



**Parte A. DATOS PERSONALES**

**Fecha del CVA** 20/07/2022

Nombre y apellidos	Concepción López García		
DNI/NIE/pasaporte		Edad	
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	K-7966-2014	
	Código Orcid	0000-0002-2343-902X	

**A.1. Situación profesional actual**

Organismo	Universidad Nacional de Educación a Distancia		
Dpto./Centro	Química Orgánica y Bio-Orgánica / Facultad de Ciencias		
Dirección	Carretera de Las Rozas al Escorial Km 5/ 28232 Las Rozas-Madrid		
Teléfono	91-3987327	Correo electrónico	clopez@ccia.uned.es
Categoría profesional	Catedrática de Universidad	Fecha inicio	04/01/2011
Espec. cód. UNESCO	2306, 230610, 230618, 23109, 239001, 2307		
Palabras clave	Síntesis orgánica heterocíclica, reconocimiento molecular: aplicaciones a sistemas bioorgánicos y al desarrollo de inhibidores NOS, estrés oxidativo, neuroprotección, neuroinflamación. RMN en disolución y en estado sólido, interacciones no covalentes y enlace de hidrógeno.		

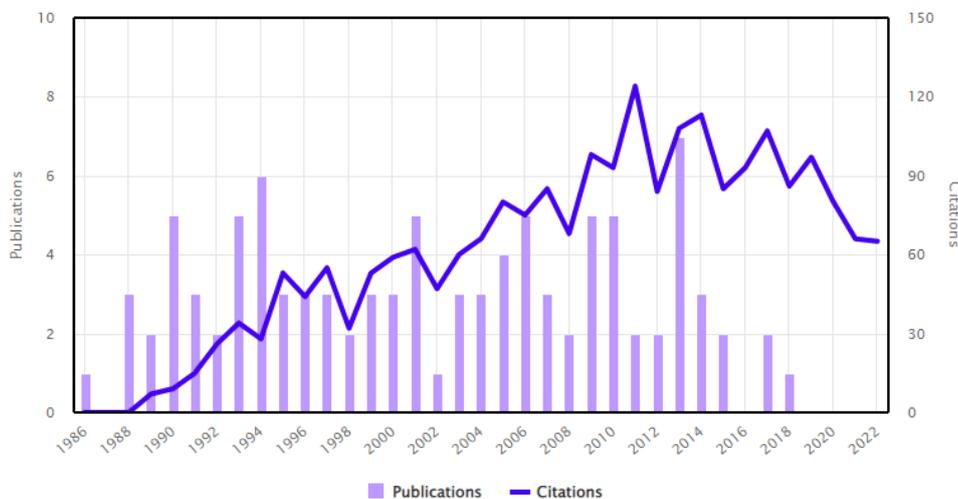
**A.2. Formación académica (título, institución, fecha)**

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciada en Ciencias Químicas	Universidad Autónoma de Madrid	1983
Grado de Licenciada	Universidad Autónoma de Madrid	1983
Doctora en Ciencias (Sección Químicas)	Universidad Nacional de Educación a Distancia	1990

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

- Sexenios de investigación: 5 sexenios evaluados positivamente.
  - Número de artículos: 99
  - Artículos con citas: 99
  - Índice-h: 27
- ResearchID

