation Reports 2020 publications in JCR journals

LABORATORIO DE CATÁLISIS HOMOGÉNEA HOMOGENEOUS CATALYSIS LABORATORY

AUTORES/AUTHORS: M. Besora, A. Olmos, R. Gava, B. Noverges, G. Asensio, A. Caballero, F. Maseras, P. J. Pérez

TİTULO/TITLE: A quantitative model for alkane nucleophilicity based on C-H bond structural/topological descriptors

REVISTA/JOURNAL: Angew. Chem. Int. Ed. 2020, 59, 3112 - 3116

AUTORES/AUTHORS: A. M. Rodríguez, F. Molina, M. M. Díaz-Reguejo, P. J. Pérez TÍTULO/TITLE: Copper-Catalyzed Selective Pyrrole Functionalization by Carbene Transfer Reaction

REVISTA/JOURNAL: *Adv. Synth. Catal.* **2020**, *362*, 1998 – 2004 (Front Cover)

AUTORES/AUTHORS: M. R. Rodríguez, M. Besora, F. Molina, F. Maseras, M. M. Díaz-Requejo, P. J. Pérez

TİTULO/TITLE: Intermolecular Allene Functionalization by Silver-Nitrene Catalysis **REVISTA/JOURNAL:** *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, 142, 13062 – 13071

AUTORES/AUTHORS: J. D. Pizarro, F. Molina, M. R. Fructos, P. J. Pérez **TİTULO/TITLE:** Gold Complexes with ADAP Ligands: Effect of Bulkiness in Catalytic Carbene Transfer Reactions (ADAP = Alkoxydiaminophosphine) REVISTA/JOURNAL: Organometallics 2020, 39, 2553 – 2559

AUTORES/AUTHORS: M. Álvarez, F. Molina, M. R. Fructos, J. Urbano, E. Álvarez, M. Sodupe, A. Lledós, P. J. Pérez

TÍTULO/TITLE: Aerobic Intramolecular Carbon-Hydrogen Bond Oxidation Promoted by Cu(I) Complexes

REVISTA/JOURNAL: Dalton Trans. **2020**, 49, 14647 – 14655

AUTORES/AUTHORS: J. M. Muñoz-Molina, T. R. Belderraín, P. J. Pérez TÍTULO/TITLE: Recent Advances in Copper-Catalyzed Radical C-H Bond Activation Using N-F Reagents

REVISTA/JOURNAL: Synthesis **2020**, 52, 51 – 64.

AUTORES/AUTHORS: J. M. Muñoz-Molina, T. R. Belderraín, P. J. Pérez **TİTULO/TITLE:** Copper-catalysed radical reactions of alkenes, alkynes and cyclopropanes

with N-F reagents

REVISTA/JOURNAL: Org. Biomol. Chem. 2020, 18, 8757 - 8770.

AUTORES/AUTHORS: J. D. Pizarro, F. Molina, M. R. Fructos, P. J. Pérez **TİTULO/TITLE:** Alkoxydiaminophosphine Ligands as Surrogates of NHCs in Copper Catalysis

REVISTA/JOURNAL: Chem. Eur. J. 2020, 26, 10330 – 10335

AUTORES/AUTHORS: A. M. Rodríguez, M. R. Rodríguez, M. M. Díaz-Requejo, P. J. Pérez TITULO/TITLE: Pyrrole Functionalization by Copper-Catalyzed Nitrene Transfer

REVISTA/JOURNAL: Isr. J. Chem. 2020, 60, 485 - 489

AUTORES/AUTHORS: M. M. Díaz-Requejo, P. J. Pérez

TÍTULO/TITLE: The Tp^xM Core in Csp3-H Bond Functionalization Reactions: Comparing Carbene, Nitrene, and Oxo Insertion Processes (Tpx = Scorpionate Ligand: M=Cu, Ag) REVISTA/JOURNAL: Eur. J. Inorg. Chem. 2020, 879 – 885 (Cover Profile)

AUTORES/AUTHORS: M. R. Rodríguez, M. M. Díaz-Reguejo, P. J. Pérez **TÍTULO/TITLE:** Development of Molecular Complexity through Nitrene-Transfer Reactions Catalyzed by Copper and Silver Scorpionaté Complexes **REVISTA/JOURNAL:** *Synlett* **2020**, DOI: 10.1055/s-0040-1706534

LABORATORIO DE CONTAMINACIÓN ATMOSFÉRICA ATMOSPHERIC POLLUTION LABORATORY

AUTORES/AUTHORS: C. Hao, B. Chen, A. M. Sánchez de la Campa, J. D. de la Rosa TÍTULO/TITLE: Increased Industry Contribution and Atmospheric Heavy Metals from Economic Recovery in Spain

REVISTA/JOURNÁL: *J. Člean. Prod.* **2020**, *246*, 119024

AUTORES/AUTHORS: O. Ramírez, A. M. Sánchez de la Campa, D. Sánchez-Rodas, J. D. de la Rosa

TITULO/TITLE: Hazardous Trace Elements in Thoracic Fraction of Airborne Particulate Matter: Assessment of Temporal Variations, Sources, and Health Risks in a Megacity REVISTA/JOURNAL: Sci. Total Environ. 2020, 710, 136344

AUTORES/AUTHORS: A. I. González de las Torres, I. Giráldez, F. Martínez, P. Palencia, W. T. Corns. D. Sánchez-Rodas

TÍTULO/TITLE: Arsenic Accumulation and Speciation in Strawberry Plants Exposed to Inorganic Arsenic Enriched Irrigation

