

| | | | |
|----------------------------------|------------------------|----------------------|------------|
| Parte A. DATOS PERSONALES | | Fecha del CVA | 20/04/2022 |
| Nombre y apellidos | Luis CUADROS RODRÍGUEZ | | |
| Identificadores del investigador | Código ORCID | 0000-0003-0162-7211 | |
| | Researcher ID | | |
| | Scopus ID | 55961518900 | |

A.1. Situación profesional actual

| | | | |
|-----------------------|--|--------------------|-----------------|
| Organismo | Universidad De Granada | | |
| Dpto./Centro | Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias | | |
| Dirección | c/ Fuentenueva s.n. | | |
| Teléfono | 958 244077 | correo electrónico | lcuadros@ugr.es |
| Categoría profesional | Catedrático de Universidad | Fecha inicio | 07/07/2010 |
| Espec. cód. UNESCO | 2031 | | |
| Palabras clave | Química analítica. Ciencia y tecnología de los alimentos. Quimiometría y minería de datos. Cualimetría y metrología química | | |

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

| Licenciatura/Grado/Doctorado | Universidad | Año |
|----------------------------------|---------------------|------|
| Lic. Ciencias (Químicas) | Universidad Granada | 1978 |
| Dr. Ciencias (Química Analítica) | Universidad Granada | 1995 |

A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica

| | | |
|--|---|-------|
| Número de publicaciones en revistas, indexadas JCR (total / últimos 10 años) | 139 / 59 | |
| Número de publicaciones en congresos (total / últimos 10 años) | 209 / 82 | |
| Número de proyectos de I+D (total / últimos 10 años) | 28 / 14 | |
| Número de contratos de I+D / Transferencia (total / últimos 10 años) | 29 / 18 | |
| Número de tesis dirigidas | Defendidas (total / últimos 10 años) | 6 / 4 |
| | En realización | 4 |
| Número (totales) de tramos de investigación / transferencia | 5 / 1 | |
| Índice H (total / últ 10 años) | 32 / 22 (WoS); 29 / 18 (Scopus); 38 / 25 (Google Scholar) | |

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM (máx 3500 caracteres, espacios incluidos)

Inició su carrera como profesor de Física y Química (Catedrático de Bachillerato). Se incorpora al Departamento de Química Analítica (UGR) en 1990 y defiende la tesis doctoral en 1995. Profesor Titular de Universidad en 1998 y Catedrático de Universidad en 2010.

Desde los inicios, investiga en desarrollo de aplicaciones de la Estadística en aspectos como el ajuste de funciones de calibrado, estimación de parámetros de calidad, herramientas para la comparación de resultados, diseño de experimentos, etc.

En el periodo 1995-2005, desarrolla una línea sobre CUALIMETRÍA Y METROLOGÍA QUÍMICA, y se centra en el desarrollo de protocolos de validación de procesos analíticos, caracterización de efectos sistemáticos debidos a la matriz y la estimación de la incertidumbre asociada al resultado de los análisis, relacionados con métodos analíticos basados en cromatografía de gases y cromatografía líquida de altas prestaciones. Las aplicaciones son variadas, destacando aquellas en alimentos, medioambiente y clínica.

Desde 2005, se centra en la CALIDAD Y AUTENTICIDAD ALIMENTARIA, en el desarrollo de métodos analíticos para control de la autenticidad del aceite de oliva. Aplica una metodología basada en conjugar la obtención de "huellas instrumentales" cromatográficas, con la quimiometría para el tratamiento de datos mediante técnicas de reconocimiento de pautas y de calibración. Como consecuencia, cada vez se ha ido especializando más en el uso de técnicas y métodos analíticos basados en datos multivariantes.

Más recientemente ha iniciado una línea enfocada hacia el tratamiento de datos para detectar modificaciones estructurales en medicamentos proteicos de origen biotecnológico.

En relación con el mundo extrauniversitario, lidera un equipo de trabajo que, bajo la denominación de UNIDAD DE CUALIMETRÍA Y METROLOGÍA QUÍMICA (CMQ), colabora

y asesora sobre diferentes aspectos relacionados con la calidad de los resultados analíticos con diferentes profesionales de los laboratorios químicos. Es de destacar la coordinación de las 7 campañas InterOLEO y SensOLEO para la certificación de materiales de referencia de aceite de oliva tanto para análisis físico-químicos como sensoriales. Dichas campañas, que han sido financiadas por Consejería de Agricultura y Pesca (Junta de Andalucía), suponen los primeros materiales de referencia que se elaboran para su uso en los laboratorios de control de la calidad del aceite de oliva. Recientemente ha participado en la creación de 2 grupos operativos de la 'Asociación Europea de Innovación para la Productividad Agrícola y la Sostenibilidad (EIP-AGRI)', que han sido financiado por la Junta de Andalucía (INTERPANEL), y por el Ministerio de Agricultura, Pesca y Alimentación (SENSOLIVE_OIL). Por último, cabe destacar la participación en la actualidad como investigador en la acción COST de la Unión Europea (programa H2020) denominada "European Network for assuring food integrity using non-destructive spectral sensors" (SensorFINT), referencia CA19145.

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (últimos 10 años)

C.1. Publicaciones (entre 5-10)

