

<b>Parte A. DATOS PERSONALES</b>		<b>Fecha del CVA</b>		14/12/2019
Nombre y apellidos	Pedro MERINO FILELLA			
DNI/NIE/pasaporte	17871707V	Edad	57	
Núm. identificación del/de la investigador/a	WoS Researcher ID (*)	K-2742-2014		
	SCOPUS Author ID(*)	7005415867		
	Open Researcher and Contributor ID (ORCID) **	0000-0002-2202-3460		

(\*) Al menos uno de los dos es obligatorio

(\*\*) Obligatorio

### A.1. Situación profesional actual

Organismo	Universidad de Zaragoza		
Dpto./Centro	Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI)		
Dirección	Fac. de Ciencias. Campus San Francisco. 50009 Zaragoza, Spain		
Teléfono	876553783	correo electrónico	<a href="mailto:pmerino@unizar.es">pmerino@unizar.es</a>
Categoría profesional	Catedrático de Universidad	Fecha inicio	7/03/2006
Palabras clave	Química Biológica. Carbohidratos. Nucleósidos. Nucleótidos. Organocatálisis. Química Computacional. Síntesis Asimétrica		

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

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Lcdo. Ciencias Químicas	Universidad de Zaragoza	1986
Grado de Licenciado	Universidad de Zaragoza	1986
Doctor en Ciencias	Universidad de Zaragoza	1989

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

Sexenios de investigación: 5 (último: 2011-2016)

Tesis Doctorales dirigidas: 15 (8 desde 2006); en curso: 3

Datos Google Scholar. h-index:48; i-10 index: 162

Citas totales: 7274 (2456 desde 2014)

<https://scholar.google.com/citations?user=WJAGBAAAAAJ&hl=en>

Datos de Web of Science (23/09/2019) h-index: 44

AU=(MERINO P) AND AD=(ZARAGOZA OR FERRARA)

Citas totales: 6395 (5352 sin citas propias)

Promedio de citas/año: 206.29

Datos de SCOPUS: (Author ID: 7005415867; 23/09/2019) h-index: 46

Citas totales: 6683 (5591 sin citas propias)

257 Publicaciones. Desde 2014: 64 publicaciones (53 en Q1, 82%)

Reconocido como uno de los 100.000 “top-scientists” de todas las áreas (43.727th) por la revista PLOS Biology **2019**, 17, e3000384 (DOI: 10.1371/journal.pbio.3000384), siendo el químico con mayor ranking de la Universidad de Zaragoza (6th de toda la UZ):

[http://www.unizar.es/actualidad/vernoticia\\_ng.php?id=50203&idh=9947&pk\\_campaign=iunizar20190923&pk\\_source=iunizar-personalunizar](http://www.unizar.es/actualidad/vernoticia_ng.php?id=50203&idh=9947&pk_campaign=iunizar20190923&pk_source=iunizar-personalunizar)

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

Licenciado en Química por la Universidad de Zaragoza (UZ). Junio 1986 (Premio G. Casañal-Poza). Doctor por la Universidad de Zaragoza (*cum laude*): Junio 1989. Estancia post-doctoral (1989-1992): Universidad de Ferrara (Italia). Prof. A. Dondoni.

Prof. Ayudante (UZ): 1991. Prof. Asociado (UZ): 1992. Prof. Titular (UZ): 1995. Habilitación Nacional (CU): 2005. Catedrático de Química Orgánica (UZ): 2006. Prof. visitante: Messina, Italia (2003, 2 semanas); Ferrara, Italia (2013, 4 semanas)



Supervisión de investigadores: 15 Tesis Doctorales y 3 en curso. 13 Tesis de Licenciatura. 11 DEAs, 2 Fin de Máster, 2 Estudios propios UZ y 6 post-docs

Investigador principal de proyectos del Plan Nacional desde 1997 ininterrumpidamente (8 proyectos nacionales y 4 proyectos autonómicos). Miembro de redes de Excelencia en Catálisis Asimétrica y Glicobiología. Responsable del Grupo consolidado de investigación del Gobierno de Aragón "Química Biológica y Computacional" desde su creación en 2002.

Director del Departamento de Síntesis y Estructura de Biomoléculas del ISQCH (2011-2015)

Líneas de Investigación: Química Biológica (Glicobiología); Química Computacional; Síntesis y Catálisis Asimétrica.

