

### Tesis Doctorales defendidas. Programa de Doctorado en Química

<p><b>Título de la tesis:</b> Eliminación de herbicidas en fase acuosa mediante procesos avanzados en oxidación fotoquímicos usando radiación ultravioleta y solar</p> <p><b>Doctorando:</b> Francisco Orellana García</p> <p><b>Fecha de defensa:</b> 23 de Junio de 2017</p> <p><b>Calificación:</b> Sobresaliente cum laude</p> <p><b>Mención internacional:</b> No</p>	
<p><b>Aportaciones relevantes de la tesis de Francisco Orellana García</b></p>	
<p>Autores: Orellana-García, F.; Álvarez, M.A.; López-Ramón, M.V.; Rivera-Utrilla, J.; Sánchez-Polo, M.; Mota, A.J.</p> <p>Título: Photodegradation of Herbicides with Different Chemical Natures in Aqueous Solution by Ultraviolet Radiation. Effects of Operational Variables and Solution Chemistry</p> <p>Referencia revista/libro: Chemical Engineering Journal 2014, 255, 307-315</p> <p>Factor impacto: 4.321 Cuartil (JCR): Q1</p>	
<p>Autores: Orellana-García, F.; Álvarez-Merino, M.A.; López-Ramón, M.V.; Rivera-Utrilla, J.; Sánchez-Polo, M.</p> <p>Título: Effect of HO<math>\cdot</math>, SO<math>_4^{\cdot-}</math> and CO<math>_3^{\cdot-}</math>/HCO<math>_3^{\cdot-}</math> radicals on the photodegradation of the herbicide amitrole by UV radiation in aqueous solution</p> <p>Referencia revista/libro: Chemical Engineering Journal 2015, 267, 182–190</p> <p>Factor impacto: 5.31 Cuartil (JCR): Q1</p>	
<p>Autores: Orellana-García, F.; Álvarez, M.A.; López-Ramón, M.V.; Rivera-Utrilla, J.; Sánchez-Polo, M.; Fontecha-Cámara, M. A.</p> <p>Título: Photoactivity of organic xerogels and aerogels in the photodegradation of herbicides from waters</p> <p>Referencia revista/libro: Applied Catalysis B: Environmental 2016, 181, 94–102</p> <p>Factor impacto: 9.446 Cuartil (JCR): Q1</p>	
<p>Autores: Álvarez, M.A.; Orellana-García, F.; López-Ramón, M.V.; Rivera-Utrilla, J.; Sánchez-Polo, M.</p> <p>Título: Influence of operational parameters on photocatalytic amitrole degradation using nickel organic xerogel under UV irradiation</p> <p>Referencia revista/libro: Arabian Journal of Chemistry 2018, 11, 564-572</p> <p>Factor impacto: 4.553 Cuartil (JCR): Q1 (JCR 2016)</p>	
<p>Autores: López-Ramón, M.V.; Rivera-Utrilla, J.; Sánchez-Polo, M.; Mota, A.J.; Orellana-García, F.; Álvarez, M.A.</p> <p>Título: Photocatalytic oxidation of diuron using nickel organic xerogel under simulated solar irradiation</p> <p>Referencia revista/libro: Enviado a publicar a Science of the Total Environment 2018</p> <p>Factor impacto: 4.9 Cuartil (JCR): Q1 (JCR 2016)</p>	
<p>Otras aportaciones: Nº comunicaciones a congresos nacionales: 8</p>	
<p><b>Título de la tesis:</b> Quiralidad molecular y supramolecular de sistemas de interés biológico y atmosférico estudiadas mediante técnicas espectroscópicas vibracionales sensibles (VCD) y no sensibles (IR y</p>	

<p>Raman) a la quiralidad combinadas con cálculos químicos  <b>Doctoranda:</b> María del Mar Quesada Moreno  <b>Fecha de defensa:</b> 16 de Febrero de 2017  <b>Calificación:</b> Sobresaliente cum laude  <b>Mención Internacional:</b> Si</p>	
<b>Aportaciones relevantes de la tesis de María del Mar Quesada Moreno</b>	
	<p>Autores: Avilés Moreno, J.R.; Quesada Moreno, M.M.; Partal Ureña, F.; López González, J.J.  Título: Conformational preference of short aromatic amino acids from the FT-IR, FT-Raman and Far-IR spectroscopies, and quantum chemical calculations: L-phenylalanine and L-tyrosine  Referencia revista/libro: Tetrahedron: Asymmetry 2012, 23, 1084-1092  Factor impacto: 2.115 Cuartil (JCR): Q2</p>