1. A. Arroyo Cerezo, A.M. Jimenez Carvelo, A. González Casado, A Koidis, L. Cuadros Rodríguez (2021) *Deep (offset) non-invasive Raman spectroscopy for the evaluation of food and beverages – A review*. LWT - Food Sci. Technol. 149, N° 111822, 1-8. IF: 4,952 (2020), Área: CyT Alimentos (29/143) Q1.
2. L. Cuadros Rodríguez, S. Martín Torres, F. Ortega Gavilán, A.M. Jimenez Carvelo, M.G. Bagur González, A. González Casado (2021) *Standardization of chromatographic signals – Part I: Towards obtaining instrument-agnostic fingerprints in gas chromatography*, J. Chromatogr. A 1641, N° 461983, 1-11. IF: 4,759 (2020)), Área: Química Analítica (17/83) Q1.
3. L. Cuadros Rodríguez, S. Martín Torres, F. Ortega Gavilán, A.M. Jimenez Carvelo, M.G. Bagur González, A. González Casado (2021) *Standardization of chromatographic signals – Part II: Expanding instrument-agnostic fingerprints to reverse phase liquid chromatography*, J. Chromatogr. A 1641, N° 461973, 1-14. IF: 4,759 (2020), Área: Química Analítica (17/83) Q1.
4. F. Stilo, C. Bicchi, A.M. Jimenez Carvelo, L. Cuadros-Rodriguez, S.E Reichenbach, C. Cordero (2021) *Chromatographic fingerprinting by comprehensive two-dimensional chromatography: fundamentals and tools*, Trends Anal. Chem. 134, N° 116133, 1-20. IF: 12,296 (2020), Área: Química Analítica (01/83) D1
5. L. Cuadros Rodríguez, A.M. Jiménez Carvelo, M.D. Fernández Ramos (2021) *Multivariate thinking for optical microfluidic analytical devices – A tutorial review*, Microchem. J. 164, N° 105959, 1-9. IF: 4.821 (2020), Área: Química Analítica (16/83) Q1.
6. L. Cuadros Rodríguez, A.M. Jiménez Carvelo (2021) *Data mining/machine learning methods in foodomics*, Curr. Opin. Food Sci. 37, 76-82. IF: 6,031 (2020), Área: CyT Alimentos (13/143) D1.
7. L. Cuadros Rodríguez, L. Valverde Som, A.M. Jiménez Carvelo, M. Delgado Aguilar (2019) *Validation requirements of screening analytical methods based on scenario-specified applicability indicators*, Trends Anal. Chem., 122, N° 115705, 1-10. IF: 9,801 (2019), Área: Química Analítica (02/86) D1.
8. A.M. Jiménez Carvelo, A. González Casado, M.G. Bagur, L. Cuadros Rodríguez (2019) *Alternative data mining/machine learning methods for the analytical evaluation of food quality and authenticity – A review*, Food Res. Int. 122, 25-39. IF: 4,972 (2019), Área: CyT Alimentos (11/139) D1.
9. L. Cuadros Rodríguez, E. Pérez Castaño, C. Ruíz Samblás (2016) *Quality performance metrics in multivariate classification methods for qualitative analysis*, Trends Anal. Chem., 80, 612-624 (2016). IF: 8,442 (2016), Área: Química Analítica (01/76) D1.
10. L. Cuadros Rodríguez, A. González Casado, L. Valverde Som, E. Pérez Castaño, C. Ruíz Samblás (2016) *Chromatographic fingerprinting: an innovative approach for food*

'identification' and food authentication – A tutorial. Anal. Chim. Acta, 909, 09-23. IF: 5,977 (2019), Área: Química Analítica (10/86) Q1.

C.2. Participación/dirección de proyectos de I+D (máximo 5)

1. PAIDI-P20_00607. *Estrategia para la elaboración de una base de datos universal de huellas instrumentales cromatográficas de aceite de oliva a partir de señales estandarizadas de cromatografía de gases (OliVERSAL-GC)*. IP: L. Cuadros Rodríguez, Ayudas a la I+D+i en el ámbito del Plan Andaluz de Investigación, Desarrollo e Innovación (PAIDI 2020), 01/07/21 – 31/12/22. 87.623,00 €.
2. CA19145, *European Network for assuring food integrity using non-destructive spectral sensors (SensorFINT)*. IP: Dolores Pérez Marín (Universidad de Córdoba). COST Acción, EU Framework Programme Horizon 2020, 30/09/20 – 29/09/24. 600.000 €.
3. Nº 2019002000757. *Análisis instrumental complemento al panel test en el aceite de oliva español – SENSOLIVE OIL*, IP: L. Cuadros Rodríguez, Ayudas para la ejecución de proyectos de innovación de interés general por grupos operativos de la Asociación Europea para la Innovación en materia de productividad y sostenibilidad agrícolas (AEI-Agri), Programa Nacional de Desarrollo Rural 2014-2020, 16/07/19 – 15/07/21. 40.520,53 €.
4. RTC-2017-6170-2. *Avances analíticos para la mejora de la información sobre calidad y seguridad de aceites vegetales comestibles y otros productos alimenticios vegetales de alto contenido graso (CASEITE)*. IP: L. Cuadros Rodríguez. Proyectos RETOS-COLABORACIÓN 2017, Plan Estatal de Investigación Científica y Técnica y de Innovación 2013-2016. 01/10/2018 – 30/09/2021. 91.582,00 €.
5. GOP3I-JA-16-0012. *Sistema de referencia y armonización de paneles de cata de Aceite de Oliva Virgen de Andalucía (INTERPANEL)*. IP: L. Cuadros Rodríguez. Ayudas al funcionamiento de grupos operativos de la Asociación Europea de Innovación (AEI) en materia de productividad y sostenibilidad agrícolas para la realización de proyectos piloto y el desarrollo de nuevos productos, procesos y tecnologías en los sectores agrícola, alimentario y forestal, Programa de Desarrollo Rural de Andalucía 2014-2020. Consejería de Agricultura, Pesca, Alimentación y Desarrollo Sostenible, Junta de Andalucía. 01/01/2018 – 31/12/2019. 70.000,00 €.

C.3. Participación/dirección de contratos de I+D y/o transferencia (máximo 5)

1. OTRI 3898-2017. *Elaboración, certificación y distribución de nueve materiales de referencia certificados (MRC) para análisis organoléptico de aceite de oliva (SensOLEO-MRC 2017)*. IP: L. Cuadros Rodríguez. Consejería de Agricultura, Pesca y Desarrollo Rural (CAPDR), Junta de Andalucía. 16/11/2017 – 01/04/2018. 49.186,50 €.
2. OTRI 3881-2017. *Asesoramiento técnico entre la Organización Interprofesional del Aceite de Oliva Español y el profesor de la Universidad de Granada D. Luis Cuadros Rodríguez para la creación del Grupo Operativo Supra-autonómico SENSOLIVE-OIL*. IP: L. Cuadros Rodríguez. Organización Interprofesional del Aceite de Oliva Español / Ministerio de Agricultura y Pesca, Alimentación y Medioambiente. 09/03/2017 – 08/10/2017. 16.940,00 €.
3. OTRI 3755-2016. *Certificación y distribución de cinco materiales de referencia certificados (MRC) para análisis físico-químicos de aceite de oliva (InterOLEO-MRC 2016)*. IP: L. Cuadros Rodríguez. Consejería de Agricultura, Pesca y Desarrollo Rural (CAPDR), Junta de Andalucía. 07/09/2016 – 22/01/2017. 66.550 €.
4. OTRI 3637-2015. *Certificación y distribución de nueve materiales de referencia certificados (MRC) para análisis organoléptico de aceite de oliva (SensOLEO-MRC 2015)*. IP: L. Cuadros Rodríguez. Consejería de Agricultura, Pesca y Medio Ambiente, Junta de Andalucía. 02/09/2015 – 17/01/2016. 29.040,00 €.
5. OTRI 3503-2014. *Desarrollo de aplicaciones analíticas de la plataforma UHPLC-(Orbitrap)MS en los ámbitos de la metabolómica y los biofármacos*. IP: L. Cuadros Rodríguez. Thermo Fisher Scientific. 01/10/2014 – 31/12/2016. 50.573 €.

