

Química computacional y catálisis homogénea: crónica de una relación muy provechosa

Dr. Ignacio Funes Ardoiz

Juan de la Cierva. Grupo de Fotoquímica Orgánica. Universidad de La Rioja

Jueves, 30 de marzo 2023

12h

Sala de grados, Edif. Físicas (Facultad Ciencias)

CICLO CONFERENCIAS ISQCH 2023

iSQCH

Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea

Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza - CSIC
C/ Pedro Cerbuna, 12. Zaragoza 50009. Spain



CSIC
CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS



**Universidad
Zaragoza**



**Facultad de Ciencias
Universidad Zaragoza**

Química computacional y catálisis homogénea: crónica de una relación muy provechosa

Dr. Ignacio Funes Ardoiz

Juan de la Cierva. Grupo de Fotoquímica Orgánica. Universidad de La Rioja

<https://www.ifunesardoiz.com/>

Resumen:

La química es la ciencia que se encarga del estudio de la materia. Tradicionalmente, se ha relacionado muy estrechamente con el trabajo de laboratorio, desde la síntesis al análisis de nuevos compuestos y materiales. Con el auge de la mecánica cuántica y los ordenadores a lo largo del siglo XX, una nueva vertiente derivada de la química teórica ha ganado mucho peso a la hora de comprender los procesos a escala molecular: la química computacional.

En este seminario, se tratará de hacer un recorrido, desde un punto de vista computacional, sobre los últimos avances de nuestro grupo de investigación en el área de la catálisis homogénea, destacando el estudio de reacciones fotorrédox, la química del boro, reacciones de acoplamiento cruzado y el uso de ciencia de datos, aprendizaje automático y programas informáticos, para desarrollar modelos útiles en química organometálica.

CV simplificado:

Ignacio Funes-Ardoiz es investigador Juan de la Cierva-Incorporación en el Grupo de Fotoquímica Orgánica de la Universidad de La Rioja. Obtuvo su doctorado en 2017 bajo la dirección del profesor Feliu Maseras en el Instituto Catalán de Investigación Química, donde además realizó un año extra como investigador postdoctoral. Tras este periodo, realizó un postdoctorado gracias a la prestigiosa beca Humboldt en la universidad RWTH Aachen, bajo la dirección de la profesora Franziska Schoenebeck. Finalmente, regresó a la Universidad de La Rioja, donde ha comenzado su carrera independiente.

Sus líneas de investigación se centran en el estudio computacional de reacciones catalíticas en fase homogénea, especialmente aquellas mediadas por luz. Además, participa en proyectos de descubrimiento de energías sostenibles y de fotoprotección, así como en numerosas colaboraciones internacionales con grupos experimentales de primer nivel. Ha publicado más de 50 artículos científicos, incluyendo prestigiosas revistas como Science (2), JACS (3), ACIE (11) o Nat. Commun. (1), siendo autor principal en 10 de ellos, así como 2 patentes. Actualmente, disfruta de un proyecto nacional de transición ecológica y codirige a cuatro estudiantes de doctorado junto al Prof. Diego Sampredo. Además, su labor investigadora ha sido reconocida por numerosos premios, destacando el premio RSEQ al mejor investigador postdoctoral, el premio Sus-Chem Investiga, el Thieme Chemistry Journal award y varios premios en divulgación científica.