REVISTA/JOURNAL: FoodChem. 2020, 315, 126215

AUTORES/AUTHORS: R. Torres-Sánchez. D. Sánchez-Rodas. A. M. Sánchez de la Campa, J. D. de la Rosa

TİTÜLO/TITLE: Hydrogen Fluoride Concentrations in Ambient Air of an Urban Area Based on the Emissions of a Major Phosphogypsum Deposit (SW, Europe) REVISTA/JOURNAL: Sci. Total Environ. 2020, 714, 136891



AUTORES/AUTHORS: A. M. Sánchez de la Campa, D. Sánchez-Rodas, G. Márquez, E. Romero, J. D. de la Rosa

TÍTULO/TITLE: 2009-2017 Trends of PM10 in the Legendary Ríotinto Mining District of SW/ Spain

REVISTA/JOURNAL: *Atmos. Res.* **2020**, *238*, 104878

AUTORES/AUTHORS: F. González-Martínez, D. Sánchez-Rodas, N. M. Varela, C. A. Sandoval, L. A. Quiñones, B. Johnson-Restrepo

TÍTULO/TITLE: As3MT and GST Polymorphisms Influencing Arsenic Metabolism in

Human Exposure to Drinking Groundwater

REVISTA/JOURNAL: Int. J. Mol. Sci. **2020**, 21, 4832

AUTORES/AUTHORS: A. Castro, M. F. Pereira, C.Rodríguez, C.Fernández, J. D. de la Rosa

TÍTULO/TITLE: Atypical Peri-Gondwanan Granodiorite-Tonalite Magmatism from Southern Iberia. Origin of Magmas and Implications **REVISTA/JOURNAL:** *Lithos* **2020**, 372 - 373, 105684

AUTORES/AUTHORS: Y. Palacios-Torres, J. D. de la Rosa, J. Olivero-Verbel TÍTULO/TITLE: Trace Elements in Sediments and Fish from Atrato River: an Ecosystem with Legal Rights Impacted by Gold Mining at the Colombian Pacific REVISTA/JOURNAL: Environ. Pollut. 2020, 256, 113290

AUTORES/AUTHORS: N. R. Lieberman, M. Izquierdo, P. Córdoba, N. Moreno, X. Querol, A. M. Sánchez de la Campa, O. Font, H. Cohen, Y. Knop, R. Torres-Sánchez, D. Sánchez-Rodas, C. Muñoz-Quirós, J. D. de la Rosa

TÍTULO/TITLE: The Geochemical Evolution of Brines from Phosphogypsum Deposits in Huelva (SW Spain) and its Environmental Implications

REVISTA/JOURNAL: Sci. Total Environ. 2020, 700, 134444

AUTORES/AUTHORS: K. Caballero-Gallardo, M. Alcala-Orozco, D. Barrasa-Quiroz, J. D. de la Rosa, J. Olivero-Verbel

TİTULO/TITLE: Environmental Risks from Trace Elements in Sediments of Cartagena Bay, an Industrialized Site in the Caribbean

REVISTA/JOURNAL: Chemosphere 2020, 242, 125173

AUTORES/AUTHORS: R. Torres-Sánchez, D. Sánchez-Rodas, A. M. Sánchez de la Campa, J. D. de la Rosa

TÍTULO/TITLE: Long Term Geochemical Variation of Brines Derived from a Major Phosphogypsum Pond of SW Europe

REVISTA/JOURNAL: J. Environ. Manage. 2020, 254, 109832

AUTORES/AUTHORS: A. González de las Torres, M. S. Moats, G. Ríos, A. Rodríguez Almansa, D. Sánchez-Rodas

TÍTULO/TITLE: Arsenic and antimony speciation analysis in copper electrolyte by liquid chromatography coupled to hydride generation atomic fluorescence spectrometry

(HPLC-HG-AFS)

REVISTA/JOURNAL: Anal. Mehods **2020**, 12, 1943 – 1948

LABORATORIO DE SÍNTESIS Y FOTOQUÍMICA ORGÁNICA ORGANIC SYNTHESIS AND PHOTOCHEMISTRY LABORATORY

AUTORES/AUTHORS: P. Remón, D. González, M. A. Romero, N. Basílio, U. Pischel **TÍTULO/TITLE:** Chemical Signal Cascading in a Supramolecular Network **REVISTA/JOURNAL:** Chem. Comm. **2020**, *56*, 3737 – 3740

AUTORES/AUTHORS: J. A. González-Delgado, M. A. Romero, F. Bosca, J. F. Arteaga, U. Pischel

TÍTULO/TITLE: Visible Light-Gated Organocatalysisusing a Ru(II)-Photocage **REVISTA/JOURNAL:** Chem. Eur. J. **2020**, 26, 14229 – 14235 (Hot Topic: Organocatalysis)

AUTORES/AUTHORS: F. M. F. Santos, Z. Domínguez, J. P. L. Fernandes, C. Parente Carvalho, D. Collado, E. Pérez-Inestrosa, M. V. Pinto, A. Fernandes, J. F. Arteaga, U. Pischel, P. M. P. Gois

TİTULO/TITLE: Cyanine-like Boronic Acid Derived Salicylidenehydrazone Complexes (Cy-BASHY) for Bioimaging Applications

RÉVISTA/JOURNAL: Chem. Eur. J. 2020, 26, 14064 – 14069 (Cover Picture)