C.5. Participación en congresos – conferencias (máximo 5)

1. XIX Symposium Científico-Técnico. Foro de la Industria Oleícola, Tecnología y Calidad. XVIII Feria Internacional del Aceite de Oliva e Industrias Afines (EXPOLIVA 2019), *Métodos rápidos de clasificación de aceites de oliva virgen complementarios al Panel Test – Experiencias piloto de implantación en el sector productor*. 16/05/2019.
2. Jornadas del Sector del Aceite de Oliva (Cooperativas Agro-alimentarias de España), *Proyecto Instrumensorial-Volátiles. Búsqueda de un método de análisis químico instrumental que complemente al método de valoración sensorial*. 31/11/2017
3. II Jornadas de Formación y Actualización de Jefes de Panel de Cata de Aceite de Oliva Virgen en Andalucía, *Materiales de referencia certificados para análisis sensorial de AOV: elaboración y empleo*. 04/10/2017.
4. III Workshop Aceite de Oliva – Análisis Sensorial: Situación Actual y Nuevos Retos, *Propuestas de actuación frente a nuevos retos del análisis sensorial – ¿es posible emular los resultados del panel mediante análisis químico?* 19/09/2017.
5. XVIII Symposium Científico-Técnico. Foro de la Industria Oleícola, Tecnología y Calidad. XVIII Feria Internacional del Aceite de Oliva e Industrias Afines (EXPOLIVA 2017), *Fundamentos para la aplicabilidad de métodos instrumentales complementarios al método sensorial*. 11/05/2017.

C.6. Evaluación of proyectos y actividades asociadas a la I+D

- Evaluador habitual, desde 2008, de proyectos de I+D para la Agencia Estatal de Investigación (AEI) (anteriormente ANEP). Total: 48 proyectos.
- Evaluador de proyectos de I+D para otras agencias no naciones: Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT), Portugal; Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCT), Argentina. Total: 3 proyectos.
- Evaluador 4D de proyectos de I+D+I de empresas para diferentes entidades de certificación (Acreditadas por ENAC como Organismo de Certificación de proyectos de I+D+i en base al Real Decreto 1432/2003 y/o a la norma UNE 166.001): (i) OCA Instituto de Certificación, SLU; (ii) SGS ICS Ibérica; (iii) DNV GL - Business Assurance; y (iv) EQA Certificados I+D+I. Total: 4 proyectos.
- Experto técnico en la elaboración de informes periciales. Subdirección General de Fomento de la Innovación, Secretaría General de Innovación, Ministerio de Ciencia e Innovación (MICIN), 2017-20. Total: 2 informes.
- Presidente y Representante de la Universidad de Granada en el Comité de Partes, Fundación Qualitech Alimentación (entidad certificadora de alimentos) 2011 – 2018.
- Revisor (censor) de artículos en diferentes revistas internacionales indexadas en JCR (p.o.a.): Analytical and Bioanalytical Chemistry, Analytica Chimica Acta, Analytical Methods, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, Chemosphere, Chromatographia, Electrophoresis, Environmental Science and Pollution Research, European Food Research and Technology, Food Analytical Methods, Food Chemistry, Foods, International Journal of Environmental Analytical Chemistry, Journal of Agricultural and Food Chemistry, Journal of the American Oil Chemists' Society, Journal of Chemometrics, Journal of Chromatography, Journal of Food Composition and Analysis RSC Advances, Talanta, Trends in Analytical Chemistry.

C.7. Otros

Participación en organismos de investigación

- Investigador asociado en el Instituto de investigación Biosanitaria (ibs.GRANADA).
- Miembro de la Red Temática de Quimiometría, España.

CURRICULUM VITAE

| | | | |
|--------------------------------------|---|---------------------|------------|
| Part A. PERSONAL INFORMATION | | CV date | 21/04/2022 |
| First and Family name | Ricard Boqué Martí | | |
| Social Security, Passport, ID number | | Age | |
| Researcher codes | WoS Researcher ID (*) | F-9076-2014 | |
| | SCOPUS Author ID(*) | | |
| | Open Researcher and Contributor ID (ORCID) ** | 0000-0001-7311-4824 | |

(*) At least one of these is mandatory

(**) Mandatory

A.1. Current position

| | | | |
|--------------------------------|---|--------|--|
| Name of University/Institution | Universitat Rovira i Virgili | | |
| Department | Analytical Chemistry and Organic Chemistry | | |
| Address and Country | Faculty of Chemistry. C/Marcel·lí Domingo, 1. 43007 Tarragona (Spain) | | |
| Phone number | 977558445 | E-mail | ricard.boque@urv.cat |
| Current position | Associate Professor | From | 07/12/2002 |
| Key words | Analytical Chemistry, Chemometrics, Qualimetrics | | |

A.2. Education

| PhD | University | Year |
|-----------------------------|------------------------------|------|
| Degree in Chemical Sciences | Universitat de Barcelona | 1991 |
| Doctor in Chemistry | Universitat Rovira i Virgili | 1997 |

A.3. JCR articles, h Index, thesis supervised...

