

Fecha del CVA

28/07/2021

## Parte A. DATOS PERSONALES

|                          |                                             |                       |  |
|--------------------------|---------------------------------------------|-----------------------|--|
| Nombre *                 | Iratxe                                      |                       |  |
| Apellidos *              | Barbolla Cuadrado                           |                       |  |
| Sexo *                   |                                             | Fecha de Nacimiento * |  |
| DNI/NIE/Pasaporte *      |                                             | Teléfono              |  |
| URL Web                  |                                             |                       |  |
| Dirección Email *        |                                             |                       |  |
| Identificador científico | Open Researcher and Contributor ID (ORCID)* | 0000-0002-4124-7697   |  |
|                          | Researcher ID                               |                       |  |
|                          | Scopus Author ID                            |                       |  |

\* Obligatorio

### A.1. Situación profesional actual

|                         |                                                                                   |          |  |
|-------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------|----------|--|
| Puesto                  | Personal Investigador Contratado                                                  |          |  |
| Fecha inicio            | 2020                                                                              |          |  |
| Organismo / Institución | Fundación Biofísica Bizkaia                                                       |          |  |
| Departamento / Centro   |                                                                                   |          |  |
| País                    |                                                                                   | Teléfono |  |
| Palabras clave          | Química orgánica sintética; Relación estructura-actividad; Mecanismos de reacción |          |  |

### A.2. Situación profesional anterior

| Periodo     | Puesto / Institución / País                                   |
|-------------|---------------------------------------------------------------|
| 2016 - 2020 | Investigador Predoctoral / Universidad del País Vasco         |
| 2017 - 2017 | Investigador Predoctoral / University of Illinois at Chicago  |
| 2015 - 2015 | Personal Investigador Contratado / Universidad del País Vasco |
| 2013 - 2013 | Colaboración en Laboratorio de Investigación / Gobierno Vasco |

### A.3. Formación académica

| Grado/Master/Tesis                                              | Universidad / País         | Año  |
|-----------------------------------------------------------------|----------------------------|------|
| Programa Oficial de Doctorado en Química Sintética e Industrial | Universidad del País Vasco | 2020 |
| Máster en Química Sintética e Industrial                        | Universidad del País Vasco | 2014 |
| Licenciatura en Química                                         | Universidad del País Vasco | 2013 |

## Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

Obtuve la Licenciatura en Química (2013, nota: 8.29) y el Máster en Química Sintética e Industrial (2014, nota: 8.61) en la Universidad del País Vasco (UPV/EHU). Más recientemente, he obtenido el grado de Doctor (Programa de Doctorado de Química Sintética e Industrial, enmarcado dentro del área de la Química Orgánica) por la Universidad del País Vasco (2020) en el grupo de investigación de las Prof. Esther Lete y Nuria Sotomayor, el cual ha sido financiado por un contrato de investigación de la UPV/EHU y una ayuda predoctoral del Gobierno Vasco. El trabajo de investigación de la Tesis Doctoral se ha centrado en el desarrollo de nuevas metodologías sintéticas basadas en el uso de reacciones de tipo Heck catalizadas por paladio para la síntesis eficiente de compuestos heterocíclicos con propiedades de interés. Por otra parte, he trabajado en la preparación de nuevos ligandos quirales híbridos guanidina/amina y en la evaluación de su capacidad para promover enantioselectividad en reacciones de adición conjugada y Henry. Además, en 2017, tuve la oportunidad de realizar una estancia predoctoral (financiada por una ayuda de movilidad del Gobierno Vasco) en el grupo de investigación de la Prof. Laura L. Anderson en la Universidad de Illinois en Chicago (EEUU),

donde estudié la síntesis y reactividad de N-alquénilnitronas en la reacción de Diels-Alder con demanda electrónica inversa. Actualmente, estoy contratada como investigadora por la Fundación Biofisika Bizkaia, donde trabajo en la síntesis de análogos de Riluzol. Además, durante esta etapa, he co-dirigido un Proyecto Fin de Grado.