Times Cited and Publications Over Time





## Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

Disfruté de una beca FPI de la CAM para la realización de la Tesis Doctoral: *Síntesis y estudio de las propiedades fisicoquímicas y reactividad de poliazolilmetanos, poliazolilboratos y sus complejos metálicos con Rodio (I) e Iridio (I)* (dirigida por la Dra. Rosa M. Claramunt en los laboratorios del Instituto de Química Médica del CSIC) que fue presentada en la UNED, en junio de 1990, y calificada con Sobresaliente *Cum laude* y Premio Extraordinario de Doctorado. Trabajé durante 5 meses en la empresa Pharmamar en la instalación del equipo de RMN y me incorporé a la UNED a tiempo completo primero como Profesora Ayudante L.R.U, Profesora Titular y desde diciembre de 2010 hasta la actualidad como Catedrática de Química Orgánica. En mayo de 1992, recibí una ayuda de la Comunidad de Madrid para realizar una estancia en Freie Universität de Berlín en el grupo del Profesor H.-H. Limbach, de reconocido prestigio en el campo de la espectroscopia de  $^{15}\text{N}$  RMN. Durante estos años he compaginado la labor docente, investigadora y de gestión (Vicedecana de Calidad y C. Químicas 2010-2014) solo interrumpida por dos bajas por maternidad.

Las principales líneas de investigación son: estructura y dinámica de las moléculas orgánicas mediante RMN multinuclear ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^{31}\text{P}$ ,  $^{19}\text{F}$ ,  $^{11}\text{B}$ ) en disolución y en estado sólido. Estudio de interacciones no covalentes, esencialmente el enlace de hidrógeno, responsables de la estructura y estabilidad de los agregados supramoleculares formados por moléculas orgánicas de pequeño o moderado tamaño en procesos de autoensamblado en estado sólido. Hace ya unos años el grupo de la UNED, Sistemas Supramoleculares BioOrgánicos, decidió avanzar en una dirección que se enmarca en las áreas de la química bioorgánica y de la química médica basadas ambas en la química supramolecular; y sin perder la identidad estructural, heterocíclica y orgánica-física que habíamos desarrollado durante 20 años, abordamos la búsqueda de nuevos heterociclos como inhibidores selectivos de la sintasa del óxido nítrico, introduciendo átomos de flúor en estos compuestos con el fin de incrementar y extender sus propiedades biológicas. Durante los tres últimos años estamos dirigiendo el interés y objetivo en el desarrollo de quimiotipos con propiedades antioxidantes robustas y con elevado perfil neuroprotector.

La combinación del conocimiento obtenido por RMN multinuclear en estado sólido con la información extraída en disolución, unida a nuestra experiencia en química heterocíclica, supramolecular y mecanoquímica, nos permite abordar el estudio de problemas estáticos (polimorfismo, desmotropía, cocristales, solvatos) y dinámicos (transferencia protónica, tautomería, isomería conformacional, atropoisomería), todos ellos son aspectos de gran relevancia para las industrias farmacéutica y de nuevos materiales.

He participado en una veintena de proyectos de investigación subvencionados -en dos de ellos como investigadora responsable-, en contratos de I+D con Empresas y colaboro con diferentes grupos de Investigación tanto de centros nacionales como internacionales. He dirigido o co-dirigido, varios trabajos de investigación, trabajos Fin de Máster y dos tesis doctorales. Soy autora de varios capítulos de libros y monografías docentes, varios de ellos premiados por el Consejo Social de la UNED, así como de 99 publicaciones en revistas internacionales del JCR y más de 50 actas de congresos, nacionales e internacionales.

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

### C.1. Publicaciones

- Rosa M. Claramunt, Concepción López, Dionisia Sanz; José Elguero, Ibon Alkorta. Determination of the tautomerism of albendazole desmotropes using solution and solid state NMR together with DFT theoretical calculations, both energies and chemical shifts. *J. Mol. Struct.*, **2022**, 1261,132883, <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2022.132883>.
- Ana Ortíz de Zárate, Marta Pérez-Torralba, Iñigo Bonet Isidro, Concepción López, Rosa M Claramunt, Diana Martínez-Casanova, Isabel Sánchez-Vera, Jesús Jiménez-González, José Luis Lavandera: 1,5-Benzodiazepin-2(3H)-ones: In Vitro Evaluation as Antiparkinsonian Agents, *Antioxidants*, **2021**, 10, 1584. doi: 10.3390/antiox10101584.