Research periods (sexennium): 4

Date of the last period awarded: 18/10/2018 (period 2012-2017)

JCR articles: 106

JCR articles in Q1: >70

Total citations: 3350

Average citations per year: 77

Average citations per item: 31

h index: 32

Part B. CV SUMMARY (max. 3500 characters, including spaces)

My scientific career has always been linked to the fields of chemometrics and qualimetrics. My doctoral thesis, entitled "Limits of detection in multivariate analysis" was awarded the extraordinary doctorate award in 1997. After concluding it, I made a postdoctoral stay at the University of Amsterdam, in the prestigious research group of Prof. Age Smilde, where I became familiar with the multiway calibration methods that we then applied in two subsequent doctoral theses. Then, in 1999, I rejoined my research group on "Chemometrics, Qualimetry and Nanosensors". Since then I have published more than 80 scientific articles in impact journals, as well as several book chapters and numerous articles of scientific dissemination. I have also participated in multiple international conferences and I have supervised 7 doctoral theses, always in the fields of chemometrics and qualimetrics, and in concrete in the development of new multivariate calibration and classification methods. During this time, I have been participating in research projects in competitive calls, both at national and European level. It is worth mentioning my participation as IP in the European project TRACE: Tracing Food Commodities in Europe (FP6-FOOD-2004-006942), in the 2005-2010 period. This was the project that opened the way to our current line of research in the field of food

authentication, in collaboration with the iSens research group, also of the Department of Analytical Chemistry and Organic Chemistry of our university, and coordinated by Dr. Olga Busto. This collaboration has resulted in the joint participation in four national projects (AGL2010-19688, AGL2011-26456, AGL2015-70106-R and PID2019-104269RR-C33) and the joint supervision of three doctoral theses and two more in progress. This research aims to define and establish multivariate quality specifications in food products from rapid instrumental measures (based on spectroscopic techniques), which are intended to correlate with the chemical and sensory properties of these foods.

With the idea of extending the control of these specifications not only to final products, but also to industrial processes, we joined a European consortium of companies and institutions, which culminated in the achievement of a European project in the call H2020-SPIRE-2014, the ProPAT “Robust and affordable process control technologies for improving standards and optimizing industrial operations” (ID 637232). Finally, and in the line of process analytical technologies, I have participated in the following projects: “Detection and eradication of bitter almond”, together with the company Arboreto SAT, “Prediction of physicochemical parameters in veterinary drugs”, together with s.p. Veterinaria SA, and “Development of models for the detection of out-of type individuals (varietal and/or with phytopathologies) by means of non-destructive spectroscopic techniques, together with Agromillora Iberia SLU, all of them based on the use of near infrared (NIR) technology for on-line measurements.

RELEVANT MERITS

Publications (JCR indexed) in last 10 years

1. Borraz-Martínez, S.; Simó, J.; Gras, A.; Mestre, M.; Boqué, R.; Tarrés, F. Combining computer vision and deep learning to classify varieties of *Prunus dulcis* for the nursery plant industry. *Journal of Chemometrics* (2022) e3388.
2. Giussani, B.; Escalante-Quiceno, A.T.; Boqué, R.; Riu, R. Measurement strategies for the classification of edible oils using low-cost miniaturised portable NIR instruments. *Foods*, 10 (2021) 2856.
3. Boudebouz, A.; Romero, A.; Hermoso, J.F.; Boqué, R.; Mestres, M. Processing factors that affect the balance of alcohols and alkyl esters during ‘Arbequina’ olive oil production: Separation and clarification steps. *LWT- Food science and Technology*, 149 (2021) 111842.
4. Foschi, M.; Biancolillo, A.; Vellozzi, S.; Marini, F.; D’Archivio, A.A.; Boqué, R. Spectroscopic fingerprinting and chemometrics for the discrimination of Italian Emmer landraces. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 215 (2021) 104348.
5. Schorn-García, D.; Cavaglia, J.; Giussani, B.; Busto, O.; Aceña, L.; Mestres, M.; Boqué, R. ATR-MIR spectroscopy as a process analytical technology in wine alcoholic fermentation – A tutorial. *Microchemical Journal*, 166 (2021) 106215.
6. Boqué, R.; Giussani, B. Application of Spectrometric Technologies in the Monitoring and Control of Foods and Beverages (Editorial). *Foods*, 10 (2021) 948.
7. Borraz-Martínez, S.; Tarrés, F.; Boqué, R.; Mestre, M.; Simó, J.; Gras, A. Varietal quality control in the nursery plant industry using computer vision and deep learning techniques. *Journal of Chemometrics*, (2020) e3320.
8. Riu, J.; Gorla, G.; Chafik, D.; Boqué, R.; Giussani, B. Rapid Analysis of Milk Using Low-Cost Pocket-Size NIR Spectrometers and Multivariate Analysis. *Foods*, 9 (2020) 1090.