	<p>Autores: Avilés Moreno, J.R.; Quesada Moreno, M.M.; López González, J.J.; Claramunt, R.M.; López, C.; Alkorta, I.; Elguero, J.  Título: Self-Assembly Structures of 1H-Indazoles in the Solution and Solid Phases: A Vibrational (IR, FIR, Raman, and VCD) Spectroscopy and Computational Study  Referencia revista/libro: ChemPhysChem 2013, 14, 3355-3360  Factor impacto: 3.36 Cuartil (JCR): Q1</p>
	<p>Autores: Avilés-Moreno, J.R.; Quesada-Moreno, M.M.; López-González, J.J.; Martínez-Haya, B.  Título: Chiral Recognition of Amino Acid Enantiomers by a Crown Ether: Chiroptical IR-VCD Response and Computational Study  Referencia revista/libro: The Journal of Physical Chemistry B 2013, 117, 9362–9370  Factor impacto: 3.377 Cuartil (JCR): Q2</p>
	<p>Autores: Quesada-Moreno, M.M.; Azofra, L.M.; Avilés-Moreno, J.R.; Alkorta, I.; Elguero, J.; López-González, J.J.  Título: Conformational Preference and Chiroptical Response of Carbohydrates D-Ribose and 2-Deoxy-D-ribose in Aqueous and Solid Phases  Referencia revista/libro: The Journal of Physical Chemistry B 2013, 117, 14599–14614  Factor impacto: 3.377 Cuartil (JCR): Q2</p>
	<p>Autores: Quesada-Moreno, M.M.; Márquez-García, A.A.; Avilés-Moreno, J.R.; López-González, J.J.  Título: Conformational landscape of L-threonine in neutral, acid and basic solutions from vibrational circular dichroism spectroscopy and quantum chemical calculations  Referencia revista/libro: Tetrahedron: Asymmetry 2013, 24, 1537-1547  Factor impacto: 2.165 Cuartil (JCR): Q2</p>
	<p>Autores: Quesada Moreno, M.M.; Avilés Moreno, J.R.; Márquez-García, A.A.; Partal Ureña, F.; López González, J.J.  Título: L-Serine in aqueous solutions at different pH: Conformational preferences and vibrational spectra of cationic, anionic and zwitterionic species  Referencia revista/libro: Journal of Molecular Structure 2013, 1046, 136–146  Factor impacto: 1.599 Cuartil (JCR): Q3</p>
	<p>Autores: Virgili, A.; Quesada-Moreno, M.M.; Avilés-Moreno, J.R.; López-González, J.J.; García, M.A.; Claramunt, R.M.; Torres, M.R.; Jimeno, M.L.; Reviriego, F.; Alkorta, I.; Elguero, J.  Título: A Spectroscopic Study of Colchicine in the Solid State and in Solution by Multinuclear Magnetic Resonance and Vibrational Circular Dichroism  Referencia revista/libro: Helvetica Chimica Acta 2014, 97, 471-490  Factor impacto: 1.138 Cuartil (JCR): Q3</p>
	<p>Autores: Quesada-Moreno, M.M.; Avilés-Moreno, J.R.; Márquez-García, A.A.; López-González, J.J.  Título: Deducing the molecular properties of zwitterionic, protonated, deprotonated, and double-deprotonated forms of L-cysteine from vibrational spectroscopy (IR, Raman, VCD) and quantum chemical calculations  Referencia revista/libro: Journal of Molecular Modeling 2014, 20, 2229(1-15)  Factor impacto: 1.736 Cuartil (JCR): Q2</p>
	<p>Autores: Azofra, L.M.; Quesada-Moreno, M.M.; Alkorta, I.; Avilés-Moreno, J.R.; López-González, J.J.; Elguero, J.</p>

<p>Título: Carbohydrates in the gas phase: conformational preference of D-ribose and 2-deoxy-D-ribose  Referencia revista/libro: New Journal of Chemistry 2014, 38, 529-538  Factor impacto: 3.086 Cuartil (JCR): Q2</p>