- Marta Marín-Luna, Rosa M. Claramunt, Concepción López, Marta Pérez-Torralba, Dionisia Sanz, Felipe Reviriego, Ibon Alkorta, José Elguero. A GIPAW versus GIAO-ZORA-SO study of  $^{13}\text{C}$  and  $^{15}\text{N}$  CPMAS NMR chemical shifts of aromatic and heterocyclic bromo derivatives. *Solid State Nucl. Magn. Reson.* **108**, **2020**, 101676, <https://doi.org/10.1016/j.ssnmr.2020.101676>.
- Vera L.M. Silva, Artur M.S. Silva, Rosa M. Claramunt, Concepción López, Dionisia Sanz, Lourdes Infantes, Ángela Martínez López, Felipe Reviriego, Ibon Alkorta, José Elguero. A structural study of new tetrakis(1*H*-pyrazol-1-yl)methanes. *Tetrahedron*. **2019**, *75*, 130690. <https://doi.org/10.1016/j.tet.2019.130690>
- Carlos Romero Muñiz, Denís Paredes-Roibás, Concepción López, Antonio Hernanz, José María Gavira-Vallejo. Assignment of the Raman spectrum of benzylic amide [2]catenane: Raman microscopy experiments and first-principles calculations, *J. Phys. Chem. C*, **2018**, *122*, 18102-18109. IP: 4.484; DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b04904.
- Diana García-Pérez, Concepción López, Rosa M. Claramunt, Ibon Alkorta, José Elguero.  $^{19}\text{F}$ -NMR Diastereotopic Signals in Two *N*-CHF<sub>2</sub> Derivatives of (4*S*,7*R*)-7,8,8-Trimethyl 4,5,6,7-tetrahydro-4,7-methano-2*H*-indazole, *Molecules*, **2017**, *22*(11), 1-12. IP: 2.861 ISSN 1420-3049 DOI: 10.3390/molecules22112003
- Ibon Alkorta, Rosa M. Claramunt, Enrique Díez-Barra, José Elguero, Antonio de la Hoz, Concepción López, **2017**, The organic chemistry of poly(1*H*-pyrazol-1-yl)methane. *Coordination Chemistry Reviews*, *339*, 153-182. IP: 12.994 ISSN: 0010-8545 DOI: 10.1016/j.ccr.2017.03.011
- Mariana Sardo, Sérgio M. Santos, Artem Babaryk, Concepción López, Ibon Alkorta, José Elguero, Rosa M. Claramunt, Luís Mafra, **2015**, Diazole-based powdered cocrystal featuring a helical hydrogen-bonded network: Structure determination from PXRD, solid-state NMR and computer modeling. *Solid State Nuclear Magnetic Resonance* *65*, 49-63. IP: 2.864 ISSN: 0926-2040 <http://dx.doi.org/10.1016/j.ssnmr.2014.12.005>
- R. M. Claramunt, M. Pérez-Torralba, M. García, C. López, M. Torralba, I. Alkorta, J. Elguero **2014**. Intermolecular Hydrogen and Halogen Bonds in Fluorinated Benzimidazoles. *Acta Crystallography A*, *70*, C643. IP: 2.069 ISSN: 0108-7673
- Rosa M. Claramunt, Concepción López, Dionisia Sanz and José Elguero **2014**. Mechano Heterocyclic Chemistry: Grinding and Ball Mills *Advanced Heterocyclic Chemistry* *112*, 117-143. IP: 2.800 ISSN: 0065-2725 <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-800171-4.00003-2>
- M. M. Quesada Moreno, J. R. Avilés Moreno, J. J. López González, R. M. Claramunt, C. López, I. Alkorta, J. Elguero, **2014**. Chiral self-assembly of enantiomerically pure (4*S*,7*R*) campho[2,3-*c*]pyrazole in the solid state: a vibrational circular dichroism (VCD) and computational study. *Tetrahedron: Asymmetry*, *25*, 507-515. IP: 2.165 ISSN: 0957-4166 <http://dx.doi.org/10.1016/j.tetasy.2014.02.01>
- Marta Pérez-Torralba, M. Ángeles García, Concepción López, M. Carmen Torralba, M. Rosario Torres, Rosa M. Claramunt, and José Elguero, **2014**. Structural Investigation of Weak Intermolecular Interactions (Hydrogen and Halogen Bonds) in Fluorine-Substituted Benzimidazoles. *Crystal Growth & Design*, *14*: 3499-3509. IP: 4.558 ISSN: 1528-7483 [dx.doi.org/10.1021/cg500442k](http://dx.doi.org/10.1021/cg500442k)
- Rosa María Tejedor, Santiago Uriel, Sara Graus, Teresa Sierra, José Luis Serrano, Rosa M. Claramunt, Concepción López, Marta Pérez-Torralba, Ibon Alkorta, José Elguero, **2013**. A Facile Method to Determine the Absolute Structure of Achiral Molecules: Supramolecular-Tilt Structures. *Chemistry- A European Journal*, *19*: 6044-6051. IP: 5.696 ISSN: 0947-6539 DOI: 10.1002/chem.201204197