9. Cavaglia, J.; Schorn-García, D.; Giussani, B.; Ferré, J.; Busto, O.; Aceña, L.; Mestres, M.; Boqué, R. Monitoring wine fermentation deviations using an ATR-MIR spectrometer and MSPC charts. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 201 (2020) 104011.
10. Rehman, N.U.; Al-Harrasi, A.; Boqué, R.; Mabood, F.; Al-Broumi, M.; Hussain, J. Alameri, S. FT-NIRS Coupled with PLS Regression as a Complement to HPLC Routine Analysis of Caffeine in Tea Samples. *Foods*, 9 (2020) 827.
11. Sans, S.; Ferré, J.; Boqué, R.; Sabaté, J.; Casals, J.; Simó, J. Estimating sensory properties with near-infrared spectroscopy: a tool for quality control and breeding of 'calçots' (*Allium cepa* L.). *Agronomy*, 10 (2020) 828.
12. Gorla, G.; Mestres, M.; Boqué, R.; Riu, J.; Spanu, D.; Giussani, B. ATR-MIR spectroscopy to predict commercial milk major components: A comparison between a handheld and a benchtop instrument. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 200 (2020) 103995.
13. Mabood, F.; Boqué, R.; Alkindi, A.Y.; Al-Harrasi, A.; Al Amri, I.S.; Boukra, S.; Jabeen, F.; Hussain, J.; Abbas, G.; Naureen, Z.; Haq, Q.M.I.; Shah, H.H.; Khan, A.; Khalaf, S.K.; Kadim, I. Fast detection and quantification of pork meat in other meats by reflectance FT-NIR spectroscopy and multivariate analysis. *Meat Science*, 163 (2020) 108084.
14. Boudebouz, A.; Romero, A.; Boqué, R.; Aceña, L.; Busto, O.; Mestres, M. Quantitation of endogenous amount of ethanol, methanol and acetaldehyde in ripe fruits of different Spanish olive varieties. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, 100 (2020) 3173-3181.
15. Cavaglia, J.; Schorn-García, D.; Giussani, B.; Ferré, J.; Busto, O.; Aceña, L.; Mestres, M.; Boqué, R. ATR-MIR spectroscopy and multivariate analysis in alcoholic fermentation monitoring and lactic acid bacteria spoilage detection. *Food Control*, 109 (2020) 106947.
16. Ashraf, A.; Khizar, M.; Islam, M.; Hameed, A.; Moin, S.T.; Yaqub, M.; Rauf, W.; Naseer, M.M.; Ahsan, M.T.; Shafiq, Z.; Hussain, J.; Al-Harrasi, A.; Boqué, R.; Jabeen, F.; Mabood, F. Synthesis of sensitive novel dual Signaling Pyridopyrimidine-Based Fluorescent "Turn off" Chemosensors for Anions determination. *Measurement*, 151 (2020) 107267.
17. Mabood, F.; Ali, L.; Boqué, R.; Abbas, G.; Jabeen, F.; Haq, Q.M.I.; Hussain, J.; Hamaed, A.M.; Naureen, Z.; Al-Nabhani, M.; Khan, M.Z.; Khan, A.; Al-Harrasi. A Robust Fourier transformed infrared spectroscopy coupled with multivariate methods for detection and quantification of urea adulteration in fresh milk samples. *Food Science & Nutrition*, 8 (2020) 5249–5258.
18. Borraz-Martínez, S.; Simó, J.; Gras, A.; Mestre, M.; Boqué, R. Multivariate Classification of *Prunus Dulcis* Varieties using Leaves of Nursery Plants and Near Infrared Spectroscopy. *Scientific Reports*, 9 (2019) 19810.
19. Borraz-Martínez, S.; Boqué, R.; Simó, J.; Mestre, M.; Gras, A. Development of a methodology to analyze leaves from *Prunus dulcis* varieties using near infrared spectroscopy. *Talanta*, 204 (2019) 320-328.
20. Cavaglia, J.; Giussani, B.; Mestres, M.; Puxeu, M.; Busto, O.; Ferré, J.; Boqué, R. Early detection of undesirable deviations in must fermentation using a portable FTIR-ATR instrument and multivariate analysis. *Journal of Chemometrics*, 33 (2019) e3162.
21. Biancolillo, A.; Boqué, R.; Cocchi, M.; Marini, F. *Data Fusion Strategies in Food Analysis*. In DATA FUSION METHODOLOGY AND APPLICATIONS (Edited by Marina Cocchi). Pages 271-310. Elsevier, Amsterdam (2019). ISBN: 978-0-444-63984-4
22. Sans, S.; Ferré, J.; Boqué, R.; Sabaté, J.; Casals, J.; Simó, J. Determination of chemical properties in 'calcot' (*Allium cepa* L.) by near infrared spectroscopy and multivariate calibration. *Food Chemistry*, 262 (2018) 178-183.
23. Mabood, F.; Boqué, R.; Hamaed, A.; Jabeen, F.; Al-Harrasi, A.; Hussain, J.; Alameri, S.; Albroumi, M.; Al Nabhani, M.M.O.; Naureen, Z.; Al Rawahi, M.; Al Futaisi, F.A.S. Near-Infrared Spectroscopy Coupled with Multivariate Methods for the Characterization of Ethanol Adulteration in Premium 91 Gasoline. *Energy & Fuels*, 31 (2017) 7591-7597.

24. Mabood, F.; Gilani, S.A.; Albroumi, M.; Alameri, S.; Al Nabhani, M.M.O.; Jabeen, F.; Hussain, J.; Al-Harrasi, A.; Boqué, R.; Farooq, S.; Hamaed, A.M.; Naureen, Z.; Khan, A.; Hussain, Z. Detection and estimation of Super premium 95 gasoline adulteration with Premium 91 gasoline using new NIR spectroscopy combined with multivariate methods. *Fuel*, 197 (2017) 388-396.
25. Mabood, F.; Jabeen, F.; Ahmed, M.; Hussain, J.; Al Mashaykhi, S.A.A.; Al Rubaiey, Z.M.A.; Farooq, S.; Boqué, R.; Ali, L.; Hussain, Z.; Al-Harrasi, A.; Khan, A.L.; Naureen, Z.; Idrees, M.; Manzoor, S. Development of new NIR-spectroscopy method combined with multivariate analysis for detection of adulteration in camel milk with goat milk. *Food Chemistry*, 221 (2017) 746-750.
26. Wisniewska, P.; Boqué, R.; Borràs, E.; Busto, O.; Wardencki, W.; Namiesnik, J.; Dymerski, T. Authentication of whisky due to its botanical origin and way of production by instrumental analysis and multivariate classification methods. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 173 (2017) 849-853.
27. Aceña, L.; Mestres, M.; Busto, O.; Boqué, R. *Sensory Analysis*. In FOOD AUTHENTICATION: MANAGEMENT, ANALYSIS AND REGULATION (Edited by C.A. Georgiou and GP Danezis). Pages: 377-391. John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2017. ISBN: 9781118810224.
28. de Urbina, E.O.; Mesanza, N.; Aragonés, A.; Raposo, R.; Elvira-Recuenco, M.; Boqué, R.; Patten, C.; Aitken, J.; Iturritxa, E. Emerging Needle Blight Diseases in Atlantic Pinus Ecosystems of Spain. *Forests*, 8 (2017) 18.
29. Borràs, E.; Ferré, J.; Boqué, R.; Mestres, M.; Aceña, L.; Calvo, A.; Busto, O. Prediction of olive oil sensory descriptors using instrumental data fusion and partial least squares (PLS) regression. *Talanta*, 155 (2016) 116-123.
30. Borràs, E.; Ferré, J.; Boqué, R.; Mestres, M.; Aceña, L.; Calvo, A.; Busto, O. Olive oil sensory defects classification with data fusion of instrumental techniques and multivariate analysis (PLS-DA). *Food Chemistry*, 203 (2016) 314-322.
31. Mabood, F.; Boqué, R.; Folcarelli, R.; Busto, O.; Jabeen, F.; Al-Harrasi, A.; Hussain, J. The effect of thermal treatment on the enhancement of detection of adulteration in extra virgin olive oils by synchronous fluorescence spectroscopy and chemometric analysis. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 161 (2016) 83-87.
32. Mabood, F.; Hussain, Z.; Haq, H.; Arian, M.B.; Boqué, R.; Khan, K.M.; Hussain, K.; Jabeen, F.; Hussain, J.; Ahmed, M.; Alharasi, A.; Naureen, Z.; Hussain, H.; Khan, A.; Perveen, S. Development of new UV-vis spectroscopic microwave-assisted method for determination of glucose in pharmaceutical samples. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 153 (2016) 212-215.
33. Borràs, E.; Mestres, M.; Aceña, L.; Busto, O.; Ferré, J.; Boqué, R.; Calvo, A. Identification of olive oil sensory defects by multivariate analysis of mid infrared spectra. *Food Chemistry*, 187 (2015) 197-203.
34. Borràs, E.; Ferré, J.; Boqué, R.; Mestres, M.; Aceña, L.; Busto, O. Data fusion methodologies for food and beverage authentication and quality assessment - A review. *Analytica Chimica Acta*, 891 (2015) 1-14.
35. Mahood, F.; Boqué, R.; Folcarelli, R.; Busto, O.; Al-Harrasi, A.; Hussain, J. Thermal oxidation process accelerates degradation of the olive oil mixed with sunflower oil and enables its discrimination using synchronous fluorescence spectroscopy and chemometric analysis. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 143 (2015) 298-303.
36. Luna, A.S.; da Silva, A.P.; Pinho, J.S.A.; Ferré, J.; Boqué, R. A novel approach to discriminate transgenic from non-transgenic soybean oil using FT-MIR and chemometrics. *Food Research International*, 67 (2015) 206-211.

