

9912001 **ANÁLISIS MULTIVARIABLE APLICADO A TÉCNICAS ESPECTROFOTOMÉTRICAS UV-VIS/NIR/MIR Y DE SEPARACIÓN (HPLC-GC).**

- La investigación se realizará en quimiometría tanto con estudios teóricos como calibración multivariable. (Transferencias/mantenimiento de la calibración y selección de variables) como estudios aplicados en química de los alimentos

9912003 **CARACTERIZACIÓN Y DETECCIÓN DE FRAUDES EN ALIMENTOS MEDIANTE TÉCNICAS MULTIVARIANTES.**

La línea de investigación se basa en la aplicación de las técnicas quimiométricas a los resultados de los análisis químicos realizados sobre alimentos (café, vinagre, aceite, vino...), para su caracterización objetiva, determinación de autenticidad, clasificación por origen y detección de fraudes.

9912005 **COMPLEJOS MONO Y POLINUCLEARES DE METALES DE ACUÑAR. INTERACCIÓN METAL-METAL.**

- Síntesis y caracterización estructural de complejos polinucleares que contengan interacciones Au... M. Estudio de sus propiedades ópticas. Interpretación teórica mediante cálculos Ab initio y d. f. t. de sus propiedades.

9912007 **DESARROLLO Y VALIDACIÓN DE MÉTODOS ANALÍTICOS PARA EL SEGUIMIENTO Y CONTROL MEDIOAMBIENTAL.**

El objeto de esta línea de investigación es el desarrollo y validación de métodos analíticos basados en técnicas tales como GC, GC-MS, HPLC, HPLC-MS, CE, CE-MS, etc para la determinación de compuestos de interés ambiental, en combinación con técnicas recientes de tratamiento de muestra (extracción y microextracción en fase sólida, procesos asistidos por microondas, etc).

9912010 **ESTUDIO DE LA CINÉTICA Y DINÁMICA DE REACCIONES QUÍMICAS FOTOINICIADAS MEDIANTE TÉCNICAS DE ESPECTROSCOPIA LÁSER.**

Estudio experimental de la Dinámica y Estereodinámica de reacciones químicas fotoiniciadas de átomos de O(1D) y O(3P) con moléculas traza de la atmósfera.

Mediante la Fotólisis Láser de un precursor adecuado (N₂O, NO₂, etc..) se producen los átomos de oxígeno excitados que reaccionan con moléculas de hidrocarburo. El producto de la reacción es el radical OH(X²P), que se detecta por Fluorescencia Inducida por Láser en condiciones nacientes. Los espectros de excitación del producto se analizan para la determinación de sus distribuciones vibro-rotacionales y de las correlaciones vectoriales, que permiten dilucidar la operación de los distintos mecanismos de reacción (substracción directa, inserción, etc..).

9912011 **ESTUDIO DE LOS COMPUESTOS POLIFENÓLICOS Y SU SIGNIFICACIÓN ENOLÓGICA MEDIANTE DIVERSAS TÉCNICAS ANALÍTICAS.**

La implicación de los compuestos polifenólicos en la calidad del vino es sumamente importante, ya que, son responsables del color y de su estabilidad, así como de otra serie de características organolépticas del vino. Además, estos compuestos son marcadores de la variedad y la zona.

Dentro de esta línea de investigación se desarrollan y aplican métodos analíticos basados en las técnicas HPLC, HPLC-MS, CE, CE-MS Y FIA-MS para la determinación de estos compuestos en muestras enológicas, así como técnicas de separación actuales para el tratamiento de dichas muestras.

9912015 **DESARROLLO Y OPTIMIZACIÓN DE NUEVOS PROCESOS DE FERMENTACIÓN INDUSTRIAL.**

- Desarrollo de un nuevo proceso de fermentación en continuo, aplicación a la producción de vinagre de procedencia vínica y de alcohol.

- Desarrollo de sistemas de monitorización y control de los parámetros del proceso basados en sistemas de medidas on-line por NIR

- Desarrollos en la producción de levaduras de interés en enología

9912024 **APLICACIONES ANALÍTICAS DE LA ESPECTROSCOPIA LÁSER.**

- Se llevará a cabo la determinación de compuestos de interés medioambiental aplicando fluorescencia inducida por láser.

9912025 **DETECCIÓN Y CUANTIFICACIÓN DE COMPUESTOS CLOROFENÓLICOS Y DERIVADOS EN VINO Y MATERIALES ENOLÓGICOS. IMPLICACIONES ORGANOLÉPTICAS EN LA CALIDAD DEL VINO DE BOTA**

Uno de los problemas que actualmente tiene el sector enológico es el denominado gusto y olor a "corcho" o "moho".