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

Participación como investigadora en:

➤ MINECO- CTQ2014-568833-R

Identificación de nuevos quimiotipos con propiedades antioxidantes: síntesis y aplicaciones en diferentes patologías

Ministerio de Economía y Competitividad

Inicio: 01/01/2015 Finalización: 31/12/2017

98.010,00 Euros

Investigadora principal 1: R. M. Claramunt Vallespí

Investigadora principal 2: Dionisia Sanz del Castillo

Entidades participantes: Dpto. de Química Orgánica y Bio-Orgánica (UNED) /Ciencias Médicas Básicas (CEU San Pablo)

➤ MCINN-CTQ2010-16122

El enlace de hidrógeno y su influencia en la estructura de los cristales y los complejos anfitrión-huésped

Ministerio de Ciencia e Innovación

Inicio: 01/01/2011 Finalización: 31/12/2014

142.780 Euros

Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

➤ MEC-CTQ2007-62113/BQU

Reconocimiento molecular. Aplicaciones a sistemas bioorgánicos y al desarrollo de inhibidores NOS

Ministerio de Educación y Ciencia

Inicio: 01/10/2007 Finalización: 30/09/2010

193.600 Euros

Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

## C.3. Participación en contratos, méritos tecnológicos o de transferencia

➤ BRUKER ESPAÑOLA S. A. : Contrato de colaboración científica y tecnológica en RMN  
Inicio: 01/12/2015

Se inició en 2003 y desde entonces se ha ido renovando cada 2 años realizando trabajos de asesoramiento, análisis de muestras, resolución de problemas estructurales, desarrollo y puesta a punto de experimentos. Conferencias. Demostraciones.

➤ GLAXOSMITHKLINE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO, S. L.: Acuerdo de transferencia de material químico

Inicio: 17/10/2012

## C.4. Dirección de trabajos, participación en tareas de formación

Codirectora de la Tesis Doctoral “Nuevos indazoles como inhibidores selectivos de la sintasa del óxido nítrico (NOS)”. Carlos Pérez Medina, UNED, Facultad de Ciencias, 2008.

Dirección de Trabajos Fin de Grado y Trabajos Fin de Máster de estudiantes de la UNED.

## C.4. Revisor de revistas

Arkivoc, European Journal of Inorganic Chemistry, Magnetic Resonance in Chemistry, Molecules, Bioorganic&Medicinal Chemistry.

## C.5. Otros

Miembro de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ) y del Grupo de Resonancia Magnética Nuclear (GERM). Adscrita al Instituto Mixto de Investigación-Escuela Nacional de Sanidad (IMIENS-UNED). Miembro del Claustro, del Consejo de Gobierno, vocal del Consejo Social y de la Junta de la Facultad de Ciencias de la UNED.