



Parte A. DATOS PERSONALES

Fecha del CVA

Nombre y apellidos	Rosa Llusar Barelles		
DNI/NIE/pasaporte	-----	Edad	-----
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	J-8241-2014	
	Código Orcid	0000-0002-3539-7269	

A.1. Situación profesional actual

Organismo	Universidad Jaume I de Castelló		
Dpto./Centro	-----		
Dirección	-----		
Teléfono	-----	Correo electrónico	-----
Categoría profesional	Catedrática Universidad	Fecha inicio	01/09/2009
Espec. cód. UNESCO	230700-Química Física, 230307-Compuestos de coordinación, 230326-Estructura de los compuestos inorgánicos		
Palabras clave	Materiales moleculares, estructura química, reactividad y catálisis		

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

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciatura con Grado en Ciencias Químicas (Tesina)	Universidad de Valencia	1983
Doctorado	Texas A&M University (USA)	1988

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

Tengo reconocidos seis sexenios de actividad investigadora. Soy autora de más de ciento setenta artículos en revistas científicas internacionales indexadas y mi índice h es de treinta y ocho. Hasta la fecha, he dirigido once tesis doctorales, siete de ellas con mención de doctorado europeo o internacional y una octava realizada en cotutela y defendida en la Universidad Central de Venezuela.

Lidero desde su creación en 1998, el grupo de investigación de materiales moleculares de la Universitat Jaume I del que es el único miembro con vinculación contractual permanente. El grupo de materiales moleculares mantiene, de forma habitual, colaboraciones con investigadores de otros centros tanto españoles como extranjeros tal como queda reflejado en su productividad científica.

Mi contribución en el ámbito de "Cluster Catalysis" publicada en Angewandte Chemie en 2012 fue señalada por el Editor como "Hot Paper" y en 2017 el editor de Green Chemistry eligió mi artículo sobre "Cluster Catalysis" como "Editor Choice".

Como muestra del reconocimiento a mi actividad investigadora he impartido, bajo invitación, alrededor de treinta conferencias en los últimos diez años tanto en universidades, centros de investigación como en congresos a nivel nacional e internacional.

Participo regularmente como ponente en congresos internacionales, universidades e instituciones de investigación de todo el mundo.

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM (máximo 3500 caracteres, incluyendo espacios en blanco)

Catedrática de Química Física en la Universidad Jaume I de Castelló. Estudié Química en la Universidad de Valencia donde me licencié en 1983 con la máxima calificación. Obtuve mi doctorado en la Universidad de Valencia en 1987 y en la Universidad de Texas A&M (EE. UU.) en 1988 bajo la dirección del Prof. F. Albert Cotton.

Tras trabajar durante tres años en el Departamento de Investigación de una Planta de Producción de Caprolactama en Castelló, pasé un año (1991-1992) con el Prof. John D. Corbett en el Laboratorio Ames (EE.UU.). Desde 1992 ocupo un puesto en la Universidad

Jaume I y me convertí en Catedrática en 2009. He sido nombrada profesora invitada en el CNRS-Universidad de Angers (Francia) en 2005, Universidad de Rennes (Francia) en 2012 y Universidade Estadual Paulista en 2015 (Brasil).

Mi investigación se centra en la química de clústeres con especial énfasis en las propiedades fisicoquímicas dirigidas al desarrollo de nuevos materiales con aplicaciones potenciales en catálisis, fotocatálisis y electrónica molecular. En estos trabajos se combinan la parte experimental con la teórica. En particular, la metodología sintética utilizada emplea tanto estrategias en disolución como de estado sólido, junto con las últimas técnicas de caracterización, monitorización de reacciones y cálculos mecánicos cuánticos. Este enfoque ha demostrado ser muy útil para correlacionar las estructuras electrónicas y moleculares de nuevos materiales o para desvelar aspectos desconocidos sobre los mecanismos de reacción de los clústeres.