Desde 1992 nos hemos centrado en el desarrollo de metodologías sintéticas de compuestos nitrogenados enantiopuros de interés biológico y farmacológico. En este campo nuestro grupo ha sido pionero en el desarrollo de adiciones nucleófilas organometálicas estereocontroladas a nitronas organometálicas. Nuestros compuestos objetivo han sido, principalmente análogos de nucleósidos y carbohidratos. Estas temáticas han sido abordadas desde un punto de vista multidisciplinar incluyendo estudios biológicos, estructurales y computacionales. Más adelante, incorporamos a nuestras líneas la organocatálisis asimétrica como una herramienta para preparar los compuestos objetivo. En los últimos cinco años, hemos iniciado dos líneas prioritarias dedicadas al diseño racional de glicomiméticos dirigidos hacia el estudio mecanístico e inhibición de determinadas glicosiltransferasas y al estudio computacional de reacciones orgánicas utilizando herramientas topológicas con aplicación en procesos biológicos. La primera línea, altamente multidisciplinar y que implica varias colaboraciones, se orienta a la Química Biológica y comprende desde la síntesis de ligandos enzimáticos hasta estudios biológicos, estructurales y computacionales de los procesos implicados en la interacción con enzimas (glicosiltransferasas). El objetivo final es el desarrollo de inhibidores selectivos de glicosiltransferasas clave en procesos patológicos y la elucidación de sus mecanismos de acción. La segunda línea se centra en el empleo de estudios DFT QM y topológicos para el estudio de reacciones catalíticas asimétricas que permitan un diseño más racional de organocatalizadores y ligandos quirales de metales de transición. En estos momentos hemos iniciado una línea transversal agrupando ambas con el objetivo general de estudiar computacionalmente (QM/MM y MD simulations) reacciones enzimáticas y comparar el efecto que ejerce el enzima sobre la reacción orgánica en el seno de un disolvente.

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

### **C.1. Publicaciones (10 publicaciones más relevantes)**

1. Synergistic Catalysis: Highly Enantioselective Cascade reaction for the synthesis of dihydroacridines. Meninno, S.; Lattanzi, A.; Meazza, M.; Merino, P.; Rios, R. *Chem. Eur. J.* **2019**, *25*, 7623-7627.
2. Catalytic Enantioselective Cloke-Wilson Rearrangement. Alesandere O.; Manzano, R.; Uria, U.; Carrillo, L.; Reyes, E.; Tejero, T.; Merino, P.; Vicario, J. L. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 8225-8229.
3. UDP-GlcNAc Analogs as Inhibitors of O-GlcNAc Transferase (OGT): Spectroscopic, Computational and Biological Studies. Ghirardello, M.; Perrone, D.; Chinaglia, N.; Sádaba, D.; Delso, I.; Tejero, T.; Marchesi, E.; Fogagnolo, M.; Rafie, K.; Aalten, D. M. F. v.; Merino, P. *Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 7264-7272.



4. Carboxylates as Nucleophiles in the Catalytic Enantioselective Ring-Opening of Formylcyclopropanes under Iminium Ion Activation. Díaz, E.; Reyes, E.; Uria, U.; Carrillo, L.; Tejero, T.; Merino, P.; Vicario, J. L.  
*Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 8764-8768.
5. Racemic Hemiacetals as Oxygen-Centered Pronucleophiles Triggering Cascade 1,4-Addition/Michael Reaction through Dynamic Kinetic Resolution under Iminium catalysis. Reaction Development and Mechanistic Insights. Orue, A., Uria, U., Roca-López, D., Delso, I., Reyes, E., Carrillo, L., Merino, P., Vicario, J. L.  
*Chem. Sci.* **2017**, *8*, 2904-2913.
6. Regioselectivity Change in the Organocatalytic Enantioselective (3+2) Cycloaddition with Nitrones Through Cooperative H-Bonding Catalysis/Iminium Activation. Prieto, L., Juste-Navarro, V., Uria, U., Delso, I., Reyes, E., Tejero, T., Carrillo, L., Merino, P., Vicario, J. L.  
*Chem. Eur. J.*, **2017**, *23*, 2764-2768
7. Glycomimetics Targeting Glycosyltransferases: Synthetic, Computational and Structural Studies of Less-polar Conjugates. Ghirardello, M.; Rivas, M. d. I.; Lacetera, A.; Delso, I.; Lira-Navarrete, E.; Tejero, T.; Martín-Santamaría, S.; Hurtado-Guerrero, R.; Merino, P.  
*Chem. Eur. J.*, **2016**, *22*, 7215-7224
8. Computational Mechanistic Study of Thionation of Carbonyl Compounds with Lawesson's Reagent Legnani; Toma, L.; Caramella, P.; Chiacchio, M. A.; Giofrè, S.; Delso, I.; Tejero, T.; Merino, P.  
*J. Org. Chem.* **2016**, *82*, 7733-7740.
9. Mechanistic Insights in the Mode of Action of Bifunctional Pyrrolidine-Squaramide-derived Organocatalysts. Roca-López, D.; Uria, U.; Reyes, E.; Carrillo, L.; Jørgensen, K. A.; Vicario, J. L.; Merino, P.  
*Chem. Eur. J.*, **2016**, *22*, 884-889.
10. Natural Ternary Complex Trapped in Crystal Reveals the Catalytic Mechanism of a Retaining Glycosyltransferase. Albesa-Jové, D.; Mendoza, M. F.; Rodrigo-Unzueta, A.; Gomollón-Bel, F.; Cifuentes, J.; Urresti, S.; Comino, N.; Gómez, H.; Romero-García, J.; Lluch, J. M.; Sancho-Vaello, E.; Biarnés, X.; Planas, A.; Merino, P.; Masgrau, L.; Guerin, M. E. A  
*Angew. Chem. Int. Ed.*, **2015**, *54*, 9898-9902.