AUTORES/AUTHORS: C. Benítez-Martin, S. Li, A. Domínguez-Alfaro, F. Nájera, E. Pérez-Inestrosa, U. Pischel, J. Andréasson

TÍTULO/TITLE: Toward Two-Photon Absorbing Dyes with Unusually Potentiated NonlinearFluorescence Response

REVISTA/JOURNAL: J. Am. Chem. Soc. 2020, 142, 14854 - 14858

Highlighted in JACS Spotlight; J. Am. Chem. Soc. 2020, 142, 15203 - 15204

AUTORES/AUTHORS: A. F. Sierra, D. Hernández-Alonso, M. A. Romero, J. A. González-Delgado, U. Pischel, P. Ballester

TİTÜLO/TITLE: Optical Supramolecular Sensing of Creatinine **REVISTA/JOURNAL:** *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 4276 – 4284

AUTORES/AUTHORS: U. Pischel

TÍTULO/TITLE: Photochemistry in Huelva: Light for Triggering, Controlling, and

Monitoring Chemical Processes

REVISTA/JOURNAL: ChemPhotoChem. 2020, 4, 7 - 8

LABORATORIO DE SIMULACIÓN MOLECULAR Y QUÍMICA COMPUTACIONAL MOLECULAR SIMULATION AND COMPUTATIONAL CHEMISTRY LABORATORY

AUTORES/AUTHORS: E. Feria, J. Algaba, J. M. Míguez, A. Mejía, P. Gómez-Álvarez, F. J. Blas



TÍTULO/TITLE: Vapour-Liquid Phase Equilibria and Interfacial Properties of Fatty Acid Methyl Esters from Molecular Dynamics Simulations

REVISTA/JOURNAL: Phys. Chem. Chem. Phys. **2020**, 22, 4974 – 4983

AUTORES/AUTHORS: F. J. Blas. A. Galindo, G. Jackson

TÍTULO/TITLE: Thermodynamics 2019 Conference-Punta Umbría, Costa de la Luz.

Huelva, Spain, 26-28 June 2019

REVISTA/JOURNAL: *Mol.Phys.* **2020**, *118*, e1771043/1-e1771043/9

AUTORES/AUTHORS: M. Bacedoni, I. Moreno-Ventas, G. Ríos TÍTULO/TITLE: Copper Flash Smelting Process Balance Modeling

REVISTA/JOURNAL: Metals 2020, 10, 1229

AUTORES/AUTHORS: J. Algaba, J. M. Míguez, P. Gómez

TÍTULO/TITLE: Preferential Orientations and Anomalous Interfacial Tensions in Aqueous Solutions of Alcohols

REVISTA/JOURNAL: *J. Phys. Chem. B* **2020**, *124*, 8388 – 8401

AUTORES/AUTHORS: E. Cea-Klapp, H. Quinteros-Lama, J. M.Miguez, P.Gómez-Álvarez, F. J. Blas, J. M. Garrido

TÍTULO/TITLE: Molecular Modelling Techniques for Predicting Liquid-Liquid Interfacial Properties of methanol + n-falkanes; (n-hexane, n-heptane, nfoctane) Mixtures **REVISTA/JOURNAL:** Phys. Chem. Chem. Phys. **2020**, 22, 27121 – 27133

AUTORES/AUTHORS: I. Pérez, I. Moreno-Ventas, G. Ríos, T. Bravo

TÍTULO/TITLE: Study of Industrial Copper Matte Converting Using Micrography and Thermochemical Calculations

REVISTA/JOURNAL: *Metall. Mater. Trans. B* **2020**, *51*, 1432 – 1445

AUTORES/AUTHORS: M. Vázquez, I. Moreno-Ventas, I. Raposo, A. Palma, M. J. Díaz **TÍTULO/TITLE:** Kinetic of Pyrite Thermal Degradation under Oxidative Environment **REVISTA/JOURNAL:** *J. Therm. Anal. Calorim.* **2020**, *141*, 1157 – 1163

AUTORES/AUTHORS: I. Pérez. I. Moreno-Ventas. G.Ríos

TITULO/TITLE: Study of the Refractory Used in a Submerged Arc Furnace in the Copper-Making Industry

REVISTA/JOURNAL: Int. J. Appl. Ceram. Technol. 2020, 17, 625-636

AUTORES/AUTHORS: I. M. Vázquez, I. Moreno-Ventas, I. Raposo, A. Palma, M. J. Díaz **TİTULO/TITLE:** Kinetic Evolution of Chalcopyrite Thermal Degradation under Oxidative **Environment**

REVISTA/JOURNAL: Mining Metall. Explor. 2020, 37, 923 - 932

LABORATORIO DE QUÍMICA ORGANOMETÁLICA SUPRAMOLECULAR Y DE LOS **GRUPOS PRINCIPALES** LABORATORY OF SUPRAMOLECULAR ORGANOMETALLIC AND MAIN GROUP **CHEMISTRY**

AUTORES/AUTHORS: S. Azpeitia, A. J. Martínez-Martínez, M. A. Garralda, A. S. Weller, M. A. Huertos

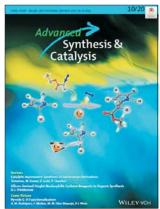
TÍTULO/TITLE: Si-C(sp3) Bond Activation Through Oxidative Addition at a Rh(I) centre **REVISTA/JOURNAL:** Dalton Trans. **2020**. 49, 5416 – 5419

AUTORES/AUTHORS: C. Yeardley, A. Kennedy, P. Gros, S. Touchet, M. Fairley, R. McLellan, A. J. Martinez-Martinez, C. T. O'Hara