Gran parte de mi trabajo de investigación ha sido publicado, siendo co-autora de 6 publicaciones científicas, alguna de ellas en revistas de alto índice de impacto, como Eur. J. Med. Chem. 2021, 21, 113458-113471, J. Org. Chem. 2019, 84, 10183-10196 and Eur. J. Org. Chem. 2016, 2054-2063. Además, he escrito un review (ARKIVOC, por invitación del Editor) y un capítulo de libro (Targets Heterocycl. Syst.).

He asistido a varios congresos nacionales e internacionales (5th Lilly Chemistry Symposium, 11th Spanish-Italian Symposium on Organic Chemistry, Chicago Organic Symposium, etc.), y contribuido activamente a ellos con comunicaciones tanto orales (3) como póster (6). Además, he sido miembro del comité científico del congreso online MOL2NET 2020, International Conference on Multidisciplinary Sciences.

He participado como investigadora en 4 proyectos financiados en convocatorias competitivas, lo que me ha proporcionado la capacidad para llevar a cabo una correcta planificación y aportar distintas alternativas sintéticas a la hora de abordar un problema sintético. Además, mi experiencia investigadora me ha permitido manejar diferentes técnicas de trabajo en laboratorio de Química Orgánica (reacciones en atmósfera inerte, purificación de compuestos químicos, caracterización de nuevos productos...), así como adquirir un gran dominio de técnicas de análisis (Resonancia Magnética Nuclear, Espectroscopía Infrarroja, Espectrometría de Masas, Polarimetría) y cromatográficas (UPLC, HPLC, GC). Además, a lo largo de mi formación, he demostrado ser capaz de integrarme fácilmente en diferentes grupos de investigación dada mi facilidad para trabajar en equipo y mi disposición continua a aprender, lo cual queda demostrado a través de mi participación en diversos cursos de formación (Prevención de Riesgos, Gestión de Residuos, etc.).

## Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES

### C.1. Publicaciones

AC: Autor de correspondencia; (nº x / nº y): posición firma solicitante / total autores. Si aplica, indique el número de citaciones

- 1 Artículo científico.** Iratxe Barbolla; Leidi Hernández-Suárez; Viviana Quevedo-Tumaili; et al;. (1/9). 2021. Palladium-mediated Synthesis and Biological Evaluation of C-10b Substituted Dihydropyrrolo[1,2-b]isoquinolines as Antileishmanial Agents Eur. J. Med. Chem.220, pp.113458-113471.
- 2 Artículo científico.** Deyani Nocedo-Mena; Sonia Arrasate; Elvira Garza-González; et al; Iratxe;. (9/11). 2021. Molecular Docking, SAR Analysis and Biophysical Approaches in the Study of the Antibacterial Activity of Ceramides Isolated from *Cissus incisa* Bioorg. Chem.109, pp.104745-104757.
- 3 Artículo científico.** A. Acera; X. Pereiro; B. Abad-García; et al; ;. (7/10). 2019. A Simple and Reproducible Method for Quantification of Human Tear Lipids with Ultrahigh-Performance Liquid Chromatography-Mass Spectrometry.Mol. Vis.25, pp.934-948.
- 4 Artículo científico.** E. Vecino; A. Acera; X. Pereiro; et al; ;. (8/10). 2019. A comparison of two methods to analyse and quantify human tear lipids by ultra-high performance liquid chromatography-mass spectrometry (UHPLC\_MS) Invest. Ophthalmol. Vis. Sci.60-9.
- 5 Artículo científico.** Iratxe Barbolla; Nuria Sotomayor; Esther Lete. (1/3). 2019. Carbopalladation/Suzuki Coupling Cascade for the Generation of Quaternary Centers: Access to Pyrrolo[1,2-b]isoquinolines.J. Org. Chem.84, pp.10183-10196.

