

DATOS PERSONALES

Nombre y Apellidos:	Andrés García Algarra	
Departamento:	Departamento de Ciencia de los Materiales e Ing. Metalúrgica y Química Inorgánica	
Email:	andres.algarra@uca.es	
Dirección:	Universidad de Cádiz, Apartado 40, 11510 Puerto Real, Cádiz, Spain	
Teléfono:		
Grupo de Investigación:	FQM137 Estabilidad y Mecanismo de Reacciones Inorgánicas	
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	C-1280-2011
	Código Orcid	0000-0002-5062-2858

FORMACIÓN ACADÉMICA:

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad
Licenciatura en Química	Universidad de Cádiz, 2004
Doctorado en Química	Universidad de Cádiz, 2009

ACTIVIDAD INVESTIGADORA

Breve Resumen del Curriculum Investigador: (max. 3500 caracteres)

Tras obtener su título de Ldo. en Química por la Universidad de Cádiz, AGA recibió una beca de Formación del Profesorado Universitario (FPU) que le permitió continuar en dicha institución para doctorarse en Química en el año 2009 bajo la dirección del profesor Manuel G. Basallote. Su tesis doctoral, titulada "Estudio cinético-mecanístico de clústeres M_3Q_4 (M= Mo, W; Q= S, Se) y compuestos relacionados", galardonada con premio extraordinario de doctorado, se centró en el uso de la química computacional (principalmente cálculos DFT) para, en combinación con datos experimentales, explicar el mecanismo de las reacciones que sufren este tipo de especies. Durante este período AGA realizó estancias con los profesores Agustí Lledos y Jeremy N. Harvey. Entre otros logros asociados a la química de clústeres M_3Q_4 , cabe señalar la confirmación de la existencia de dos mecanismos competitivos para la protonación de los hidruros coordinados a estas especies, o el análisis computacional de un fenómeno común al estudiar la cinética de algunas de sus reacciones de sustitución denominado "cinética estadística".

De nuevo con ayuda de una beca nacional, AGA realizó su 1ª estancia postdoctoral (2010-2012) en el grupo de investigación del profesor Stuart A. Macgregor (*Heriot-Watt University, UK*). Allí, AGA continuó sus estudios en el campo de la química computacional tomando experiencia en diversas técnicas de análisis de la estructura electrónica. Estas fueron por ejemplo empleadas para describir las propiedades del enlace en uno de los pocos complejos metal-alcano aislados hasta la fecha. Cabe destacar de este periodo también su interés por el mecanismo de activación de enlaces C-H y C-haluro.

Financiado en parte por una prestigiosa fundación sueca (*Wener-gren*), AGA realizó su 2ª estancia postdoctoral (2013-2014) en el grupo de química computacional del profesor Fahmi Himo (*University of Stockholm, Sweden*). Allí su trabajo se centró en el aprendizaje y empleo del método de análisis de distorsión/interacción con el fin de comprender las diferencias en las barreras de activación asociadas a los posibles mecanismos de un proceso y el porqué de sus magnitudes. Esto permitió, entre otras cosas, explicar el rango de barreras de activación y energías libres de reacción que muestran las reacciones de cicloadición entre clústeres M_3S_4 y alquinos.



En 2015 AGA volvió a la Universidad de Cádiz. Por una parte, su investigación allí ha continuado tratando la reactividad de clústeres M_3Q_4 , cabiendo destacar la reciente publicación de un capítulo de libro que resume parte de los estudios llevados a cabo hasta la fecha. Nótese que en la gran mayoría de los casos estos se complementan con resultados experimentales. Por otra parte, en los últimos años AGA ha tratado temas relativos a la interacción del H_2 con metales. Empleando estos conocimientos como base, AGA pretende profundizar en el estudio de los procesos relacionados con la activación de H_2 en presencia de complejos metálicos y su aplicación para el uso del hidrógeno como vector energético, representando esto su línea de investigación a medio/largo plazo.

Indicadores generales de calidad de la producción científica

Publicaciones en Revistas Internacionales en los últimos 10 años:	36
Número de tesis doctorales dirigidas en los últimos 10 años:	0
Libros y Capítulos de Libros en los últimos 10 años:	2
Participaciones en Congresos Internacionales en los últimos 10 años:	7
Citas totales:	937

- Línea/s de Investigación: (Título y breve resumen)

Uso de métodos computacionales para el estudio de la estructura y reactividad de complejos metálicos: La química computacional permite obtener información tanto estructural como mecanística muy útil para determinar cómo y porqué las reacciones químicas tienen lugar. Mi principal línea de investigación se basa en emplear estos métodos para estudiar procesos que involucran metales de transición y cuyo mecanismo se desconoce.