TÍTULO/TITLE: Structural and metal-halogen exchange reactivity studies of sodium magnesiatebiphenolate complexes

REVISTA/JOURNAL: Dalton Trans. **2020**, 49, 5257 – 5263







Conferencias impartidas en Congresos y Reuniones Científicas

Lectures at Scientific Meetings







LABORATORIO DE CATÁLISIS HOMOGÉNEA HOMOGENEOUS CATALYSIS LABORATORY

CONFERENCIANTE/SPEAKER: Pedro J. Pérez

TÍTULO/TITLE: Copper, Silver, Carbenes and Nitrenes: A Winning Poker Hand for

Hydrocarbon Functionalization

CÓNGRESO/MEETING: The 3rd Symposium of Metal-Carbene Consortium **LUGAR DE CELEBRACIÓN/LOCATION**: San Antonio (Texas, EEUU)

FECHA/DATE: Febrero 2020

CONFERENCIANTE/SPEAKER: Pedro J. Pérez

TÍTULO/TITLE: Reactivity patterns and prediction models for the functionalization of

alkanes with metal-carbenes

CONGRESO/MEETING: CCHF Virtual Symposia Series

FECHA/DATE: Junio 2020

CONFERENCIANTE/SPEAKER: Pedro J. Pérez

TÍTULO/TITLE: Carbon-nitrogen bond formation through N-F bond activation: A tribute

to Kilian Muñiz

CONGRESO/MEETING: Chemistry Europe Fellows Day

FECHA/DATE: Septiembre 2020

CONFERENCIANTE/SPEAKER: José María Muñoz Molina

TÍTULO/TITLE: Exploring the copper-catalyzed N-F bond activation toward

intramolecular C-H amination to pyrrolidines and piperidines

CONGRESO/MEETING: III International Workshop on Chemistry of Group 11 Elements

LUGAR DE CELEBRACIÓN/LOCATION: Caparica (Portugal)

FECHA/DATE: Enero 2020

COMUNICACIÓN ORAL: Tomas R. Belderrain, Desiy P. Ávila, José María Muñoz Molina,

Pedro J. Pérez

TÍTULO/TITLE: Copper Complexes as catalysts in alkene aminooxygenation reactions CONGRESO/MEETING: III International Workshop on Chemistry of Group 11 Elements

LUGAR DE CELEBRACIÓN/LOCATION: Caparica (Portugal)

FECHA/DATE: Fnero 2020



LABORATORIO DE CONTAMINACIÓN ATMOSFÉRICA ATMOSPHERIC POLLUTION LABORATORY

CONFERENCIANTE/SPEAKER: Daniel Sánchez-Rodas

TÍTULO/TITLE: Exposición de plantas de fresa (Fragaria x ananassa Duch.) a selenio y

arsénico

CONGRESO/MEETING: Club de Biociencias

LUGAR DE CELEBRACIÓN/LOCATION: Universidad del Chocó (Colombia)

FECHA/DATE: Junio 2020

LABORATORIO DE SÍNTESIS Y FOTOQUÍMICA ORGÁNICA ORGANIC SYNTHESIS AND PHOTOCHEMISTRY LABORATORY

CONFERENCIANTE/SPEAKER: U. Pischel

TÍTULO/TITLE: Light-Gated Organocatalysis with a Ru(II)-Photocage **CONGRESO/MEETING:** 27th GDCh Lecture Conference on Photochemistry

LUGAR DE CELEBRACIÓN/LOCATION: Online

FECHA/DATE: Septiembre 2020

Conferencias invitadas en Universidades o Centros de Investigación **Lectures at Institutions**

LABORATORIO DE CATÁLISIS HOMOGÉNEA **HOMOGENEOUS CATALYSIS LABORATORY**

CONFERENCIANTE/SPEAKER: Pedro J. Pérez

TÍTULO/TITLE: Developing molecular complexity through carbon-nitrogen bond

formation reactions

LUGAR DE CELEBRACIÓN/LOCATION: Department of Chemistry Universität Basel

(Online)

ANFITRIÓN/HOST: Prof. Thomas Ward FECHA/DATE: 18 Septiembre 2020

Libros/Books

Capítulo de libros/Chapter books



AUTORES/AUTHORS: N. Basílio, U. Pischel **TÍTULO/TITLE:** Rotaxanes and Polyrotaxanes

LIBRO/BOOK: Smart Materials No. 36, Cucurbituril-based Functional Materials, Ed. D. Tuncel

PÁGINAS/PAGES: 56 - 94

EDITORIAL/EDITORIAL: The Royal Society of Chemistry, Cambridge 2020

AUTORES/AUTHORS: U. Pischel, P. Remón

TÍTULO/TITLE: Recent advances in light-triggered logic devices

LIBRO/BOOK: Specialist Periodical Reports Photochemistry Volume 48, Eds. S. Protti, C.

Raviola

PÁGINAS/PAGES: 323 - 343

EDITORIAL/EDITORIAL: The Royal Society of Chemistry, Cambridge 2021

AUTORES/AUTHORS: J. Andréasson, U. Pischel

TÍTULO/TITLE: Molecular photoswitches for information processing: from simple to complex LIBRO/BOOK: Molecular Photoswitches - Synthesis, Properties and Applications, Ed. Z.