Desde su creación en 1988, dirijo el grupo de investigación de materiales moleculares de la Universidad Jaume I. A lo largo de estos años, hemos extendido la química acuosa de los óxidos de clúster de metales de transición del grupo seis a sus análogos de calcogenuro. También hemos empleado estas unidades de clúster para construir materiales híbridos. Mi grupo ha desarrollado métodos estereoselectivos para la preparación de especies clúster ópticamente puras con actividad en catálisis asimétrica. También ha funcionalizado calcogenuros de grupos trinucleares con ligandos electroactivos. En este campo, el grupo de trabajo ha presentado el primer conductor molecular monocomponente basado en clústeres. Por otro lado, la coordinación de ligandos de poliaminopolicarboxilato ha llevado a la preparación de complejos solubles en agua estables. La actividad de estos últimos compuestos como agentes de contraste ha sido evaluada en colaboración con BAYER.

Durante los últimos veinte años, en colaboración con el Prof. Basallote de la Universidad de Cádiz, he desarrollado una metodología que permite una formulación exhaustiva de los mecanismos de reacción de los compuestos de coordinación. En el caso de las reacciones de transferencia de protones, mi trabajo ha contribuido en comprender el efecto del solvente y el contraión sobre el mecanismo. Mi experiencia en química cuántica y métodos topológicos ha contribuido a una mejor comprensión del enlace químico en los sistemas inorgánicos. Hemos demostrado que la función de localización de electrones (ELF) y los índices de deslocalización son de gran utilidad para analizar el enlace en moléculas empobrecidas electrónicamente. Además, la direccionalidad de las interacciones halógeno-halógeno se comprende mejor utilizando enfoques topológicos basados en ELF.

En el campo de la catálisis, he investigado la actividad catalítica de los sulfuros de racimo de molibdeno y tungsteno en procesos de hidrodefluoración, evolución fotoinducida de hidrógeno a partir del agua, así como para la hidrogenación de sustratos orgánicos. En este último campo, mi grupo ha desarrollado protocolos catalíticos cuantitativos y selectivos para la producción de aminas y Z-alquenos. El trabajo demuestra que los sulfuros de racimo de molibdeno son modelos útiles de materiales basados en MoS_2 capaces de emular sus sitios activos. Un trabajo reciente muestra que mecanismos centrados en el azufre operan en el caso de la semihidrogenación catalítica de nitroarenos o alquinos utilizando clústeres de Mo_3S_4 dopados con ligandos donantes de N. En la actualidad, el grupo está ampliando su investigación en catálisis hacia la deshidrogenación catalítica de ácido fórmico y alcoholes como vectores energéticos.

En el ámbito de la gestión universitaria, he sido vicerrectora de investigación de la Universidad Jaume I desde 2006 hasta 2010. En junio de 2012 recibí el Doctorado Honoris Causa del Instituto Nikolaev de la Rama Siberiana de la Academia Rusa de Ciencias. También he recibido el Premio de Investigación XVII Edición del Consejo Social de la Universidad Jaume I en 2015 por mi trayectoria científica. En 2018 fui elegido miembro de la Academia Europea de Ciencias. Actualmente soy Directora Científica de la Fundación Valenciana para la Excelencia en la Investigación.

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (*ordenados por tipología*)**C.1. Publicaciones**

“Base-free catalytic hydrogen production from formic acid mediated by a cubane-type Mo_3S_4 cluster hydride”

Eva Guillaumon, Iván Sorribes, Vicent S. Safont, Andrés G. Algarra, M. Jesús Fernández-Trujillo, Elena Pedrajas, Rosa Llusar, and Manuel G. Basallote

Inorg. Chem. **2022**, 61, 16730-16739.

“Catalytic hydrogenation of azobenzene in the presence of a cuboidal Mo_3S_4 cluster via an uncommon sulfur-based H_2 activation mechanism”

Eva Guillaumon, Mónica Oliva, Juan Andrés, Rosa Llusar, Elena Pedrajas, Vicent S. Safont, Andres G. Algarra, Manuel G. Basallote.

ACS catalysis **2021**, 11, 608-614.

“Cuboidal Mo_3S_4 Clusters as a Platform for Exploring Catalysis: A Three-Center Sulfur Mechanism for Alkyne Semihydrogenation”

Andrés G. Algarra, Eva Guillaumon, Juan Andrés, M. Jesús Fernández-Trujillo, Elena Pedrajas, Jose A. Pino-Chamorro, Rosa Llusar, Manuel G. Basallote,

ACS catalysis **2018**, 8, 7346-7350.

“Selective reductive amination of aldehydes from nitro compounds catalyzed by molybdenum sulfide clusters”

Elena Pedrajas, Ivan Sorribes, Kathrin Junge, Matthias Beller, Rosa Llusar

Green Chemistry **2017**, 19, 3764-3768.

