



DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Currículum vitae abreviado del profesorado

LUGAR Y FECHA DE EMISIÓN: Logroño, 3 de JUNIO de 2024

Apellidos y nombre ¹

PUYUELO GARCÍA, MARÍA PILAR

Cuerpo o modalidad contractual

PROFESOR TITULAR DE UNIVERSIDAD

Fecha inicio

2001

Área de Conocimiento

QUÍMICA FÍSICA

Centro

Facultad de Ciencia y Tecnología

FORMACIÓN ACADÉMICA

Doctor en Ciencias Químicas	Universidad del País Vasco	1992
Licenciado en Ciencias Químicas	Universidad del País Vasco	1987

EXPERIENCIA DOCENTE

Como Profesora Asociada de Química Física (1993-2001) y después como Profesora Titular de Química Física del Departamento de Química de La Universidad de La Rioja (UR), ha impartido docencia de Química Física en la Licenciatura de Química (hasta 2015) y en el Grado de Química (2012-2024), y docencia de Química en los Grados de Química, de Enología e Ingeniería Agrícola y de Ingeniería Industrial (ETSII), según la planificación docente de cada curso.

Durante el periodo de la actividad docente en la Licenciatura de Química, impartió docencia en todas las asignaturas troncales de Química Física (básicas, avanzadas y experimentales), en asignaturas obligatorias (Estadística y Programación aplicada a la Química), y en las optativas de Química Física Computacional, Espectroscopia Láser, y Cinética y Dinámica de Reacciones Químicas. Y, por otra parte, en el periodo de la actividad docente en el Grado en Química ha impartido docencia en asignaturas troncales de Química Física (Química Física I, Química Física II), en Química Computacional Aplicada, y en la optativa de Láseres en Química. Además, en esta titulación, ha tutelado ininterrumpidamente Trabajos de fin de Grado (TFG). Con el fin de compartir la experiencia docente, e investigadora, también ha facilitado visitas Erasmus+.

En relación con la actividad docente en máster, ha impartido docencia en el Máster universitario en Química Avanzada de la UR, en las asignaturas de Láseres en Química: Fundamentos y aplicaciones (2004-2015) e Instrumentación química: análisis, adquisición y control de señales en instrumentación química (2012-2015), y ha participado como tutora de trabajo de fin de master en el Master interuniversitario Quimilaser :Láseres y Espectroscopia avanzada en Química (2009-2013). Durante este periodo de docencia, dirigió varios trabajos DEA y una tesis doctoral. La



actividad docente de tercer ciclo se llevó a cabo estableciendo colaboraciones interuniversitarias.

Por otra parte, desde 2019 participa como docente y tutora de Prácticum y trabajos de fin de master (TFM) en el Master universitario en Profesorado de Educación Secundaria Obligatoria y Bachillerato de la UR. Esta actividad docente ha facilitado la colaboración con profesores de enseñanza secundaria, perfilando proyectos de innovación docente en curso.

Además de la actividad docente reglada, ha participado en proyectos de innovación docente de la UR, y en actividades de difusión de la ciencia de la UR-CAR.

Número de años de experiencia docente universitaria	30	N.º Quinquenios	6
--	----	------------------------	---

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN Y RESULTADOS RELEVANTES	N.º Sexenios	-1-
--	---------------------	-----

La actividad en investigación comienza con la formación predoctoral estudiando la cinética y dinámica de estados excitados de moléculas diatómicas mediante espectroscopia laser, bajo la dirección del Prof. Ernesto Martínez Ataz, en el grupo del Prof. Fernando Castaño Almendral (Dpto. Química Física, UPV/EHU). En este periodo participa como becaria predoctoral en proyectos de investigación en curso, desarrollando el trabajo de tesis doctoral dedicado al estudio de dímeros de telurio y selenio mediante fluorescencia inducida por láser resuelta en el tiempo, y colaborando en el estudio de halógenos. La formación postdoctoral en el curso 1992/1993 se realiza bajo la dirección del Prof. M. Ashfold (School of Chemistry, University of Bristol), en la línea de investigación del estudio experimental mediante ionización multifotónica resonante (REMPI-TOF-MS) de estados Rydberg de moléculas (Tiirano y Metanotiol) y radicales (P2). Esta formación se completa, colaborando (Prof. F. Castaño) eventualmente en el estudio experimental de la cinética de desactivación de radicales (carbenos) mediante técnicas de espectroscopia láser (IRMPD y TRLIF). En 1993, se incorpora al grupo del Prof. Miguel González, en el dpto. de Química de la Universidad de La Rioja.