Pianowski

PÁGINAS/PAGES: in press

EDITORIAL/EDITORIAL: Wiley-VCH, Weinheim 2020

AUTORES/AUTHORS: Auxiliadora Prieto

TİTULO/TITLE: Synthesis of Four Membered Aza Heterocycles through Catalytic [2 + 2]

Cycloaddition Reactions Assisted by Metal Complexes

LÍBRO/BOOK: Synthetic Approachés to Nonaromatic Nitrogen Heterocycles

PÁGINAS/PAGES: 37 - 58

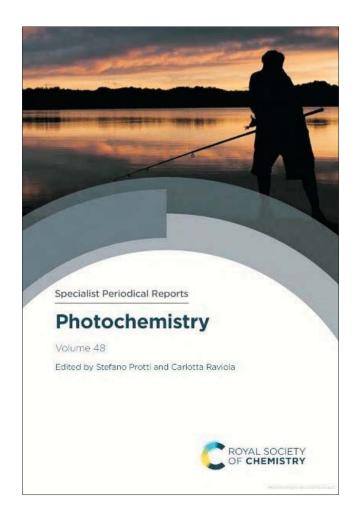
EDITORIAL/EDITORIAL: Wiley-VCH, Weinheim 2020

AUTORES/AUTHORS: H. Videa, A. J. Martínez-Martínez

TİTULO/TITLE: Solid/gas Reactivity of Organometallic Species in Confined Spaces LIBRO/BOOK: Reactivity in Confined Spaces, Eds. Ross S. Forgan and Gareth O. Lloyd

PÁGINAS/PAGES: in press

EDITORIAL/EDITORIAL: The Royal Society of Chemistry, Cambridge 2020



Premios/Awards

Reconocimientos/Recognitions



NOMBRE/NAME: José A. González-Delgado

PREMIO/AWARD: Premio al Mejor Trabajo de un Joven Investigador de la Escuela

Técnica Superior de Ingeniería (ÉTSI) de la Universidad de Huelva

FECHA/DATE: Octubre 2020

NOMBRE/NAME: José A. González-Delgado

PREMIO/AWARD: Premio al Trabajo de Excelencia de un Joven Investigador de la Facultad de Ciencias Experimentales de la Universidad de Huelva

FECHA/DATE: Noviembre 2020

NOMBRE/NAME: Pedro J. Pérez

RECONOCIMIENTOS/RECOGNITIONS: ChemPubSoc Europe Fellow

FECHA/DATE: Abril 2020

NOMBRE/NAME: Uwe Pischel

RECONOCIMIENTOS/RECOGNITIONS: Presidente de la Asociación Europea de

Fotoquímica (EPA)

FECHA/DATE: Octubre 2020

NOMBRE/NAME: Noelia Jiménez Sierra

PREMIO/AWARD: Segundo Premio al Trabajo Fin de Máster en la línea "Economía

Circular y Excelencia Ambiental" de la Cátedra Atlantic Copper **FECHA/DATE**: Diciembre 2020

NOMBRE/NAME: Jorge Pérez Ruiz

PREMIO/AWARD: Primer Premio al Trabajo Fin de Máster en la línea "Eficiencia de

Procesos Productivos" de la Cátedra Atlantic Copper

FECHA/DATE: Diciembre 2020





Tesis.Trabajos Fin de Grado. Trabajos Fin de Máster Thesis. Final Degree Project. Master Thesis

Tesis. Trabajos Fin de Grado. Trabajos Fin de Máster Thesis. Final Degree Project. Master Thesis



TESIS DOCTORALES DOCTORAL THESIS

TÍTULO/TITLE: Diseño y caracterización de compuestos organoboro fluorescentes y sus aplicaciones funcionales

DOCTORANDA/Ph. D. STUDENT: Zoe Domínguez Hidalgo

DIRECTORES/SUPERVISORS: Uwe Pischel y Jesús Fernández Arteaga

UNIVERSIDAD/UNIVERSITY: Huelva

FACULTAD/FACULTY: Ciencias Experimentales

FECHA/DATE: Julio 2020

CALIFICACIÓN/GRADE: Sobresaliente Cum Laude por Unanimidad

TÍTULO/TITLE: Evaluation of the atmospheric impact derived from the evaporation

of phosphogypsum acid leachates

DOCTORANDA/Ph.D. STUDENT: Raquel Torres Sánchez

DIRECTORES/SUPERVISORS: Jesús D. de la Rosa Díaz y Daniel A. Sánchez-Rodas

Navarro

UNIVERSIDAD/UNIVERSITY: Huelva

FACULTAD/FACULTY: Ciencias Experimentales

FECHA/DATE: Marzo 2020

CALIFICACIÓN/GRADE: Sobresaliente Cum Laude

TÍTULO/TITLE: Evaluación del Impacto en Salud de Políticas Públicas: El Plan de

Calidad del Aire de la Zona Industrial de Bahía de Algeciras

DOCTORANDO/Ph.D. STUDENT: Francisco Javier Rodríguez Rasero

DIRECTORES/SUPERVISORS: Ángeles Mencía Jos Gallego y Ana M. Sánchez de la

Campa Verdona

UNIVERSIDAD/UNIVERSITY: Sevilla

FACULTAD/FACULTY: Facultad de Farmacia

FECHA/DATE: Diciembre 2020

CALIFICACIÓN/GRADE: Sobresaliente Cum Laude por Unanimidad





TRABAJOS FIN DE MÁSTER MÁSTER THESIS

TÍTULO/TITLE: Síntesis y caracterización de un ditienileteno fotocrómico

ALUMNO/STUDENT: Jialei Chen Wu

DIRECTORES/SUPERVISORS: Uwe Pischel y José Antonio González Delgado

MÁSTER: Máster Interuniversitario en Química Aplicada

FECHA/DATE: Septiembre 2020 **CALIFICACIÓN/GRADE**: Sobresaliente

TÍTULO/TITLE: Estudio de la capacidad catalítica de los complejos del tipo "(NHC)MCl"

para la transferencia de nitrenos a sustratos saturados e insaturados

ALUMNO/STUDENT: Jorge Pérez Ruíz

DIRECTORES/SUPERVISORS: María del Mar Díaz Requejo **MÁSTER:** Máster Interuniversitario en Química Aplicada