Los objetivos que se plantean con estos trabajos son:

- Puesta a punto de una técnica de análisis rápida, robusta y sensible.
- Identificación de todas las especies causantes de esta alteración en el vino.
- Determinación de los valores umbrales de percepción y cuantificación de los valores de riesgo para los materiales y prácticas en bodega a partir de los cuales se detecta sabor y olor a corcho o moho.
- Estudio y evolución de compuestos clorofenólicos y derivados en el proceso de elaboración del corcho.

9912026 **ESTUDIOS ANALÍTICOS MEDIOAMBIENTALES.**

- Estudios degradativos de productos fitosanitarios y otros con influencia medio ambiental

9912027 **ESTUDIOS ANALÍTICOS ENOLÓGICOS.**

La investigación enológica presente diversas posibilidades analíticas entre las cuales se pueden destacar aquellas que pueden implicar importantes aportaciones científicas y empresariales teniendo en cuenta la experiencia del grupo investigador.

Aunque el campo de investigación no es cerrado, en principio se están desarrollando, y se desean ampliar, estudios de residuos de productos fitosanitario en las paradas de fermentación de vinos tintos.

9912034 **AVANCES EN MICROEXTRACCIÓN EN FASE SÓLIDA.**

- Se estudia y desarrolla la técnica de micro-extracción en fase sólida (SPME). Los avances que se abordan incluyen: acoplamientos con la cromatografía líquida (SPME-HPLC) y la electroforesis capilar (SPME-CE), desarrollo de nuevas fases basadas en la química sol-gel, cuantificación directa de sólidos y SPME múltiple. la finalidad última es ampliar el campo de aplicación de la SPME.

9912036 **DESARROLLO DE MÉTODOS ANALÍTICOS PARA EL CONTROL DE CALIDAD DE EMBALAJES MULTICAPA.**

- Desarrollo de métodos analíticos basados en la cromatografía líquida de alta resolución y la cromatografía de gases/espectrometría de masas, así como otras técnicas de separación como la microextracción en fase sólida y la extracción con disolventes presurizados para determinar aditivos, compuestos orgánicos volátiles, etc. en embalajes y materias primas. Estos compuestos repercuten en las propiedades físicas (adhesión, resistencia, estabilidad, etc...) y organolépticas del embalaje.

9912037 **DISEÑO EN SENSORES ÓPTICOS. APLICACIÓN A ANÁLISIS DE VINO.**

- Se llevará a cabo el diseño de sensores ópticos y posteriormente se aplicará a analizar algunos compuestos presentes en el vino.

9912038 **ESTUDIO DE LA CALIDAD DEL MOSTO Y DEL VINO MEDIANTE PARÁMETROS FÍSICO-QUÍMICOS. DIFERENCIACIÓN POR ZONAS.**

- Determinación de parámetros físicos (color, densidad, etc.) y químicos (PH, sulfuroso, tartárico, málico, etc). Búsqueda de relaciones entre estos parámetros que permitan establecer la calidad de la uva antes de su entrada en bodega.

9912046 **ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LA CINÉTICA Y DINÁMICA DE REACCIONES QUÍMICAS.**

- Utilizando técnicas cuasiclásicas (qct) de cálculo de trayectorias de reacciones químicas, se estudiarán propiedades cinéticas (constantes cinéticas, energía de activación, etc) y dinámicas (escalares y vectoriales), con el fin de caracterizar el mecanismo microscópico de dichas reacciones.

9912051 **SÍNTESIS ESTEREOSELECTIVA Y ESTUDIO CONFORMACIONAL DE AMINOÁCIDOS, GLICOAMINOÁCIDOS Y GLICOPÉPTIDOS.**

- 1- Síntesis estereoselectiva de alfa y beta-aminoácidos. Conformacionalmente restringidos.
- 2- Estudio de la reacción de cicloadición [2+2] con mecanismo polar.
- 3- Síntesis y análisis conformacional en agua de glicoaminoácidos y glicopéptidos
- 4- Síntesis y reactividad de sistemas azabíclicos.
- 5- Estudio de la reacción de cicloadición de diels-alder intramolecular de oxazolonas.

9912055 **ESPECTROSCOPIA LÁSER DE CLUSTERS (REMPI-TOF-MS).**

Los clusters formados mediante una expansión supersónica pulsada pueden ser estudiados mediante técnicas de espectroscopía láser como Fluorescencia Inducida por Láser (L.I.F.) o Ionización por Absorción Multifotónica Resonante (R.E.M.P.I.).

El proyecto de este trabajo de investigación consiste en la puesta a punto de un dispositivo experimental para la producción de clusters de moléculas poliatómicas sencillas con átomos de gas noble. Los clusters se detectarán mediante técnicas de espectroscopía láser.

9912057 **FOTOQUÍMICA DE SISTEMAS NITROGENADOS, ESTUDIOS TEÓRICOS Y EXPERIMENTALES.**

- Estudio mecanísticos y preparativos:
- Fotociclaciones de compuestos iminicos
- Comportamiento fotoquímico de 2-azabutadienos: preparación de heterociclos nitrogenados.
- Acoplamiento fotoquí de iminas de iminas insaturadas y su utilización para la síntesis de poliaminas
- Procesos fotoquímicos de iminas de complejos metal-carbeno
- Cálculos mecánico-cuánticos sobre los procesos anteriores o sobre otros procesos de interés

9912135 **DINÁMICA Y GEOMETRÍA DEL ESTADO DE TRANSICIÓN EN REACCIONES QUÍMICAS.**

Las técnicas de la teoría de sistemas dinámicas son muy adecuadas para el estudio de cuestiones relacionadas con la evolución de moléculas de reactivos a productos, las cuales pueden ser formuladas como problemas de transporte en el correspondiente espacio de fases. Una posible solución a estas cuestiones está basada en las propiedades dinámicas del estado de transición en el espacio de fases.

9912136 **ESTUDIO TEÓRICO DEL MECANISMO DE REACCIÓN DE LA PROTEASA NS3 CON VARIOS SUBSTRATOS IMPLICADOS EN EL CICLO VITAL DEL VIRUS DE LA HEPATITIS C.**

Aplicación de diferentes métodos de cálculo para la caracterización de las superficies de energía potencial a través de las cuales la proteasa NS3 reacciona con distintos sustratos. Estos procesos están implicados en el ciclo vital del virus de la Hepatitis C. Partiendo de metodologías aplicadas sólo al entorno reactivo del sistema, hasta llegar a la descripción completa del sistema (incluyendo el disolvente) mediante la aplicación de métodos QM/MM, se pretende arrojar más luz sobre el proceso de infección celular por parte del virus de la Hepatitis C.

9912137 **ESTUDIOS MECANO-CUÁNTICOS DE COMPLEJOS DE VAN DER WAALS FORMADOS POR UNA MOLÉCULA POLIATÓMICA/UNO O VARIOS ÁTOMOS DE GAS NOBLE.**

Se llevarán a cabo estudios mecano-cuánticos de complejos de van der Waals formados por una molécula poliatómica y uno o varios átomos de gas noble con el objetivo de analizar su predisociación vibracional, obtener los tiempos de vida media y las distribuciones de estados finales de los productos. Ambas propiedades se compararán con resultados experimentales. Los cálculos de predisociación vibracional se realizarán en el marco de la Regla de Oro de Fermi

9912138 **ESTUDIOS QUÍMICO-SENSORIALES DE LOS COMPONENTES OLFATO-GUSTATIVOS DEL VINO.**

La calidad del vino está relacionada con una adecuada conjunción de composición aromática y moléculas gustativas. Por esto es importante llegar a establecer de forma precisa la relación entre la calidad del vino y su contenido en odorantes y sustancias gustativas y quemoestéticas.

Dentro de esta línea de investigación se desarrollaran y aplicarán métodos analíticos de separación y de screening conjuntamente con métodos olfatométricos.

9912139 **MATERIALES MOLECULARES ORGANOMETÁLICOS: DISEÑOS, REACTIVIDAD Y ESTUDIO DE PROPIEDADES.**

- Preparación de compuestos homo-y heteropolinucleares de metales de transición estabilizados por ligandos hidrocarbonados insaturados, ligandos fósforodadores y/o enlaces metal-metal.
- Caracterización por técnicas espectroscópicas (I.R., R.M.N. multinuclear ¹H, ¹³C, ¹⁹F, ³¹P, ¹⁹⁵Pt...) y de difracción de rayos-x.
- Estudio de la reactividad .
- Estudio de propiedades ópticas y electroquímicas.

- 1- Seguimiento de procesos fermentativos del vino mediante Resonancia Magnética Nuclear.
- 2- Microvinificaciones en tubos de Resonancia Magnética Nuclear.
- 3- Seguimiento en procesos de vinificación de metabolitos marcados isotópicamente mediante Resonancia Magnética Nuclear de carbono.