37. Borràs, E.; Amigo, J.M.; van den Berg, F.; Boqué, R.; Busto, O. Fast and robust discrimination of almonds (*Prunus amygdalus*) with respect to their bitterness by using near infrared and partial least squares-discriminant analysis. *Food Chemistry*, 153 (2014) 15-19.
38. Luna, A.S.; Lima, I.C.A.; Rocha, W.F.C.; Araujo, J.R.; Kuznetsov, A.; Ferreira, E.H.M.; Boqué, R.; Ferré, J. Classification of soil samples based on Raman spectroscopy and X-ray fluorescence spectrometry combined with chemometric methods and variable selection. *Analytical Methods*, 6 (2014) 8930-8939.
39. Luna, A.S.; Luiz, R.A.; Lima, I.C.A.; Marco, P.H.; Valderrama, P.; Boqué, R.; Ferré, J. Simultaneous determination of aflatoxins B₂ and G₂ in peanuts using spectrofluorescence coupled with parallel factor analysis. *Analytica Chimica Acta*, 778 (2013) 9-14.
40. Ferré, J.; Boqué, R. *Ordinary Multiple Linear Regression and Principal Components Regression*. In BASIC CHEMOMETRIC TECHNIQUES IN ATOMIC SPECTROSCOPY, 2nd edition (Edited by J.M. Andrade). Pages: 256-279. RSC Analytical Spectroscopy Monographs (Volume 13), 2013. ISBN: 978-1-84973-796-8.
41. Andrade, J.M.; Carlosena, A.; Boqué, R.; Ferré, J. *Partial Least-Squares Regression*. In BASIC CHEMOMETRIC TECHNIQUES IN ATOMIC SPECTROSCOPY, 2nd edition (Edited by J.M. Andrade). Pages 280-347. RSC Analytical Spectroscopy Monographs (Volume 13), 2013. ISBN: 978-1-84973-796-8.
42. Luna, A.S.; da Silva, A.P.; Ferré, J.; Boqué, R. Classification of edible oils and modeling of their physico-chemical properties by chemometric methods using mid-IR spectroscopy. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 100 (2013) 109-114.
43. Luna, A.S.; da Silva, A.P.; Pinho, J.S.A.; Ferré, J.; Boqué, R. Rapid characterization of transgenic and non-transgenic soybean oils by chemometric methods using NIR spectroscopy. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 100 (2013) 115-119.
44. Gomez-Carracedo, M.P.; Ferré, J.; Andrade, J.M.; Fernandez-Varela, R.; Boqué, R. Objective chemical fingerprinting of oil spills by partial least-squares discriminant analysis. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 403 (2012) 2027-2037.

C.2. Research projects and grants (last 10 years)

ALLFRUIT4ALL - Innovative fruit-based products to increase fruit consumption, promote health and reduce food waste (Ref: PID2019-104269RR-C33). Ministry of Science, Innovation and Universities. R+D+i Projects Research Challenges (2019). PI: Ricard Boqué. Period: 01/06/2020 - 01/06/2023. Amount granted: 84700 euros.

Research Promotion Program (Ref.: 2021PFR-URV-115). Universitat Rovira i Virgili. PI: Ricard Boqué. Period: 31/12/2020 – 30/12/2023. Amount granted: 7677 euros.

ENOPAT - Process Analytical Technologies (PAT) for the control of wine production (AGL2015-70106-R). Ministry of Economy and Competitiveness. PI: Olga Busto and Ricard Boqué. Period: 01/01/2016 - 31/12/2019. Amount granted: 90000 €.

Research Promotion Program (Ref.: 2019PFR-URV-09). Universitat Rovira i Virgili. PI: Ricard Boqué. Period: 31/12/2019 – 30/12/2022. Amount granted: 8187 euros.

Chemometrics, Qualimetrics and Nanosensors Group. Consolidated Research Group (2017 SGR 821). University and Research Grants Management Agency (AGAUR). PI: Ricard Boqué. Period: 01/01/2017 – 31/12/2019.

ProPAT - Robust and affordable process control technologies for improving standards and optimising industrial operations (ID 637232). EUROPEAN COMMISSION Horizon 2020 - Research and Innovation Framework Programme H2020-SPIRE-2014. PI: Joan Ferré (Universitat Rovira i Virgili). Period: 2015-2018. Amount granted: 216000 euros.

Chemometrics, Qualimetrics and Nanosensors Group. Consolidated Research Group (2014 SGR 433). University and Research Grants Management Agency (AGAUR). PI: F. Xavier Rius (Universitat Rovira i Virgili). Period: 01/01/2014 – 31/12/2016.