FECHA/DATE: Septiembre 2020 CALIFICACIÓN/GRADE: Sobresaliente

TÍTULO/TITLE: Guía de Caracterización Foto-Física de Compuestos Orgánicos

ALUMNO/STUDENT: Adrián Carbonell Gil

DIRECTORES/SUPERVISORS: Patricia M. Remón Ruíz y Jesús Fernández Arteaga

MÁSTER: Máster Interuniversitario en Química Aplicada

FECHA/DATE: Diciembre 2020 CALIFICACIÓN/GRADE: Notable

TİTULO/TITLE: Estudio por simulación de propiedades interfaciales de cadenas moleculares de 8 monómeros de pozo cuadrado mediante Dinámica Molecular

ALUMNO/STUDENT: María del Carmen Robles Domínguez

DIRECTORES/SUPERVISORS: Felipe Jiménez Blas y Jesús Algaba Fernández

MÁSTER: Máster en Simulación Molecular

FECHA/DATE: Septiembre 2020 CALIFICACIÓN/GRADE: Aprobado

TÍTULO/TITLE: Contribución de fuentes y origen del As en PM10 en zonas industriales

compleias.

ALUMNO/STUDENT: María Millán Martínez

DIRECTORES/SUPERVISORS: Daniel Sánchez-Rodas Navarro

MÁSTER: Máster Interuniversitario en Química Aplicada

GRUPO DE INVESTIGACIÓN/RESEARCH GROUP: Laboratorio de Contaminación

Atmosférica

FECHA/DATE: Diciembre 2020

CALIFICACIÓN/GRADE: Sobresaliente

Tesis. Trabajos Fin de Grado. Trabajos Fin de Máster Thesis. Final Degree Project. Master Thesis



TRABAJOS FIN DE GRADO FINAL DEGREE PROJECT

TÍTULO/TITLE: Síntesis y caracterización de Complejos de Au(I) con Ligandos diaminofosfinas

ALUMNO/STUDENT: Silvino Gata de Oses

DIRECTORES/SUPERVISORS: Manuel Romero Fructos-Vázquez

GRADO: Grado en Química

GRUPO DE INVESTIGACIÓN/RESEARCH GROUP: Laboratorio de Catálisis Homogénea

FECHA/DATE: Julio 2020

CALIFICACIÓN/GRADE: Sobresaliente

TÍTULO/TITLE: Evolución de los Niveles de Arsénico en PM10 de Estaciones de

Muestreo Urbanas e Industriales de Huelva en 2018

ALUMNO/STUDENT: María Sánchez García

DIRECTORES/SUPERVISORS: Ana María Sánchez de la Campa Verdona y Daniel

Alejandro Sánchez-Rodas Navarro

GRADO: Grado en Química

GRUPO DE INVESTIGACIÓN/RESEARCH GROUP: Laboratorio de Contaminación

Atmosférica

FECHA/DATE: Julio 2020

CALIFICACIÓN/GRADE: Sobresaliente

TÍTULO/TITLE: Síntesis de un derivado de 2- acilamina-4,6-difenilpiridina como

antagonista de la secreción de LH administrado por vía general

ALUMNO/STUDENT: Eduardo Portillo Hurtado

DIRECTORES/SUPERVISORS: María Auxiliadora Prieto Cárdenas (Lab. De Catálisis

Homogénea) y Luis Ángel Zarazaga Garcés

GRADO: Grado en Química

GRUPO DE INVESTIGACIÓN/RESEARCH GROUP: Laboratorio de Catálisis Homogénea

FECHA/DATE: Julio 2020

CALIFICACIÓN/GRADE: Notable

TÍTULO/TITLE: Determinación de propiedades interfaciales de cadenas moleculares

de pozo cuadrado

ALUMNO/STUDENT: Cristóbal Romero Guzmán

DIRECTORES/SUPERVISORS: Felipe J. Blas y José Manuel Míguez Díaz

GRADO: Grado en Química

GRUPO DE INVESTIGACIÓN/RESEARCH GROUP: Laboratorio de Simulación Molecular

y Química Computacional **FECHA/DATE**: Julio 2020

CALIFICACIÓN/GRADE: Matrícula de Honor

TİTULO/TITLE: Niveles y composición química del aerosol atmosférico sahariano en

Troposfera Libre (Izaña, Tenerife)

ALÚMNO/STUDENT: Ainhoa Salvador Vides
DIRECTORES/SUPERVISORS: Jesús D. de la Rosa