- Publicaciones: (más relevantes en los últimos 10 años):

Daver, H.; Algarra, A. G.; Rebek, J.; Harvey, J. N.; Himo, F., Mixed Explicit–Implicit Solvation Approach for Modeling of Alkane Complexation in Water-Soluble Self-Assembled Capsules. *Journal of the American Chemical Society* **2018**, 140, (39), 12527-12537.

Algarra, A. G.; Guillamón, E.; Andrés, J.; Fernández-Trujillo, M. J.; Pedrajas, E.; Pino-Chamorro, J. Á.; Llusar, R.; Basallote, M. G., Cuboidal Mo_3S_4 Clusters as a Platform for Exploring Catalysis: A Three-Center Sulfur Mechanism for Alkyne Semihydrogenation. *ACS Catalysis* **2018**, 8, 7346-7350.

Lundberg, H.; Tinnis, F.; Zhang, J.; Algarra, A. G.; Himo, F.; Adolfsson, H., Mechanistic Elucidation of Zirconium-Catalyzed Direct Amidation. *Journal of the American Chemical Society* **2017**, 139, (6), 2286-2295.

Algarra, A. G., Computational Insights on the Mechanism of H_2 Activation at $Ir_2S_2(PPh_3)_4$: A Combination of Multiple Reaction Pathways Involving Facile H Migration Processes. *Inorganic Chemistry* **2017**, 56, (1), 186-196.

Pino-Chamorro, J. Á.; Gushchin, A. L.; Fernández-Trujillo, M. J.; Hernández-Molina, R.; Vicent, C.; Algarra, A. G.; Basallote, M. G., Mechanism of [3+2] Cycloaddition of Alkynes to the $[Mo_3S_4(acac)_3(py)_3][PF_6]$ Cluster. *Chemistry – A European Journal* **2015**, 21, (7), 2835-2844.

Bustelo, E.; Gushchin, A. L.; Fernández-Trujillo, M. J.; Basallote, M. G.; Algarra, A. G., On the Critical Effect of the Metal (Mo vs. W) on the [3+2] Cycloaddition Reaction of M_3S_4 Clusters with Alkynes: Insights from Experiment and Theory. *Chemistry – A European Journal* **2015**, 21, 14823-14833.



Kumar, A.; Johnson, H. C.; Hooper, T. N.; Weller, A. S.; Algarra, A. G.; Macgregor, S. A., Multiple metal-bound oligomers from Ir-catalysed dehydropolymerisation of H_3B-NH_3 as probed by experiment and computation. *Chemical Science* **2014**, 5, (6), 2546-2553.

Poulten, R. C.; Page, M. J.; Algarra, A. G.; Le Roy, J. J.; López, I.; Carter, E.; Llobet, A.; Macgregor, S. A.; Mahon, M. F.; Murphy, D. M.; Murugesu, M.; Whittlesey, M. K., Synthesis, Electronic Structure, and Magnetism of $[Ni(6-Mes)_2]^+$: A Two-Coordinate Nickel(I) Complex Stabilized by Bulky N-Heterocyclic Carbenes. *Journal of the American Chemical Society* **2013**, 135, (37), 13640-13643.

Page, M. J.; Lu, W. Y.; Poulten, R. C.; Carter, E.; Algarra, A. G.; Kariuki, B. M.; Macgregor, S. A.; Mahon, M. F.; Cavell, K. J.; Murphy, D. M.; Whittlesey, M. K., Three-Coordinate Nickel(I) Complexes Stabilised by Six-, Seven- and Eight-Membered Ring N-Heterocyclic Carbenes: Synthesis, EPR/DFT Studies and Catalytic Activity. *Chemistry – A European Journal* **2013**, 19, (6), 2158-2167.

Pike, S. D.; Thompson, A. L.; Algarra, A. G.; Apperley, D. C.; Macgregor, S. A.; Weller, A. S., Synthesis and Characterization of a Rhodium(I) s-Alkane Complex in the Solid State. *Science* **2012**, 337, (6102), 1648-1651.

Algarra, A. G.; Fernández-Trujillo, M. J.; Basallote, M. G., A DFT and TD-DFT Approach to the Understanding of Statistical Kinetics in Substitution Reactions of M_3Q_4 (M=Mo, W; Q=S, Se) Cuboidal Clusters. *Chemistry – A European Journal* **2012**, 18, (16), 5036-5046.

Algarra, A. G.; Basallote, M. G.; Feliz, M.; Fernández-Trujillo, M. J.; Llusar, R.; Vicent, V. S., The Role of Solvent on the Mechanism of Proton Transfer to Hydride Complexes: The Case of the $[W_3PdS_4H_3(dmpe)_3(CO)]^+$ Cubane Cluster. *Chemistry-A European Journal* **2010**, 16, 1613-1623.