



UNIÓN EUROPEA
Fondo Europeo de
Desarrollo Regional (FEDER)
Una manera de hacer Europa

Fecha del CVA	2024



Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre y apellidos	Enrique Sánchez Marcos		
DNI/NIE/pasaporte			
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	K-8931-2104	
	Código Orcid	0000-0002-8367-9105	

A.1. Situación profesional actual

Organismo	Universidad de Sevilla		
Dpto./Centro	Química Física		
Dirección	Facultad de Química. 41012-Sevilla		
Teléfono		Correo electrónico	
Categoría profesional	Catedrático de Universidad	Fecha inicio	Julio, 2000
Espec. cód. UNESCO	2206, 2210, 2305		
Palabras clave	Química Cuántica, Modelización Molecular, Iones, Disolución, EXAFS, XANES,		

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

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciado en Química	Sevilla	1980
Doctor en Química	Sevilla	1984

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

Número de quinquenios concedidos: 8 (1981-2020)

Número de sexenios concedidos: 7 (1981-2022)

Índice h total/últimos 5 años: 37/15

Índice i10 total/últimos 5 años: 87/27

Número de citas totales/últimos 5 años: 3913/699

Promedio citas/año totales/últimos 5 años: 83/153

Datos de Google Scholar (31-12-2024)

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

Carrera Profesional:

Becario FPI (1981/1982); Prof. Ayudante (1982/1985); Prof. Colaborador (1985/1987) Prof. Titular (1987/2000); Catedrático de Universidad (2000/-)

Estancias en el Extranjero:

Postdoctoral: Nancy y Toulouse, (Francia) (1984/1985).

Investigador Inv.: Eindhoven (4 meses, 1988), Toulouse (3 meses, 1990), Oxford (3 meses, 2000-2002), México (4 meses, 2006-2018)

Profesor Inv.: Univ. Paris Sud (2 meses, 2010), Rutherford Appleton Laboratory (Oxfordshire) (1 año, 2010/2011)

Investigador Inv.: Rutherford Appleton Laboratory (Oxfordshire) (3 meses, 2012)

Proyectos de Investigación: Plan Nacional I+D+I (trianuales): 9 (desde 1989 hasta 2022)

Proyecto del Plan Estatal 2017-2020 Generación Conocimiento. Referencia PGC2018-099366-B-100 (2019-2022)

Proyectos de Excelencia (tri- y tetra- anuales) de la Junta de Andalucía: 2 (desde 2007 hasta 2018)

Proyecto Junta Andalucía/FEDER/Univ. de Sevilla: 1 (2020-2022)

Fundación Ramón Areces (trianual): 1 (2000-2003)

Acciones Integradas: Hispano-Británica (bianual) : 1 (2000-2002), Hispano-Austríaca (bianual) : 1 (2007-2009)

Proyecto de Cooperación Internacional Hispano-Tunecino (bianual): 1 (2003-2004)

Publicaciones científicas: 2 Capítulos de libro

118 artículos en revistas internacionales entre las cuales están *J. Am. Chem. Soc.*, *Angew. Chem. Int.*, *J. Phys. Chem. Lett.*, *J. Phys. Chem.*, *J. Chem. Phys.*, *J. Org. Chem.*, *Inorg. Chem.*, *J. Chem. Theory Comput.*, *Chem. Phys. Chem.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*

2 Editor invitado de números especiales de la revista *Theoretical Chemistry Accounts/Springer-Verlag* (2006, 2011).

Publicaciones más relevantes:

1) A. Muñoz-Páez and E. Sánchez Marcos, *J. Am. Chem. Soc.* 114, 1992, 6931.

2) R. R. Pappalardo, E. Sánchez Marcos, M. F. Ruíz-López, D. Rinaldi and J. L. Rivail, *J. Am. Chem. Soc.* 115, 1993, 3722.

3) A. Muñoz-Páez, R. R. Pappalardo and E. Sánchez Marcos, *J. Am. Chem. Soc.* 117, 1995, 11710.

4) S. Díaz-Moreno, A. Muñoz-Páez, J. M. Martínez, R. R. Pappalardo and E. Sánchez Marcos, *J. Am. Chem. Soc.*, 118, 1996, 12654.

5) J. M. Martínez, R. R. Pappalardo and E. Sánchez Marcos *J. Am. Chem. Soc.*, 121, 1999, 3175.

6) P. J. Merkling, A. Muñoz-Páez and E. Sánchez Marcos, *J. Am. Chem. Soc.* 124, 2002, 10911.