- 6 **Artículo científico.** Ane Rebolledo-Azcsrgorta; Estíbaliz Coya; Iratxe Barbolla; Esther Lete; Nuria Sotomayor. (3/5). 2016. Generation of Tertiary and Quaternary Stereocentres through Palladium-Catalysed Intramolecular Heck-Type Reactions for the Stereocontrolled Synthesis of Pyrrolo[1,2-b]isoquinolines Eur. J. Org. Chem.Wiley-VCH. pp.2054-2063.
- 7 **Capítulo de libro.** Iratxe Barbolla; Esther Lete; Nuria Sotomayor. (1/3). 2020. Intramolecular Mizoroki-Heck Reaction in the Synthesis of Heterocycles. Strategies for the Generation of Tertiary and Quaternary Stereocenters.Targets Heterocycl. Syst.pp.340-362.
- 8 **Revisión bibliográfica.** Iratxe Barbolla; Nuria Sotomayor; Esther Lete. (1/3). 2020. Transition Metal-Guanidine Complexes as Catalysts in Organic Reactions. Recent Developments ARKIVOC. pp.158-179.

## C.2. Congresos

- 1 Iratxe Barbolla; Leidi Hernández-Suárez; Viviana Quevedo-Tumaili; Deyani Nocedo-Mena; Sonia Arrasate; María Auxiliadora Dea-Ayuela; Nuria Sotomayor; Esther Lete. Synthesis of Pyrrolo[1,2-b]isoquinolines through Carbopalladation Initiated Domino Reactions. Evaluation as New Antileishmanial Agents. MOL2NET 2020, International Conference on Multidisciplinary Sciences. 2020.
- 2 Iratxe Barbolla; Nuria Sotomayor; Esther Lete. Carbopalladation Initiated Cascade Reactions in the Synthesis of Pyrrolo[1,2-b]isoquinolines.. XVIII International Conference on Heterocycles in Bioorganic Chemistry (Bioheterocycles 2019). Ghent University. 2019. Bélgica.
- 3 Iratxe Barbolla; Nuria Sotomayor; Esther Lete. Carbopalladation/Suzuki Coupling Cascade: Ready Access to Pyrrolo[1,2-b]isoquinolines.. XXXVII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ). Real Sociedad Española de Química (RSEQ). 2019. España.
- 4 Iratxe Barbolla; Ane Rebolledo Azcargorta; Estíbaliz Coya; Esther Lete; Nuria Sotomayor. Heteroaryl-Lithium and Palladium Intermediates in the Construction of Fused Heterocyclic Frameworks.. XXVI Reunión Bienal de Química Orgánica de la Real Sociedad Española de Química. Real Sociedad Española de Química - Grupo Especializado de Química Orgánica (GEQOR). 2018. España.
- 5 Iratxe Barbolla; Ane Rebolledo Azcargorta; Nuria Sotomayor; Esther Lete. Heterocycle Formation through Intramolecular Pd-catalyzed Alkenyl-Aryl and Aryl-Aryl Cross-Coupling Reactions.. VI Jornadas de Investigación de la Facultad de Ciencia y Tecnología de la UPV/EHU. Universidad del País Vasco (UPV/EHU). 2018. España.
- 6 Iratxe Barbolla; Asier Carral Menoyo; Carlos Santiago; Mikel Martínez Nunes; Harbil Bediaga; Marcos Gómez Redondo; Patricia Gutiérrez; Lucía Moya; Sonia Arrasate; Humberto González Díaz; Nuria Sotomayor; Esther Lete. Organometallics in Synthesis. VI Jornadas de Investigación de la Facultad de Ciencia y Tecnología de la UPV/EHU. Universidad del País Vasco (UPV/EHU). 2018. España.
- 7 Iratxe Barbolla; Ane Rebolledo Azcargorta; Estíbaliz Coya; Nuria Sotomayor; Esther Lete. Generation of Tertiary and Quaternary Stereocenters Via Palladium Catalyzed Intramolecular Heck Reactions. Access to Pyrroloisoquinoline Core.. XXXVI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ). Real Sociedad Española de Química (RSEQ). 2017. España.
- 8 Esther Lete; Iratxe Barbolla; Nuria Sotomayor; Ane Rebolledo Azcargorta; Estíbaliz Coya. Synthesis of Pyrrolo[1,2-b]isoquinolines through Stereocontrolled Mizoroki-Heck Reactions.. XXVI Reunión Bienal de Química Orgánica de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ). Real Sociedad Española de Química - Grupo Especializado de Química Orgánica (GEQOR). 2016. España.
- 9 Eider Aranzamendi; Ane Rebolledo Azcargorta; Iratxe Barbolla; Asier Carral; Ana Linares; Jon Bilbao; Carlos Santiago; Lorena Simón; Sonia Arrasate; Humberto González Díaz; Nuria Sotomayor; Esther Lete. Organometálicos en Síntesis. V Jornadas de Investigación de la Facultad de Ciencia y Tecnología de la UPV/EHU. University of the Basque Country (UPV/EHU). 2016. España.