<p>Autores: Quesada-Moreno, M.M.; Avilés-Moreno, J.R.; López-González, J.J.; Claramunt, R.M.; López, C.; Alkorta, I.; Elguero, J.  Título: Chiral self-assembly of enantiomerically pure (4S,7R)-campho[2,3-c]pyrazole in the solid state: a vibrational circular dichroism (VCD) and computational study  Referencia revista/libro: Tetrahedron: Asymmetry 2014, 25, 507-515  Factor impacto: 2.155 Cuartil (JCR): Q2</p>
<p>Autores: Azofra, L.M.; Quesada-Moreno, M.M.; Alkorta, I.; Avilés-Moreno, J.R.; Elguero, J.; López-González, J.J.  Título: Understanding the Aldo-Enediolate Tautomerism of Glycolaldehyde in Basic Aqueous Solutions  Referencia revista/libro: ChemPhysChem 2015, 16, 2226 – 2236  Factor impacto: 3.138 Cuartil (JCR): Q1</p>
<p>Autores: Quesada-Moreno, M.M.; Avilés-Moreno, J.R.; López-González, J.J.  Título: Structural behavior of neutral, protonated and deprotonated <i>L</i>-valine in aqueous solutions: a combined study using chirality sensitive (VCD) and non sensitive (IR and Raman) vibrational spectroscopies and quantum chemical calculations  Referencia revista/libro: Tetrahedron: Asymmetry 2015, 26, 1314-1327  Factor impacto: 2.108 Cuartil (JCR): Q2</p>
<p>Autores: Quesada-Moreno, M.M.; Avilés-Moreno, J.R.; López-González, J.J.; Jacob, K.; Vendier, L.; Etienne, M.; Alkorta, I.; Elguero, J.; Claramunt, R.M.  Título: Supramolecular organization of perfluorinated 1H-indazoles in the solid state using X-ray crystallography, SSNMR and sensitive (VCD) and non sensitive (MIR, FIR and Raman) to chirality vibrational spectroscopies  Referencia revista/libro: Physical Chemistry Chemical Physics 2017, 19, 1632-1643  Factor impacto: 4.123 Cuartil (JCR): Q2 (JCR 2016)</p>
<p>Autores: Loru, D.; Quesada-Moreno, M.M.; Avilés-Moreno, J.R.; Jarman, N.; Huet, T.R.; López-González, J.J.; San. M.E.  Título: Conformational Flexibility of Limonene Oxide Studied By Microwave Spectroscopy  Referencia revista/libro: ChemPhysChem 2017, 18, 274-280 (article)  Factor impacto: 3.075 Cuartil (JCR): Q1 (JCR 2016)</p>
<p>Autores: Loru, D.; Quesada-Moreno, M.M.; Avilés-Moreno, J.R.; Jarman, N.; Huet, T.R.; López-González, J.J.; San. M.E.  Título: Conformational Flexibility of Limonene Oxide Studied By Microwave Spectroscopy  Referencia revista/libro: ChemPhysChem 2017, 18, 268 (Front Profile)  Factor impacto: 3.075 Cuartil (JCR): Q1 (JCR 2016)</p>
<p>Autores: Quesada-Moreno, M.M.; Cruz-Cabeza, A.J.; Avilés-Moreno, J.R.; Cabildo, P.; Claramunt, R.M.; Alkorta, I.; Elguero, J.; Zuñiga, F.J.; López-González, J.J.  Título: The Curious Case of 2-Propyl—1H-benzimidazole in the Solid State: An Experimental and Theoretical Study  Referencia revista/libro: Journal of Physical Chemistry A 2017, 121, 5665–5674  Factor impacto: 2.847 Cuartil (JCR): Q2 (JCR 2016)</p>
<p>Autores: Krin, A.; Pérez, C.; Pinacho, P.; Quesada-Moreno, M.M.; López-González, J.J.; Avilés-Moreno, J.R.; Blanco, S.; López, J.C.; Schnell, M.  Título: Structure Determination, Conformational Flexibility, Internal Dynamics, and Chiral Analysis of Pulegone and Its Complex with Water  Referencia revista/libro: Chemistry: A European Journal 2018, 24, 721-729  Factor impacto: 5.317 Cuartil (JCR): Q1 (JCR 2016)</p>

<p>Autores: Quesada-Moreno, M.M.; Virgili, A.; Monteagudo, E.; Claramunt, R.M.; Avilés-Moreno, J.R.; López-González, J.J.; Alkorta, I.; Elguero, J.</p> <p>Título: A vibrational circular dichroism (VCD) methodology for the measurement of enantiomeric excess in chiral compounds in the solid phase and for the complementary use of NMR and VCD techniques in solution: The camphor case</p> <p>Referencia revista/libro: Analyst 2018, 143, 1406-1416</p> <p>Factor impacto: 3.885 Cuartil (JCR): Q1 (JCR 2016)</p>