7) E. C. Beret, J. M. Martínez, R. R. Pappalardo, E. Sánchez Marcos, N. L. Doltsinis and D. Marx, *J. Chem. Theor. Comp.* 4, 2008, 2108.

8) E. Galbis, J. Hernández-Cobos, C. Den Auwer, C. Le Naour, D. Gillaumont, E. Simoni, R. R. Pappalardo y E. Sánchez Marcos, *Angew. Chem. Int. Ed.* 49, 2010 3811-3815.

9) D. T. Bowron, E. C. Beret, E. Martín-Zamora, A. K. Soper y E. Sánchez Marcos, *J. Am. Chem. Soc.* 134, 2012, 962. (Portada del número donde se publicó)

10) N. Morales, E. Galbis, J. M. Martínez, R. R. Pappalardo y E. Sánchez Marcos, Identifying Coordination Geometries of Metal Aquaions in Water: Application to the Case of Lanthanoid and Actinoid Hydrates *J. Phys. Chem. Lett.* 7, 2016, 275.

11) S. Pérez-Conesa, J. M. Martínez, R. R. Pappalardo, E. Sánchez Marcos, Extracting the Americium Hydration from an Americium Cationic Mixture in Solution: A Combined X-ray Absorption Spectroscopy and Molecular Dynamics Study. *Inorg. Chem.* 57, 2018, 8089. (portada del número donde se publicó).

12) R. R. Pappalardo, D. Z. Caralampio, J. M. Martínez, E. Sánchez Marcos, Hydration of heavy alkaline-earth cations studied by molecular dynamics simulations and X-ray absorption spectroscopy. *Inorg. Chem.* 60, 2021, 13578.

13) G. Raposo-Hernández, R. R. Pappalardo, F. Réal, V. Vallet, E. Sánchez Marcos, Toward a realistic theoretical electronic spectra of metal aqua ions in solution: The case of $\text{Ce}(\text{H}_2\text{O})^{3+}_n$ using statistical methods and quantum chemistry calculations. *J. Chem. Phys.* 161, 2024, 144109.

Conferencias, Seminarios y Comunicaciones Invitadas 60 (España, Reino Unido, Francia, Portugal, Austria, Holanda, Italia, EEUU, Grecia, Suiza, México, Venezuela, Cuba, Chile, Marruecos, Túnez, China)

Tesis Doctorales dirigidas 12 entre 1985 y 2019.

Otras actividades organizativas y de gestión:

Secretario de la 1ª Comisión de Habilitación a Catédricos de Química Física (2003/2004)

Coordinador Nacional del programa interuniversitario de Química Teórica y Computacional (2004/2005)

Representante de la universidad de Sevilla en el programa interuniversitario de doctorado en Química Teórica y Computacional (desde 2000)

Miembro del Panel de Química y Materia Blanda (PCR3) de Asignación de Tiempos de Medida en el Sincrotrón SOLEIL (Francia) (2007-2010)

Miembro del Panel de Soft Matter de Acceso a la Fuente de Neutrones ISIS del Rutherford Appleton Laboratory (Oxfordshire, Reino Unido) (2015-2018).

Miembro del Panel de Expertos de Química de la Red de Supercomputación Marenostrum. (Barcelona)(desde 2019)

Censor de Revistas Internacionales: Nature, Science, PNAS, J.Am.Chem.Soc., Angew.Chem.Int.Ed., J.Phys.Chem., J.Chem.Phys., Inorg.Chem., PCCP, Chem.Phys.Lett..

Revisor de Proyectos de Investigación Nacionales y Autonómicos de la ANEP desde 1990.

Miembro de la Comisión Ministerial de Asignación de Proyectos de Química (2012).

Miembro de la Comisión Ministerial de Asignación de Contratos Juan de la Cierva (2020).

Miembro del Comité de Acceso del Barcelona Supercomputing Center (Panel Química de sistemas biológicos) (2019-2022).

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (ordenados por tipología) (10 últimos años)

C.1. Publicaciones

(1)A. Melchior, M. Tolazzi, J.M. Martínez, R. R. Pappalardo y E. Sánchez Marcos, *Hydration of Two Cisplatin Aqua-Derivatives Studied by Quantum Mechanics and Molecular Dynamics Simulations* J. Chem.Theory Comput. 11, **(2015)** 1735.

(2)E.I. Martín, J.M. Martínez y E. Sánchez Marcos, *Theoretical Study on the Hydrophobic and Hydrophilic Hydration on Large Solutes: The case of Phthalocyanines in water* J. Chem. Phys. 143, **(2015)** 044502.