GRADO: Doble Grado CC Ambientales y Geología

GRUPO DE INVESTIGACIÓN/RESEARCH GROUP: Laboratorio de Contaminación

Atmosférica

FECHA/DATE: Julio 2020

CALIFICACIÓN/GRADE: Sobresaliente

TÍTULO/TITLE: Amidación Catalítica de Alcanos Gaseosos con Nuevos Complejos

de Cobre

ALUMNO/STUDENT: Eduardo Rodríguez Abad

DIRECTORES/SUPERVISORS: Ana Caballero Bevia v Ma Ángeles Fuentes

GRADO: Química

GRUPO DE INVESTIGACIÓN/RESEARCH GROUP: Laboratorio de Catálisis Homogénea

FECHA/DATE: Septiembre 2020 **CALIFICACIÓN/GRADE**: Sobresaliente

TİTULO/TITLE: Síntesis y Caracterización de Complejos Organometálicos de Magnesio

Conteniendo Ligandos β-Dicetiminato Macrocíclicos

ALUMNO/STUDENT: Noelia Jiménez Sierra

DIRECTORES/SUPERVISORS: Antonio Martinez Martinez

GRADO: Química

GRUPO DE INVESTIGACIÓN/RESEARCH GROUP: Laboratorio de Organometálica

Supramolecular

FECHA/DATE: Septiembre 2020 CALIFICACIÓN/GRADE: Sobresaliente

TÍTULO/TITLE: Síntesis de Heterociclos Catalizada por Complejos de Metales de

Transición

ALUMNO/STUDENT: Luisa María González Espina

DIRECTORES/SUPERVISORS: Tomás Rodríquez Belderraín y José María Muñoz

Molina

GRADO: Química

GRUPO DE INVESTIGACIÓN/RESEARCH GROUP: Laboratorio de Catálisis Homogénea

FECHA/DATE: Septiembre 2020 CALIFICACIÓN/GRADE: Notable

TÍTULO/TITLE: Reacciones de Aminooxigenación Catalizadas por Complejos de

Cobre

ALUMNO/STUDENT: Andrea Torreño de los Santos

DIRECTORES/SUPERVISORS: Tomás Rodríguez Belderraín y José María Muñoz

Molina

GRADO: Química

GRUPO DE INVESTIGACIÓN/RESEARCH GROUP: Laboratorio de Catálisis Homogénea

FECHA/DAȚE: Diciembre 2020

CALIFICACIÓN/GRADE: Sobresaliente

Proyectos / Contratos

Projects / Contracts



TÍTULO DEL CONTRATO/PROYECTO: Nuevas Metodologías Catalíticas para el Aprovechamiento de Metano y otros Alcanos como Materias Primas (MeCAM). EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIONADORA: Junta de Andalucía

ENTIDAD PARCIPANTE: Universidad de Huelva

DURACIÓN: 2020-2021

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Pedro J. Pérez Romero

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 134.750 €

TÍTULO DEL CONTRATO/PROYECTO: Desarrollo de sistemas catalíticos para la

transformación directa de hidrocarburos en productos de valor añadido

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIONADORA: FEDER-UHU

ENTIDAD PARCIPANTE: Universidad de Huelva

DURACIÓN: 2020-2021

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Pedro J. Pérez Romero

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 40.000 €

TÍTULO DEL CONTRATO/PROYECTO: Catálisis Supramolecular de Metales en Tándem

para Transformaciones de Energía con Emisiones Cero de Carbono

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia. Innovación v

Universidades

ENTIDAD PARTICIPANTE: Universidad de Huelva

DURACIÓN: 3 años

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Antonio Martínez Martínez

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 114.000€

TÍTULO DEL PROYECTO: Catálisis Supramolecular Activada por Luz para

Transformaciones de CO2

ADMINISTRACIÓN FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades

ENTIDAD PARTICIPANTE: Universidad de Huelva

DURACIÓN: 2 años

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Antonio Martínez Martínez

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 60.000 €

TÍTULO DEL CONTRATO: Chemical CO2 Fixation: A Green Route to Transform CO2 into

a Renewable C1 Source using Confined Catalysis

ENTIDAD FINANCIADORA: Asociación de Industrias Químicas, Básicas y Energéticas de

Huelva (AIQBE)

ENTIDAD PARTICIPANTE: AIQBE/Universidad de Huelva

DURACIÓN: 1 año

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Antonio Martínez Martínez

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 15.000 €

TÍTULO DEL CONTRATO/PROYECTO: Diseño de nuevos adhesivos basados en recursos naturales con control foto-químico de las propiedades funcionales y del proceso de curado

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIADORA: FEDER-Junta de Andalucía, Consejería

de Transformación Económica. Industria. Conocimiento y Universidades

ENTIDAD PARTICIPANTE: Universidad de Huelva **DURACIÓN:** desde: 01/01/2020 hasta: 31/12/2021

INVESTIGADOR RESPONSABLE: José M. Franco y Uwe Pischel

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 38.775.50 €

TÍTULO DEL CONTRATO/PROYECTO: Sistemas Catalíticos para la Formación de Enlaces

Carbono-Nitrógeno y Carbono-Carbono

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIONADORA: FEDER-UHU

ENTIDAD PARTICIPANTE: Universidad de Huelva

DURACIÓN: 2020-2021

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Tomás Rodríguez Belderraín

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 40.000 €

TÍTULO DEL CONTRATO/PROYECTO: Estudio de materiales para la absorción de dióxido

de azufre

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIONADORA: Atlantic Copper

ENTIDAD PARCIPANTE: Universidad de Huelva

DURACIÓN: 2020-2021

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Pedro J. Pérez Romero PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 61.407.43 € + IVA (21%)