<p>Otras aportaciones:</p> <p>Nº comunicaciones a congresos nacionales: 6</p> <p>Nº comunicaciones congresos internacionales: 14</p>
<p><b>Título de la tesis:</b> Estudio del potencial sintético de orto-alilanilinas y 5-alil-4,6-dicloropirimidinas dirigidas al desarrollo de nuevas baterías de derivados de sistemas policíclicos nitrogenados de interés biológico</p> <p><b>Doctoranda:</b> Lina María Acosta Quintero</p> <p><b>Fecha de defensa:</b> 25 de Julio de 2016 en la Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.</p> <p><b>Calificación:</b> APROBADA con recomendación para MERITORIA (Según sistema calificación UIS, Colombia)</p> <p><b>Mención Internacional:</b> No (COTUTELA ACADÉMICA INTERNACIONAL)</p>
<p><b>Aportaciones más relevantes de la tesis de Lina María Acosta Quintero</b></p>
<p>Autores: Acosta Quintero, L.M.; Jurado J.; Noguerras, M.; Palma, A.; Cobo, J.</p> <p>Título: Synthesis of Pyrimidine-Fused Benzazepines from 5-Allyl-4,6-dichloropyrimidines</p> <p>Referencia revista/libro: European Journal of Organic Chemistry 2015, 24, 5360-5369</p> <p>Factor impacto: 3.068 Cuartil (JCR): Q2</p>
<p>Autores: Acosta Quintero, L.M.; Burgos, I.; Palma, A.; Cobo, J.; Glidewell, C.</p> <p>Título: Similar molecular constitutions but different conformations and different supramolecular assemblies in two related fused tetracyclic benzo[b]pyrimido[5,4-f]azepine derivatives</p> <p>Referencia revista/libro: Acta Crystallographica Section C: Structural Chemistry 2016, 72, 52-56</p> <p>Factor impacto: 4.099 Cuartil (JCR): Q1</p>
<p>Autores: Acosta Quintero, L.M., Palma, A., Cobo, J., Glidewell, C..</p> <p>Título: Six polycyclic pyrimidoazepine derivatives: Syntheses, molecular structures and supramolecular assembly</p> <p>Referencia revista/libro: Acta Crystallographica Section C: Structural Chemistry, 2016, 72, 346-357</p> <p>Factor impacto: 4.099 Cuartil (JCR): Q1</p>
<p>Autores: Acosta Quintero, L.M.; Palma, A.; Cobo, J.; Glidewell, C.</p> <p>Título: Diastereoisomeric forms of 11-ethyl-6,11-dihydro-5H-dibenzo[b,e]azepine-6-carboxamide: syntheses and the molecular and supramolecular structure of the minor form (6RS,11RS)-11-ethyl-6,11-dihydro-5H-dibenzo[b,e]azepine-6-carboxamide</p> <p>Referencia revista/libro: Acta Crystallographica Section C: Structural Chemistry 2016, C72, 549-554</p> <p>Factor impacto: 4.099 Cuartil (JCR): Q1</p>
<p>Autores: Mateus-Ruíz, J.B.; Acosta-Quintero, L.; Palma, A.; Macías, M.; Cobo, J.; Glidewell, C.</p> <p>Título: Three tetracyclic dibenzoazepine derivatives exhibiting different molecular conformations, different patterns of intermolecular hydrogen bonding and different modes of supramolecular aggregation</p> <p>Referencia revista/libro: Acta Crystallographica Section C: Structural Chemistry 2017, C73, 28-35</p> <p>Factor impacto: 4.099 Cuartil (JCR): Q1 (JCR 2016)</p>
<p>Autores: Vettorazzi, M.; Angelina, E.; Lima, S.; Gonec, T.; Otevrel, J.; Marvanova, P.; Padrtova, T.; Mokry, P.; Bobal, P.; Acosta, L.M.; Palma, A.; Cobo Domingo, J.; Bobalova, J.; Csollei, J.; Malik, I.; Alvarez, S.; Spiegel, S.; Jampilek, J.; Enriz, R.D.</p> <p>Título: An integrative study to identify novel scaffolds for sphingosine kinase 1 inhibitors</p> <p>Referencia revista/libro: European Journal of Medicinal Chemistry 2017, 139, 461-481</p>

Factor impacto: 4.519      Cuartil (JCR): Q1 (JCR 2016)
Autores: Acosta Quintero, L.M.; Burgos, I.; Palma, A.; Cobo, J.; Glidewell, C. Título: A concise, efficient and versatile synthesis of amino-substituted benzo[b]pyrimido[5,4-f]azepines: Synthesis and spectroscopic characterization, together with the molecular and supramolecular structures of three products and one intermediate Referencia revista/libro: Acta Crystallographica Section C: Structural Chemistry 2018, C74, 312-320 Factor impacto: 4.099      Cuartil (JCR): Q1 (JCR 2016)
Autores: Acosta Quintero, L.M.; Palma, A.; Cobo, J.; Glidewell, C. Título: A versatile synthesis of cyclic dipeptides using the stepwise construction of the piperazine-2,5-dione ring from simple precursors: Synthetic sequence and the structure of a representative product, (3RS)-4-(2-allyl-3,5-dimethylphenyl)-1-benzyl-3-phenylpiperazine-2,5-dione: Synthetic Referencia revista/libro: Acta Crystallographica Section C: Structural Chemistry 2018, 74, 159-165 Factor impacto: 4.099      Cuartil (JCR): Q1 (JCR 2016)
Otras aportaciones: Nº comunicaciones a congresos internacionales: 3
<b>Título de la tesis:</b> Uso de 3-formilquinolinas como convenientes bloques de construcción para la generación de diversidad estructural <b>Doctorando:</b> Daniel F. Insuasty Delgado <b>Fecha de defensa:</b> 22/09/2017 en Universidad del Valle, Colombia <b>Calificación:</b> APROBADA (Según sistema calificación UIS, Colombia) <b>Mención Internacional:</b> No (COTUTELA ACADÉMICA INTERNACIONAL)
<b>Aportaciones más relevantes de la tesis de Daniel F. Insuasty Delgado</b>
Autores: Insuasty, D.; Abonía, R.; Cobo, J.; Glidewell, C. Título: Two closely related, and unexpected, quinolinone derivatives: A three-dimensional hydrogen-bonded framework structure and a hydrogen-bonded molecular ribbon of R <sup>2</sup> <sub>2</sub> (18) and R <sup>4</sup> <sub>4</sub> (24) rings Referencia revista/libro: Acta Crystallographica Section C: Crystal Structure Communications 2012, C68, 220-225 Factor impacto: 0.492      Cuartil (JCR): Q4
Autores: Abonía, R.; Insuasty, D.; Castillo, J.; Quiroga, J.; Nogueras, M.; Cobo, J. Título: Synthesis of novel quinoline-2-one based chalcones of potential anti-tumor activity Referencia revista/libro: European Journal of Medicinal Chemistry 2012, 57, 29-40 Factor impacto: 3.499      Cuartil (JCR): Q1
Autores: Insuasty, D.; Robledo, S.M.; Vélez, I.D.; Cuervo, P.; Insuasty, B.; Quiroga, J.; Nogueras, M.; Cobo, J.; Abonía, R. Título: A Schmidt rearrangement-mediated synthesis of novel tetrahydro-benzo[1,4] diazepin-5-ones as potential anticancer and antiprotozoal agents Referencia revista/libro: European Journal of Medicinal Chemistry 2017, 141, 567-583 Factor impacto: 4.519      Cuartil (JCR): Q1 (JCR 2016)
Autores: Insuasty, D.; Abonía, R.; Insuasty, B.; Quiroga, J.; Laali, K.K.; Nogueras, M.; Cobo, J. Título: Microwave-assisted synthesis of diversely substituted quinoline-based dihydropyridopyrimidine and dihydropyrazolopyridine hybrids Referencia revista/libro: ACS Combinatorial Science 2017, 19, 555-563 Factor impacto: 3.168      Cuartil (JCR): Q1 (JCR 2016)
Otras aportaciones: Nº comunicaciones a congresos nacionales: 1 Nº comunicaciones a congresos internacionales: 2