(3)N. Morales, E. Galbis, J. M. Martínez, R.R. Pappalardo y E. Sánchez Marcos, *Identifying Coordination Geometries of Metal Aquaions in Water: Application to the Case of Lanthanoid and Actinoid Hydrates* J. Phys. Chem. Lett. 7, **(2016)** 4275.

(4)S.Pérez-Conesa, F. Torrico, J. M. Martínez, R.R. Pappalardo y E. Sánchez Marcos, *A Hydrated Ion Model of $[UO_2]^{2+}$ in water: Structure, Dynamics and Spectroscopy from Classical Molecular Dynamics* J. Chem. Phys. 145, **(2016)** 224502.

(5)D. Z. Caralampio, J.M. Martínez, R. R. Pappalardo y E. Sánchez Marcos, *Development of a Polarizable and Flexible Model of the Hydrated Ion Potential to Study the Intriguing Case of Sc(III) Hydration* Theor. Chem. Acc. 136, **(2017)** 47.

(6)D. Z. Caralampio, J.M. Martínez, R. R. Pappalardo y E. Sánchez Marcos, *The Hydration Structure of the Heavy-alkalines Rb^+ and Cs^+ through Molecular Dynamics and X-ray Absorption Spectroscopy: Surface Clusters and Eccentricity* Phys. Chem. Chem. Phys. 19, **(2017)** 28993.

(7)S.Pérez-Conesa, J. M. Martínez, y E. Sánchez Marcos, *Hydration and Diffusion Mechanism of Uranyl in Montmorillonite Clay: Molecular Dynamics Using an Ab Initio Potential* J. Phys. Chem. C 145, **(2017)** 27437. (Portada del número donde se publicó)

(8)R. Ayala, J.M. Martínez, R. R. Pappalardo, K. Refson y E. Sánchez Marcos, *Effects of Basicity on the Hydrolysis of the Bi(III) Aqua Ion in Solution: An Ab Initio Molecular Dynamics Study* J. Phys. Chem. A 122 **(2018)** 1905.

(9)S. Pérez-Conesa, J.M. Martínez, R. R. Pappalardo y E. Sánchez Marcos, *Extracting the Americyl Hydration from an Americium Cationic Mixture in Solution: A Combined X-ray Absorption Spectroscopy and Molecular Dynamics Study* Inorg. Chem. 57 **(2018)** 8089. ((Portada del número donde se publicó).

(10) R. R. Pappalardo, D. Z. Caralampio, J.M. Martínez y E. Sánchez Marcos, *Hydration Structure of the Elusive Ac(III) Aqua Ion: Interpretation of X-ray Absorption Spectroscopy (XAS) Spectra on the Basis of Molecular Dynamics (MD) Simulations* Inorg. Chem. 58 **(2019)** 2777.

(11)S. Pérez-Conesa, F. Torrico, J.M. Martínez, R. R. Pappalardo y E. Sánchez Marcos, *A general study of actinyl hydration by molecular dynamics simulations using ab initio force fields* J. Chem. Phys. 150 (2019) 104504.

(12)J. Hernández-Cobos, J.M. Martínez, R. R. Pappalardo, I. Ortega-Blake y E. Sánchez Marcos, *A General Purpose Acetonitrile Interaction Potential to Describe its Liquid, Solid and Gas Phases* J. Mol. Liquid. 318 (2020) 113975.

(13)R. R. Pappalardo, D.Z. Caralampio, J.M. Martínez, E. Sánchez Marcos, Hydration of heavy alkaline-earth cations studied by molecular dynamics simulations and X-ray absorption spectroscopy. Inorg. Chem. 60, 2021, 13578.

(14) G. Raposo-Hernández, R. R. Pappalardo, F. Réal, V. Vallet, E. Sánchez Marcos, Toward a realistic theoretical electronic spectra of metal aqua ions in solution: The case of $\text{Ce}(\text{H}_2\text{O})_9^{3+}$ using statistical methods and quantum chemistry calculations. J. Chem. Phys. 161, 2024, 144109.

C.2. Proyectos

(1)"Métodos Teóricos para Describir Cationes Radioactivos en Medios Condensados: Una Aproximación Atomística para Comprender la Especiación de Radionucleidos tras el Accidente de Fukushima"

Investigador/es responsable/es: ENRIQUE SÁNCHEZ MARCOS

Número de investigadores/as: 6

Entidad/es financiadora/s: Junta de Andalucía/Universidad de Sevilla

Nombre del programa: Proyectos I+D+i FEDER Andalucía 2014-2020

Cód. según financiadora: US-1264472

Fecha de inicio: 01/02/2020, Fecha de finalización: 31/01/2023

(2)Denominación del proyecto: Modelización Computacional de Iones Radioactivos en Disolución y en Medios Confinados.