- 10 Ane Rebolledo Azcargorta; Iratxe Barbolla; Estíbaliz Coya; Nuria Sotomayor; Esther Lete. Asymmetric Mizoroki-Heck Reactions: Generation of Quaternary Stereocenters and Cascade Cyclizations.. MOL2NET, International Conference on Multidisciplinary Sciences. 2015.
- 11 Iratxe Barbolla; Estíbaliz Coya; Nuria Sotomayor; Esther Lete. Mizoroki-Heck and Direct Arylation Reactions in the Construction of Medium-Size Ring Systems.. XXXV Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ). Real Sociedad Española de Química (RSEQ). 2015. España.
- 12 Esther Lete; Estíbaliz Coya; Iratxe Barbolla; Nuria Sotomayor. Catalytic Enantioselective Palladium-Catalyzed Cascade Reaction. Access to Lycorane Core.. 18th IUPAC International Symposium on Organometallic Chemistry Directed Towards Organic Synthesis (OMCOS 18). Institut Català d'Investigació Química (ICIQ). 2015. España.
- 13 Iratxe Barbolla; Estíbaliz Coya; Nuria Sotomayor; Esther Lete. Synthesis of Isoindoles, Isoquinolines and Benzazepines through Heck and C-H Activation Reactions.. II Simposio de Jóvenes Investigadores de la Sociedad Española de Química Terapéutica (SEQT). Instituto de Química Médica del CSIC/Sociedad Española de Química Terapéutica (SEQT). 2015. España.
- 14 Ane Rebolledo Azcargorta; Iratxe Barbolla; Estíbaliz Coya; Esther Lete; Nuria Sotomayor. Palladium-Catalyzed Cross-Coupling Reactions in the Asymmetric Synthesis of Pyrrolo[1,2-b]isoquinolines.. XVI International Conference on Heterocycles in Bioorganic Chemistry (Bioheterocycles 2015). 2015. Francia.
- 15 Asier Gómez San Juan; Estíbaliz Coya; Eider Aranzamendi; Iñaki Martín Abalde; Verónica Ortiz de Elguea; Ane Rebolledo Azcargorta; Iratxe Barbolla; Iñigo Revuelta; Asier Carral; Sonia Arrasate; Humberto González Díaz; Nuria Sotomayor; Esther Lete. Organometálicos en Síntesis. IV Jornadas de Investigación de la Facultad de Ciencia y Tecnología de la UPV/EHU. Universidad del País Vasco (UPV/EHU). 2014. España.

### C.3. Proyectos y Contratos

- 1 **Proyecto**. Nuevas Herramientas Sintéticas y Quimioinformáticas para la Construcción y Diversificación de Heterociclos Drug-like. Activación C-H y Machine Learning. Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2019-104148GB-I00). Esther Lete. 2020-2023. 96.800.
- 2 **Proyecto**. Ayudas Grupos de Investigación Consolidados del Sistema Universitario Vasco. Gobierno Vasco (IT1045-16). Esther Lete. 2016-2021. 209.589.
- 3 **Proyecto**. Reacciones de Activación C-H Catalizadas por Metales de Transición en Síntesis y Funcionalización de Sistemas Heterocíclicos. Aplicaciones Sintéticas y Modelos Computacionales. MINECO (CTQ2016-74881-P). Esther Lete. 2016-2020. 89.540.
- 4 **Proyecto**. Catálisis Asimétrica en Síntesis. Nuevos Ligandos Quirales para Catalizadores basados en Metales de Transición. Aplicaciones Sintéticas y Modelos Computacionales. MINECO (CTQ2013-41229-P). Esther Lete. 2014-2016. 94.380.
- 5 **Contrato**.

### C.4. Actividades de transferencia y explotación de resultados