European Chemistry and Chemical Engineering Education Network 2 (Ref.: 526259-LLP-1-2012-1-FR-ERASMUS-ENW). Education, Audiovisual and Culture Executive Agency. PI: Laureano Jiménez (Universitat Rovira i Virgili). Period: 01/10/2012 - 30/09/2015. Amount granted: 16000 €.

Instrumental sensometry applied to the determination of specifications of origin and quality of typical foods of the Mediterranean diet (AGL2011-26456). Ministry of Science and Innovation. PI: Olga Busto (Universitat Rovira i Virgili). Period: 2012-2014. Amount granted: 100000 euros.

Origin and quality specifications of typical products of the Mediterranean diet (AGL2010-19688). Ministry of Science and Innovation. PI: Olga Busto (Universitat Rovira i Virgili). Period: 01/01/2011 – 30/06/2012. Amount granted: 25000 euros.

European Chemistry and Chemical Engineering Education Network (Ref.: 155975-LLP-1-2009-1-FR-ERASMUS). Education, Audiovisual and Culture Executive Agency. PI: Laureano Jiménez (Universitat Rovira i Virgili). Period: 01/10/2009 - 30/09/2012. Amount granted: 4000 euros.

C.3. Contracts

Prediction of physicochemical parameters in veterinary drugs. URV Foundation and s.p. Veterinaria SA. PI: Ricard Boqué (Universitat Rovira i Virgili). Year 2019. Total amount: 16920 euros.

Bitter almond detection and eradication. URV Foundation and Arboreto S.A.T. PI: Ricard Boqué (Universitat Rovira i Virgili). Year 2019. Total amount: 22500 euros.

Development of models for the detection of out-of-type individuals (varietal and/or with phytopathologies) by means of non-destructive spectroscopic techniques. URV Foundation and Agromillora Iberia SLU. PI: Ricard Boqué (Universitat Rovira i Virgili). Year 2017. Total amount: 15000 euros.

Development of a NIR inspection system for the detection of bitter almonds (AMAR). CDTI and Arboreto S.A.T. PI: Ricard Boqué Martí (Universitat Rovira i Virgili). Year 2015. Total amount: 35000 euros.

C.4. Patents

Inspection equipment for automated classification or discrimination of almonds based on amygdalin concentration and inspection procedure (ES 2 684 855 B1). Owners: Arboreto SAT (33.3%), Teckniker Foundation (33.3%) and Universitat Rovira i Virgili (33.3%). Participation: co-inventor. Award date: 02/08/2019.

C.5. Participation in evaluation tasks

Specialized course "Use of reference materials and validation of chemical methods in food" of the National Institute of Metrology (INM) of Colombia. Project "Quality for competitiveness- Reducing the quality gaps in Micro, Small and Medium Enterprises in regions of Colombia" (Ref. UE- PTB LA/2019/407-085), between the EU and the PTB (Physikalisch-Technische Bundesanstalt. 2021).

Project 1.1.1.1/21/A/032 "Development of Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR) methods for determination chemical and physical properties of growing media". Programme "Growth and Employment" of the EU Structural and Cohesion Fund 2014-2020 programming period. Priority axis "Research, development of technologies and innovation" of operational Central Finance and Contracting Agency (CFCA). The Republic of Latvia (2021).

Convocatoria de ayudas para la recualificación del sistema universitario español (2021-2023). Modalidad María Zambrano para la atracción de talento internacional. Solicitud MAZAM21/39. Universidad del País Vasco (EHU/UPV), 2021.

Proyecto IDA1-21-0107-3 "Identificación de factores de impacto implicados en el rendimiento y la calidad del AOVE (4OVE). Junta de Extremadura. Proyectos I+D Empresas de no base tecnológica ni start up (Mod 1). 2021.

Support program for research projects co-financed by the European regional development fund (FEDER). Project BU012P17 "Chemometric tools to improve decision making framed in process analytical technology and food safety". ACSUCyL (Spain), 2020.

National Evaluation and Prospective Agency (ANEP). Call: University of the Basque Country Research Groups 2013.

European Research Council. Call: ERC Advanced Grant 2012 project proposals.

C.6. Member of international committees

Member of the Permanent Committee of the "Chemometrics in Analytical Chemistry International Conference". From 2010.

C.7. Management of scientific activity

Member of the Organizing Committee of the CAC2016 "Chemometrics in Analytical Chemistry International Conference". Barcelona, 2016.

Member of the Organizing Committee of the GIENOL 2.015 congress (Oenological Research Groups). Tarragona, 2015.

Organizer of the School "ChemoPAT: Chemometric tools for process analytical technologies". Thematic Network of Chemometrics - Universitat Rovira i Virgili. Tarragona, 2014.

C.8. Editorial Committees

Review editor of the *Journal of Chemometrics* (John Wiley & Sons). Period: 03/01/2012 - Present.

Parte A. DATOS PERSONALES

| | |
|----------------------|---------------|
| Fecha del CVA | 27 abril 2022 |
|----------------------|---------------|

| | | | |
|--------------------------------------|----------------------|---------------------|--|
| Nombre y apellidos | Jordi Coello Bonilla | | |
| DNI/NIE/pasaporte | | Edad | |
| Núm. identificación del investigador | Researcher ID | H-9278-2015 | |
| | Código Orcid | 0000-0002-8300-7309 | |

A.1. Situación profesional actual

| | | | |
|--------------------|--|--------------------|--|
| Organismo | Universitat Autònoma de Barcelona (UAB) | | |
| Dpto./Centro | Química Analítica (Departament de Química) | | |
| Dirección | Edifici C, 08193, Bellaterra (Cerdanyola del Vallès) | | |
| Teléfono | 34-93-581 2122 | correo electrónico | jordi.coello@uab.cat |
| | Categoría profesional | | Fecha inicio |
| Espec. cód. UNESCO | Catedrático de Universidad | | |
| | 14/10/2006 | | |
| | 230100, 230101, 230108, 230117, 230199 (Quimiometría), 320901 | | |
| Palabras clave | Química analítica; Química aplicada; Espectroscopia en el infrarrojo cercano (NIR); Espectroscopia Raman; Control de calidad de productos y procesos; Análisis de fármacos; Quimiometria | | |

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

| Licenciatura/Grado/Doctorado | Universidad | Año |
|--|--|------|
| Ciencias (Doctorado) | Universitat Autònoma de Barcelona (UAB) | 1986 |
| Licenciate of Enginering (Inorganic Chemistry) | Kungliga Tekniska högskolan (Royal Institute of Technology of Stockholm) | 1986 |
| Licenciatura Ciencias (Química) | Universitat Autònoma de Barcelona (UAB) | 1979 |