Número de investigadores/as: 4

Nombre del programa: Programa General de Promoción del Conocimiento

Cód. según financiadora: PGC2018-099366-B-I00

Fecha de inicio: 2019, Fecha de finalización: 2023

C.3 Tesis Doctorales

(1) Doctora: Noelia Morales Negrito

Directores de Tesis: Rafael Rodríguez Pappalardo y Enrique Sánchez Marcos

Título de la Tesis: Estudio teórico de propiedades fisicoquímicas de cationes metálicos en disolución: Evolución en el grupo de los alcalinos y en la serie de los lantánidos

Calificación: Apto cum laude

Organismo y año de lectura: Universidad de Sevilla, 2015

(2) Doctor: Daniel Zein Caralampio Mínguez

Directores de Tesis: José Manuel Martínez Fernández y Enrique Sánchez Marcos

Título de la Tesis: Looking for Synergies in Solution Chemistry between First-principles Intermolecular Potentials and EXAFS and XANES Spectroscopies.

Calificación. Apto cum laude

Organismo y año de lectura: Universidad de Sevilla, 2018

(3) Doctor: Sergio Pérez Conesa.

Directores de Tesis: José Manuel Martínez Fernández y Enrique Sánchez Marcos

Título de la Tesis: Computational Chemistry of Actinoids in Solution and Confined Media.

Calificación. Apto cum laude y doctorado internacional

Organismo y año de lectura: Universidad de Sevilla, 2019

C.4. Trabajos Presentados en Congresos, Seminarios, Workshops Nacionales e Internacionales

(1)Congreso: WATOC2014 (10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists). Conferencia Invitada: *Combining Computer Simulations with X-ray Absorption Spectroscopy in the Study of Trivalent Actinide and Lanthanide Cations in Aqueous Solution*. Santiago de Chile (Chile), (2014).

- (2) Seminarios del Centro de Investigaciones Químicas. Conferencia Invitada: *Química en Disolución de Iones Metálicos: de los complejos antitumorales a los cationes radioactivos* Universidad Autónoma del Estado de Morelos (Cuernavaca, México), (2014).
- (3) Workshop: SANDALS 25th Anniversary Meeting. Conferencia Invitada: *Water-counterion competition in the axial hydration Shell of Pd(II) square-planar complexes revealed by neutron and x-ray diffraction*. Rutherford Appleton Laboratory Oxfordshire (Reino Unido), (2015).
- (4) Seminaire de l'Institut de Chimie de Nice. Conferencia Invitada: *Theoretical study of metal cations in solution: Radioactive aqua ions and Pt(II) and Cu(II) antitumoral complexes*. Université de Nice (Francia), (2015).
- (5) Congreso: Frontiers in Water Biophysics. Comunicación Oral: *The hydration of cisplatin and its aquaderivatives by molecular dynamics simulations using first principles intermolecular potentials*. Ettore Majorana Foundation (Erice, Italia), (2015).
- (6) Seminar of the Department of Chemistry. Conferencia Invitada: *Theoretical study of metal cations in solution: Rare-earth aqua ions and Pt(II) and Cu(II) antitumoral complexes*. Università degli studi di Udine (Italia), (2015).
- (7) Congreso: WaterSpain2017. Comunicación Oral: *The Identification of the Coordination Geometry of Metal Aquaions in Water: a Way to Understand the Rare-earth Contraction of Aquaions*. ZCAM, Zaragoza, (2017).
- (8) Coloquio del Instituto de Ciencias Físicas. Conferencia: *Hidratación y Complejación de Cationes Metálicos en Disolución: de los Alcalinos a los Actínidos Radioactivos pasando por Fármacos Antitumorales*. UNAM, Cuernavaca (México), (2017).
- (9) 4th International Workshop on Advances Techniques in Actinide Spectroscopy. Talk: *Combining X-ray Absorption Spectroscopy and molecular Dynamics to Elucidate the hydration Structure of Actinoid Cations in Water*. (Nice, France). (2018).
- (10) CECAM Workshop, Microscopic Simulations: Forecasting the next two decades. Talk: *From QM to X-ray absorption spectroscopy via MD: An ensemble of techniques to solve structures in solution*. (Toulouse, France). (2019).