TÍTULO DEL CONTRATO/PROYECTO: Fotoquímica supramolecular de ensamblajes con cucurbiturilos: Química sensible a estímulos con implicaciones en liberación

inteligente, química adaptativa y procesamiento de información

EMPRESA/ADMINISTRACIÓNFINANCIADORA: Junta de Andalucía, Consejería de

Transformación Económica, Industria, Conocimiento y Universidades

ENTIDAD PARTICIPANTE: Universidad de Huelva **DURACIÓN**: desde 01/01/2020 hasta 31/12/2022 **INVESTIGADOR RESPONSABLE:** Uwe Pischel

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 94.800 €

TÍTULO DEL CONTRATO/PROYECTO: Nuevas Rutas hacia la Organocatálisis

Fotocontrolada

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIADORA: Universidad de Huelva, Proyectos de

Investigación de Fomento del Conocimiento Básico 2019 **ENTIDAD PARTICIPANTE:** Universidad de Huelva

DURACIÓN: desde 09/07/2020 hasta 09/07/2021 INVESTIGADOR RESPONSABLE: Jesús Fernández Arteaga

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 7.500 €

TÍTULO DEL CONTRATO/PROYECTO: Captura y almacenamiento de CO2 usando

clatratos: análisis basado en métodos de simulación molecular avanzada

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIADORA: Universidad de Huelva, Proyectos de Investigación de Fomento del Conocimiento Básico 2019



ENTIDAD PARTICIPANTE: Universidad de Huelva **DURACIÓN:** desde 09/07/2020 hasta 09/07/2021

INVESTIGADOR RESPONSABLE: José Manuel Míguez Díaz

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 7.500 €

TÍTULO DEL CONTRATO/PROYECTO: Red de Simulación Molecular

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia. Innovación v

Universidades

ENTIDAD PARTICIPANTE: Universidad de Huelva **DURACIÓN**: desde 01/01/2020 hasta 31/12/2021 **INVESTIGADOR RESPONSABLE:** Felipe Jiménez Blas

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 15.000 €

TÍTULO DEL CONTRATO/PROYECTO: Estudio de los parámetros termodinámicos y cinéticos en la transición sólido-líquido de clatratos hidratos de metano y dióxido de carbono

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIADORA: Universidad de Huelva, Programa

Operativo FEDER Andalucía 2014-2020

ENTIDAD PARTICIPANTE: Universidad de Huelva **DURACIÓN**: desde 01/01/2020 hasta 31/12/2021 **INVESTIGADOR RESPONSABLE**: Felipe Jiménez Blas

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 39.797.87 €

TÍTULO DEL CONTRATO/PROYECTO: Soporte experimental de la tesis sobre el estudio de la composición de los ánodos en el equilibrio químico del electrolito usado en el refino de cobre de Atlantic Copper.

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIADORA: Atlantic Copper S.L.U.

ENTIDAD PARTICIPANTE: Universidad de Huelva

DURACIÓN: agosto 2020 - julio 2022

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Daniel Sánchez-Rodas

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 54.200 €

TÍTULO DEL CONTRATO/PROYECTO: Asistencia técnica para el suministro e instalación de filtros y el seguimiento (análisis, ensayos, informes, etc.) de emisiones atmosféricas en las dos estaciones de control ubicadas en las inmediaciones de los terrenos portuarios de La Cabezuela (Puerta Real), Exp. CA-005-20.

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIADORA: Autoridad Portuaria de la Bahía de Cádiz.

ENTIDAD PARTICIPANTE: Universidad de Huelva

DURACIÓN: junio 2020 - septiembre 2021

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Ana María Sánchez de la Campa Verdona

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 48.970 €

TÍTULO DEL CONTRATO/PROYECTO: Servicio para el análisis químico para el contenido

de metales en filtros de PM10 en el aire ambiente.

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIADORA: Consejería de agricultura, ganadería,

pesca y desarrollo sostenible. Junta de Andalucía. **ENTIDAD PARTICIPANTE:** Universidad de Huelva

DURACIÓN: octubre 2020 - febrero 2021

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Gonzalo Márquez y Daniel Sánchez-Rodas

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 34.000 €

TÍTULO DEL CONTRATO/PROYECTO: Contribución de fuentes de aerosoles atmosférico

en el rango 10 ?m a 30 nm

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIADORA: Vicerrectorado de Investigación y Política Científica Universidad de Huelva Estrategia de Política Científica 2019 Acción Proyectos

Propios autofinanciados

ENTIDAD PARTICIPANTE: Universidad de Huelva

DURACIÓN: Mayo 2020 a Mayo 2022

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Jesús D. de la Rosa

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 70.000 €

TÍTULO DEL CONTRATO/PROYECTO: Caracterizacio?n Fi?sico-Qui?mica v Contribucio?n de Fuentes de Aerosoles Atmosfe?ricos Inorga?nicos y Orga?nicos en la Cuenca Minera del río Tinto (Huelva)

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIADORA: Incentivos a los Agentes del Sistema

Andaluz del Conocimiento. Ayudas a la I+D+I (PAIDI 2020)

ENTIDAD PARTICIPANTE: Universidad de Huelva

DURACIÓN: Febrero 2020 a Febrero 2022

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Jesús D. de la Rosa

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 109.020 €

Programa de Seminarios y Conferencias

Research Seminars



CONFERENCIANTE/SPEAKER: Prof. Dr. Enrique de Miguel Agustino INSTITUCIÓN/INSTITUTION: Sistemas Estelares Cataclísmicos y Ciencia Ciudadana en la UHU

TÍTULO/TITLE: Departamento de Ciencias Integradas, Área de Física, UHU

FECHA/DATE: 20/02/2020