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

Número de sexenios: 5 Fecha último sexenio: 2012-2017

Número de tesis doctorales dirigidas (últimos 10 años): 4

Citas totales: 3149

Promedio de citas/año durante los últimos 5 años: 105,6 citas /año

| Año | 2021 | 2020 | 2019 | 2018 | 2017 |
|--------------------|------|------|------|------|------|
| Nº de citas | 91 | 93 | 120 | 109 | 115 |

Publicaciones totales en primer cuartil (Q1): 62/122

Índice H: 32

(fuente WOS)

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

Después de la licenciatura en la Universidad Autónoma de Barcelona en 1979, inicié la tesis en 1981 en el campo de la extracción líquido-líquido, contratado como profesor Ayudante en el Departamento de Química de la UAB. En el año 1984 obtuve una beca FPI en el extranjero y estuve durante dos años en el Departamento de Química Inorgánica del Kungliga Tekniska Högskolan-Royal Institute of Technology of Stockholm, donde obtuve el título de Licenciate of Engineerig (Inorganic Chemistry). Al retornar a España obtuve el doctorado en Julio de 1986; e inicié una nueva etapa de profesor Ayudante contratado.

Posteriormente me integré en el Grupo de Quimiometría Aplicada, cambiando mi investigación al campo del análisis de control por métodos rápidos, mayoritariamente de productos farmacéuticos, publicando el primer trabajo sobre este tema en 1988. En 1987 obtuve la plaza de Profesor Titular. A principios de los 90, el grupo de investigación fue pionero en España en la utilización de espectroscopia NIR para análisis de productos farmacéuticos, con un primer trabajo publicado en 1992. Desde entonces mi línea de investigación ha sido similar, trabajando con datos espectroscópicos y técnicas quimiométricas para el control de calidad de productos y procesos en diversos campos industriales (farmacéutico, alimentación, textil, petroquímica, polímeros, etc), enfrentándose a problemas cada vez más difíciles que necesitaban de técnicas más complejas. En el 2011

obtuve la plaza de Catedrático de Universidad. He participado, como investigador e investigador principal, tanto en múltiples proyectos competitivos como en convenios con empresas. Desde 2013 he iniciado estudios utilizando la espectroscopia Raman para realizar estudios de la homogeneidad de la distribución de principios activos y excipientes en comprimidos farmacéuticos. También en los últimos años he ampliado las líneas de investigación, tratando datos relacionados con la viticultura dentro de un proyecto para el estudio de la influencia del cambio climático en propiedades y metabolitos de la uva y el vino. Una nueva línea de investigación iniciada recientemente en colaboración con el Departamento de Química Analítica de la Facultad de Medicina de la Universidad Autónoma de Nuevo León (México) es la del estudio de plantas medicinales, tanto de su huella dactilar, obtenida por HPLC o datos espectroscópicos, como al análisis de datos de la metabolómica de las plantas. Con el mismo grupo realizamos estudios de marcadores metabolómicos de diabetes en humanos.

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (ordenados por tipología)

C.1. Publicaciones

-Artículo: Clua-Palau, G.; Jo, E.; Nikolic, S.; Coello, J.; Maspoch, S., 2020. Robust freeze-drying process re-design of a legacy product based on risk analysis and design of experiments. *Drug Development And Industrial Pharmacy*. **46**, 2022-2031 DOI: 10.1080/03639045.2020.1842438

-Artículo :B. Clua-Palau, G.; Jo, E.; Nikolic, S.; Coello, J.; Maspoch, S., 2020. Finding a reliable limit of detection in the NIR determination of residual moisture in a freeze-dried drug product. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*. **183**, 113163 DOI: 10.1016/j.jpba.2020.113163

Artículo: Gómez, D.A.; Coello, J.; Maspoch, S. , 2019. The influence of particle size on the intensity and reproducibility of Raman spectra of compacted samples. *Vibrational Spectroscopy*, 100, 48-56. DOI: 10.1016/j.vibspec.2018.10.011

- Artículo: Puig-Bertotto, J.; Coello, J.; Maspoch S. 2019. Evaluation of a handheld near-infrared spectrophotometer for quantitative determination of two APIs in a solid pharmaceutical preparation. *Analytical Methods*, 11, 327-335. DOI: 10.1039/c8ay01970c

Artículo: Lucio-Gutiérrez, J.R.; Delgado-Montemayor, C.; Coello-Bonilla, J.; Waksman-Minky, N; Saucedo, 2019. Selective 1D-TOCSY and chemometrics to evaluate authenticity of *Turnera diffusa* and related botanical extracts. *Phytochemistry Letters*, 30, 62-68. DOI: 10.1016/j.phytol.2019.01.011

C.2. Proyectos

- PDCPN-2017 2017-01-5652. FORDECYT-PRONACES (México). Estudio del perfil metabolómico de la enfermedad renal crónica asociada a diabetes mellitus tipo 2 como estrategia para la identificación de biomarcadores relacionados con la progresión. IP: Alma L. Saucedo. 55400€. Investigador

- 2017SGR00280 Grup de Quimiometria Aplicada. Convocatòria de suport als Grups de Recerca de Catalunya (SGR2017). IP: Santiago Maspoch Andrés. 01/01/2017 - 31/12/2019. Investigador.

- 2016DI034 Convocatoria de Doctorados Industriales de la AGAUR de la Generalitat de Catalunya. Utilización de la espectroscopia NIR en el análisis de identificación y control de

calidad de productos farmacéuticos. Director Jordi Coello Bonilla. 02/01/2017 – 01/01/2020. Convenio Reig-Jofre UAB. 175560€

- CTQ2016-79696-P. DISEÑO, monitorización y optimización de procesos farmacéuticos avanzados. MINECO. IP: Santiago MasPOCH Andrés. Universitat Autònoma de Barcelona (UAB). 30/10/2016 - 29/12/2019. 79860 €. Investigador.

- PRODEP 103.5/15/14156. Metabolómica aplicada a la obtención de fitofármacos a partir de plantas medicinales mexicanas. Secretaría de Educación Pública, México. 11/12/2015 - 11/12/2016. Importe total 110000 €. