

Parte A. DATOS PERSONALES

Fecha del CVA 09/09/2019

Nombre y apellidos	Regla Ayala Espinar		
DNI/NIE/pasaporte	27321388X	Edad	43
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	7005057392	
	Código Orcid	0000-0003-4058-0727	

A.1. Situación profesional actual

Organismo	Universidad de Sevilla		
Dpto./Centro	Dpto. Química Inorgánica / Facultad de Química		
Dirección	Sevilla, Andalucía, España		
Teléfono	954554366	Correo electrónico	rae@us.es
Categoría profesional	Profesor Titular	Fecha inicio	11/12/2018
Espec. cód. UNESCO	230326, 330801, 220304		
Palabras clave	Química Computacional, MOF		

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

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Doctor. Química	Universidad de Sevilla	2003
Titulado superior. Licenciado en Ciencias Químicas	Universidad de Sevilla	1997

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

Indicador	Medida
Publicaciones	22.0
Promedio citas/año durante los últimos 5 años	174
Promedio citas por artículo total	20.19
Publicaciones en primer cuartil	14
Sexenios de investigación	2.0
Índice H	13.0
Número de citas	424
Fecha del último sexenio	31/12/2010

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

Mi CV se encuadra dentro del estudio teórico-experimental de medios condensados. Como aportación personal a este campo cabe destacar la importancia de utilizar la información derivada de la química computacional y experimental de manera sinérgica. Durante mi PhD comencé una línea de investigación que se ocupaba del estudio de las propiedades estructurales y termodinámicas de aniones en disolución. El hecho de que mi tesis doctoral fuera 20% experimental y 80% teórica me ha permitido valorar la importancia de relacionar distintas ramas de la química en la búsqueda de resultados multidisciplinarios. La realización de estancias en la Universidad Autónoma de México y en la Université Henry Poincaré de Nancy durante este período predoctoral, me permitió trabajar con científicos de gran calidad, contribuyendo al desarrollo de mi carrera científica y ampliando las diversas alternativas existentes a la hora de abordar un determinado problema.

La etapa posdoctoral, financiada por una beca Posdoctoral del Ministerio de Educación y Ciencia y un contrato Marie Curie, se desarrolló en el grupo de Prof. Michiel Sprik de la Universidad de Cambridge. Esta etapa estuvo marcada por dos objetivos: por un lado, la familiarización con el uso de simulaciones de dinámica molecular cuántica (disciplina que complementa mi investigación anterior y en la que el grupo del Prof. Sprik es un referente), por otro lado, la participación en un proyecto novedoso que por primera vez permite la determinación de potenciales redox a partir de las energías verticales de ionización de iones o complejos metálicos en disolución mediante la combinación de la Teoría de Marcus y las simulaciones de dinámica molecular cuántica.

Tras mi estancia posdoctoral me incorporé en el año 2007 al Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla como investigador en prácticas I3P con la idea de utilizar los conocimientos adquiridos en el tratamiento de cationes radiactivos en disolución y en medios confinados. En el año 2008 obtuve una plaza de Prof. Ayudante Doctor en el departamento de Química Inorgánica de la Universidad de Sevilla promocionando a Prof. Contratado Doctor en el año 2010. Desde mi incorporación al departamento de Química Inorgánica, he orientado mi formación teórica al estudio de problemas inorgánicos, como por ejemplo, el estudio de la hidratación del ion Po(IV) en disolución acuosa y su similitud con los iones Bi(III) y Te(IV) o el estudio topológico de compuestos de zinc modelos que sirvan de guía para una futura preparación experimental. Asimismo se ha abordado el uso de líquidos iónicos como plantillas en la síntesis de diversas zeolitas.

En la actualidad combino los estudios computacionales con la síntesis y caracterización de MOFs (metal-organic framework) con el objeto de incorporarlos a materiales basados en carbones mesoporosos y obtener materiales con propiedades catalíticas mejoradas respecto de los constituyentes considerados de forma individual.

La labor investigadora previamente mencionada se ha complementado con mi labor docente en los departamentos de Química Física y Química Inorgánica de la Universidad de Sevilla y la Facultad de Química de la Universidad de Cambridge. La idea en todo momento ha sido transferir, en la medida de lo posible, la experiencia investigadora al sistema universitario y viceversa. Desde el punto de vista docente he impartido asignaturas de primer, segundo y tercer ciclo en las Facultades de Química, Física y Farmacia.

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (ordenados por tipología)

C.1. Publicaciones

Publicación en Revista R. Ayala; J. M. Martínez ; R. R. Pappalardo; A. Muñoz Páez; E. Sánchez Marcos. Po(IV) Hydration: a Quantum Chemical Study. *J. Phys Chem B*. 112 - 17, pp. 5416 - 5422. 2008.

Publicación en Revista R. Ayala; M. Sprik. A Classical Point Charge Model Study of System Size Dependence of Oxidation and Reorganization Free Energies in Aqueous Solution. *J Phys. Chem B*. 112 - 2, pp. 257 - 269. 2008.

Publicación en Revista R. Ayala; J. M. Martínez ; R. R. Pappalardo; A. Muñoz Páez; E. Sánchez Marcos. General Quantum-Mechanical Study on the Hydrolysis Equilibria for a Tetravalent Aquaion: the Extreme Case of the Po(IV) in water. *J Phys Chem B*. 113 - 2, pp. 487 - 496. 2009

Publicación en Revista R. Ayala; R. Spezia; J. M. Martínez ; R. Vuilleumier; R. R. Pappalardo; E. Sánchez Marcos. An ab initio Molecular Dynamics Study on the Hydrolysis of the Po(IV) Aquaion in Water. *J Phys Chem B*. 114, pp. 12866 - 12874. 2010.

Publicación en Revista R. Ayala; J. M. Martínez ; R. R. Pappalardo; E. Sánchez Marcos. quantum-mechanical study On the Aquaions and Hydrolyzed Species of Po(IV), Te(IV), and Bi(III) in water. *J. Phys Chem B*. , 2012, 116(51):14903-14

Publicación en Revista R. Ayala; S. Ivanova; J.M. Martinez Blanes, F. Romero Sarria; J. A. Odriozola;
Understanding the Role of the Cosolvent in the Zeolite Template Function of Imidazolium based Ionic Liquid. *J. Phys. Chem. B*. 2014. vol. 118. pag. 3650-3660

Publicación en Revista J. A. López López; R. Ayala: Assessment of the Performance of Commonly used DFT Functionals vs. MP2 in the Study of IL-water, IL-Ethanol and iL-(H₂O)₃ clusters. *J. Molec. Liq*. 2016. vol. 220. pag. 970-982.

Publicación en Revista R. Ayala, E. Carmona, A. Galindo. The diZinc Bond as a Ligand; a Computational Study of Elongated Bonds. *Inorg. Quim. Acta*, 2018, 470, 197–205.

Publicación en Revista R. Ayala; J. M. Martínez; R. R. Pappalardo; K Refson; E Sánchez Marcos. Effect of Basicity on the Hydrolysis of the Bi(III) Aqua Ion in Solution: an ab initio Molecular Dynamics Study. *J. Phys. Chem. A*, 2018, 122 (7), pp 1905–1915.

C.2. Proyectos

Título del Proyecto: APROVECHAMIENTO DE BIOMASA Y PRODUCCION SOSTENIBLE DE ENERGIA MEDIANTE (FOTO)CATALIZADORES Y REACTORES ESTRUCTURADOS BASADOS EN MATERIALES CARBONOSOS.

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad. Referencia: ENE2017-82451-C3-3-R

Duración: 3 Años (Enero 2018-Diciembre 2020)

Investigador responsable: Miguel Ángel Centeno

Título del Proyecto: Descripción Molecular de Disoluciones Conteniendo Iones Metálicos: de la Hidratación a la Complejación en Cationes Radioactivos y Fármacos Antitumorales.

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad. Referencia: CTQ2011-25932

Duración: 5 Años (Enero 2012-Diciembre 2017(extensión de 1 año))

Investigador responsable: Enrique Sánchez Marcos.

C.3. Contratos, méritos tecnológicos o de transferencia

C.4. Patentes

C.5. Trabajos Fin de Estudios Dirigidos

Trabajo Fin de Máster, Máster en Ciencia y Tecnología de Nuevos Materiales de la Universidad de Sevilla. Síntesis de MOFs para su uso en Aplicaciones medioambientales. Junio 2019.

Trabajo Fin de Máster, Máster en Ciencia y Tecnología de Nuevos Materiales de la Universidad de Sevilla. SÍNTESIS Y FUNCIONALIZACIÓN DE MOFS: SU ROL EN CATÁLISIS HETEROGÉNEA. Septiembre 2018.

Trabajo Fin de Grado, Grado en Física e Ingeniería de Materiales de la Universidad de Sevilla. Metal Organic Frameworks: An interplay between experimental and theoretical information. Junio 2019.

Trabajo Fin de Grado, Grado en Física e Ingeniería de Materiales de la Universidad de Sevilla. Síntesis y Caracterización de materiales híbridos basados en MOFs. Junio 2019.

Trabajo Fin de Grado, Grado en Química de la Universidad de Sevilla. SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE MOFS: INFLUENCIA DEL MÉTODO Y MEDIO. Septiembre 2018.

Trabajo Fin de Grado, Grado en Química de la Universidad de Sevilla. SÍNTESIS Y TRANSFORMACIÓN DE MATERIALES METAL-ORGÁNICOS (MOFs). Julio 2017.

Trabajo Fin de Grado, Grado en Química de la Universidad de Sevilla. ESTUDIO COMPARATIVO DE MATERIALES METAL-ORGÁNICOS (MOFs) PARA APLICACIONES TECNOLÓGICAS. Julio 2017.

Trabajo Fin de Máster, Máster en Ciencia y Tecnología de Nuevos Materiales de la Universidad de Sevilla. SÍNTESIS DE MOFs PARA SU USO EN CATÁLISIS HETEROGÉNEA. Diciembre 2016.

Trabajo Fin de Grado, Grado en Farmacia de la Universidad de Sevilla. EL GRAFENO: USO Y APLICACIONES EN FARMACOTERAPIA Y/O TÉCNICAS DE DIAGNÓSTICO. Septiembre 2016.

Trabajo Fin de Máster, Máster en Ciencia y Tecnología de Nuevos Materiales de la Universidad de Sevilla. ESTUDIO DE LA FUNCIÓN PLANTILLA DE LÍQUIDOS IÓNICOS EN LA SÍNTESIS DE ZEOLITAS. Diciembre 2016.

Trabajo Fin de Grado, Grado en Farmacia de la Universidad de Sevilla. ESTUDIO COMPARATIVO DEL PAPEL DE NANOPARTÍCULAS METÁLICAS Y ÓXIDOS METÁLICOS ACTUANDO COMO SOPORTES EN LA LIBERACIÓN CONTROLADA DE FÁRMACOS. Septiembre 2015.

Trabajo Fin de Grado, Grado en Química de la Universidad de Sevilla. SÍNTESIS DE ESTRUCTURAS METAL-ORGÁNICAS (MOFs) Y SU APLICACIÓN COMO ADSORBENTES DE GASES. Julio 2015.

C.6. Docencia en Títulos Oficiales de la Universidad de Sevilla (2007-2019)

200 créditos de docencia en las titulaciones Licenciatura en Química (Experimentación en Química Inorgánica), Grado en Farmacia (Química General y Analítica, Química Inorgánica, Laboratorio de Química), Grado en Óptica y Optometría (Materiales Ópticos), Licenciatura en Ingeniería de Materiales (Fundamentos de Química, Materiales Moleculares y Poliméricos), Grado en Ingeniería de Materiales (Química I, Química II, Estructura de Materiales), Máster en Ciencia y Tecnología de Nuevos Materiales (Computación en Ciencia de Materiales, Modelización Aplicada a la Caracterización Estructural de Medios Condensados) de la Universidad de Sevilla.

Coordinadora del Máster de Ciencia y Tecnología de Nuevos Materiales