Durante el periodo 1993-2015, participa sin interrupción como investigador o como investigador principal, en proyectos de investigación nacionales (en UR, coordinados UR-UB, o en UB) dedicados al estudio teórico y experimental de la dinámica y cinética de reacciones químicas seleccionadas. En los proyectos desarrollados entre 1993-2005, se puso punto el laboratorio para el estudio mediante técnicas de espectroscopia láser (bombeo y sondeo) de la dinámica de reacciones químicas fotoiniciadas en fase gas, y se estudió la dinámica y estereodinámica (perfiles Doppler) de reacciones de O(1D) con metano e hidrocarburos. Este trabajo se recogió en dos tesis doctorales, siendo codirectora de una de ellas. Posteriormente, ha participado en la solicitud de proyectos nacionales hasta 2019.

Por otra parte, en el equipo de investigación UR-UB, ha colaborado en algunos de los estudios teóricos de la dinámica y cinética de las reacciones químicas seleccionadas en fase gas, principalmente cercanas a mi actividad experimental (O(1D) + N₂O, O(3P) + CH₄), utilizando el método de trayectorias cuasiclásicas (QCT), y en la línea de investigación del estudio de la reactividad de sistemas enzimáticos mediante la metodología híbrida QM/MM, participando en los trabajos iniciales del estudio comparativo de las reacciones de la proteasa NS3 del virus de la

hepatitis C con sus sustratos principales (2008-2011). Actualmente, de acuerdo con la línea de investigación teórica del grupo, colabora en la caracterización de procesos de captura en reacciones ión-molécula a bajas temperaturas.

Se adjuntan resultados seleccionados de los últimos años de actividad.

Publicaciones:

Artículo: Martínez, R.; Enriquez, P. A.; Puyuelo, M. P.; González, M. Exploring the stereodynamics and microscopic mechanism of the $O(^3P) + CH_4, CD_4 \rightarrow OH + CH_3, OD + CD_3$ combustion reactions, *Chemical Physics*, 2015, 461, 98- 105. Q3.

Artículo: Martínez-González J. A.; Rodríguez, A.; Puyuelo, M. P.; Martínez, R. Further theoretical insight into the reaction mechanism of the hepatitis C NS3/NS4A serine protease. *Chemical Physics Letters*, 2015, 619, 97-102. Q2.

Artículo: Martínez, R.; Enriquez, P. A.; Puyuelo, M. P.; González, M., The Dynamics of the $O(^3P) + CH_4 \rightarrow OH + CH_3$ Reaction is Similar to that of a Triatomic Reaction, *The Journal of Physical Chemistry. A*, 2012, 116/21, 5026- 5029, 1089-5639. Q2.

Proyectos de investigación:

Project: Estudio teórico de la dinámica y cinética de reacciones químicas. Química atmosférica, procesos de combustión y aplicaciones a sistemas enzimáticos. CTQ2011-27857-C02-01, DGI-MICINN, P.I.: M. GONZÁLEZ. (UB). 01/01/2012-31/12/2015.

Project: Estudios QM/MM de sistemas enzimáticos de interés en biomedicina: Reacción de la proteasa NS3 del virus de la hepatitis C con sus tres sustratos principales, API09/14, UR y BS. P.I. M. P. PUYUELO. (UR). 20/04/2009-30/09/2011.

Project: Estudio teórico y experimental de la dinámica y cinética de reacciones químicas. Química atmosférica, procesos de combustión y algunas aplicaciones a sistemas con un elevado número de átomos, CTQ2005-09334-C02-02, DGI- MEC. P.I. M. P. PUYUELO. (UR). **Coord.** M. GONZÁLEZ (UB). 31/12/2005-30/12/2008

Congresos:

1. ENRIQUEZ, P.A.; PUYUELO, M.P.; GAMALLO, P.; GONZALEZ, M., Dynamics and Kinetics of Low Temperature Capture Processes in $Rg + H_2^+$ Collisions, Oral presentation at *CECAM Tutorial on Dopant Dynamics in Superfluid helium-4 Nanodroplets: from Statics to Time-Dependent He-DFT*. Toulouse, June 25 to 30, 2017.

2. MARTÍNEZ, R.; ENRIQUEZ, P.A.; PUYUELO, M.P.; GONZÁLEZ M. Stereodynamics and reaction mode of the $O(^3P) + CH_4, CD_4 \rightarrow OH + CH_3, OD + CD_3$ combustion reactions on the ground PES, PÓSTER, ISMB2015. Segovia, 2015.

3. ENRIQUEZ, P.A.; PUYUELO, M.P.; MARTÍNEZ, R.; GAMALLO P.; GONZÁLEZ M., Dynamics and kinetics of the $X + H_2^+ \rightarrow XH_2^+$ ($X=He, Ne, Ar$) capture processes as a function of temperature, PÓSTER, ISMB2015. Segovia, 2015.

4 MARTINEZ, J.A.; MARTINEZ, R.; PUYUELO, M. P.; MARGRAU, L.; GONZALEZ M., QM/MM study of HCV NS3/NS4A proteasa with its main substrates: from the structure to the kinetics, PÓSTER, 9th European Biophysics Congress, Lisbon (Portugal), 2013.