## C.2. Proyectos (desde 2009)

- Título: Diseño racional de glicomiméticos inhibidores de glicosiltransferasas  
Entidad financiadora: MINECO. CTQ2016-76156-R  
Entidades participantes: Universidad de Zaragoza (2017-2019)  
Investigador responsable: Pedro Merino Filella
- Título: Diseño racional y síntesis estereoselectiva de glicomiméticos  
Entidad financiadora: MINECO. CTQ2013-44367-C2-1-P  
Entidades participantes: Universidad de Zaragoza (2014-2017)  
Investigador responsable: Pedro Merino Filella
- Título: Nuevas metodologías para la síntesis asimétrica de heterociclos nitrogenados enantiopuros con aplicación en la preparación de sistemas de interés biológico  
Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación. CTQ2010-19606  
Entidades participantes: Universidad de Zaragoza (2010-2013)  
Investigador responsable: Pedro Merino Filella
- Título: Desarrollo de nuevas metodologías para la síntesis enantioselectiva de compuestos nitrogenados saturados  
Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia. CTQ2007-67532-C02-01  
Entidades participantes: Universidad de Zaragoza (2007-2010)  
Investigador responsable: Pedro Merino Filella



- Título: Derivados de carbohidratos para la mejora de la producción hortofrutícola  
Entidad financiadora: MICINN. Proyectos TRACE. PET2008\_0022  
Entidades participantes: Universidad de Zaragoza - MAGRISA (2009-2010)  
Investigador responsable: Pedro Merino Filella

### **C.3. Contratos, méritos tecnológicos o de transferencia (desde 2009)**

#### Como Investigador responsable:

- Título: Estudio de la oxidación en medio acuoso de pasta de papel  
Entidad financiadora: Gobierno de Aragón. Proyecto multidisciplinar PI006/08  
Entidades participantes: Universidad de Zaragoza - SAICA (2009-2010)  
Investigador responsable: Pedro Merino Filella
- Título del contrato/proyecto: Desarrollo de métodos de oxidación en medios acuosos  
Tipo de contrato: Contrato de investigación  
Empresa/Administración financiadora: SAICA  
Entidades participantes: Universidad de Zaragoza – OTRI (2008-2009)  
Investigador responsable: Pedro Merino Filella

#### Como colaborador y miembro del equipo

- Título del proyecto: Desarrollo y escalado de formulaciones para el incremento de la calidad hortofrutícola  
Entidad financiadora: Gobierno de Aragón. PI168/09  
Entidades participantes: Universidad de Zaragoza - CSIC -MAGRISA (2010-2011)  
Investigador responsable: Tomás Tejero López

### **C.6. Conferencias invitadas (desde 2009)**

Mas de 60 conferencias invitadas y plenarias en Congresos e Instituciones nacionales e internacionales incluyendo: Regional ACS Meeting; DOMINOCAT, European Colloquium on Heterocyclic Chemistry, Spanish-italian Symposium on Organic Chemistry; Reunion Biental RSEQ (y grupos especializados de Química Organica y Química Biológica). Congreso Hispano-Luso-Japones.

Mas de 100 ponencias en congresos (posters y comunicaciones orales de estudiantes y supervisados y colaboradores)

### **C.7. Libros**

23 contribuciones en capítulos de libros y enciclopedias

Como Editor: *Chemical Synthesis of Nucleoside Analogues*. Ed.: P. Merino. John Wiley and sons: Hoboken, 2013. ISBN: 978-1-1180-0751-8

Como Autor: *Chemical Biology of Neurodegeneration*. P. Merino. Wiley-VCH: Weinheim, 2019. ISBN: 978-3-527-34424-6

### **C.7. Internacionalización. Participación en Comités**

- Chairman panel CHEM Acciones Marie Curie - ITN (FP7 y H2020). Bruselas: desde 2010 a 2015 (ITN). Vice-Chair CHEM Panel de MSC Actions (ITN & IF) desde 2016.
- Chairman panel QUI Proyectos Nacionales Portugal 2017.
- Coordinador del Área de Química de la Agencia de Calidad Universitaria de Andalucía desde 2016.
- Evaluador de diversas agencias nacionales (Madri+D, ACSUG, ACSUCyL, Plan Nacional, infraestructuras, etc.) e internacionales (Francia, USA, Belgica, Italia, etc.)