“Photogeneration of Hydrogen from Water Starting from Hybrid Mo_3S_7 clusters immobilized over TiO_2 ” David Recatalá, Rosa Llusar, Artem L. Guschin, Ekaterina A. Kozlova, Pavel A. Abramov, Maxim N. Sokolov, Roberto Gómez, Terea Lana-Villarreal

ChemSusChem **2015**, 8, 148-157.

“Chemoselective Transfer Hydrogenation to Nitroarenes Mediated by Cubane-Type Mo_3S_4 Cluster Catalysis” Iván Sorribes, Gerrit Wienhöfer, Cristian Vicent, Kathrin Junge, Rosa Llusar, Matthias Beller

Angew. Chem. Int. Engl. Ed. **2012**, 51, 7794-7798.

“Mechanism of the Catalytic Hydrodefluorination of Pentafluoropyridine by Group 6 Triangular Cluster Hydrides Containing Phosphines: A Combined Experimental and Theoretical Study” Tomás F. Beltrán, Marta Feliz, Rosa Llusar, Jose A. Mata, Vicent S. Safont.

Organometallics **2011**, 30, 290-297

“New insights into the mechanism of proton transfer to hydride complexes: kinetic and theoretical evidence showing the existence of competitive pathways for the protonation of the $[\text{W}_3\text{S}_4\text{H}_3(\text{dmpe})_3]^+$ cluster with acids”

Andrés G. Algarra, Manuel G. Basallote, Marta Feliz, M. Jesús Fernández-Trujillo, Rosa Llusar and Vicent S. Safont

Chem. Eur. J., **2006**, 12, 1413-1426.

“Single-Component Magnetic Conductors Based on Mo_3S_7 Trinuclear Clusters with Outer Dithiolate Ligands”

Rosa Llusar, Santiago Uriel, Cristian Vicent, Juan M. Clemente-Juan, Eugenio Coronado, Carlos J. Gómez-García, Benoît Braïda, Enric Canadell

J. Am. Chem. Soc. **2004**, 126, 12076-12083.

“Topological Analysis of Electron Density in Depleted Homopolar Chemical Bonds”
Rosa Llusar, Armando Beltrán, Juan Andrés, Stéphane Noury y Bernard Silvi
J. of Computational Chemistry **1999**, 20, 1517-1526

C.2. Congresos

Oral communication “Sulfur-based hydrogen activation mechanism by cuboidal molybdenum sulfide clusers”
44th International Conference on Coordination Chemistry, Rimini (Italia), 28 August -2 September 2022.

Invited Talk: “Sulfur-based hydrogenation of organic substrates using molybdenum cluster sulphides”
International Hybrid Meeting on Physics and Chemistry of Advanced Materials, Indian Institute of Technology, Delhi (India), 24-27 October 2021.

Invited Conference “Group 6 metal cluster sulphides as an alternative to noble metals for the catalytic transformation of organic substrates”
Encontro Virtual de Materiais Funcionais (Center of Functional Materials), Sao Carlos (Brasil) 24-25 September 2020.

C.3. Proyectos de investigación

Reference: TED2021-132328B-I00
Title: Combinado geles supramoleculares de origen natural y clústeres catalíticos biomiméticos para la transición hacia una economía circular
Co-IP: Rosa Llusar (IP Beatriu Escuder)
Entity: Spanish Ministerio de Ciencia e Innovación
Period: 01/12/2022 - 30/11/2024
Amount (in euros): 114.950

Reference: CIAICO/2021/122
Title: Diseño de nuevos catalizadores polimetálicos para la transformación sostenible de sustratos orgánicos combinando teoría y experimento
Co-IP: Rosa Llusar (IP Juan Andrés)
Entity: Conselleria d’Innovació, Universitat, Ciència i Societat Digital (Generalitat Valenciana)
Period: 01/01/2022- 31/12/2024
Amount (in euros): 79.500

Reference: UJI-B2021-29
Title: Producción y almacenamiento de hidrógeno a partir de ácido fórmico y alcoholes catalizada por sulfuros clúster de metales del grupo seis y sus mecanismos de reacción
IP: Rosa Llusar
Entity: Universitat Jaume I
Period: 01/01/2022 - 31/12/2024
Amount (in euros): 19.728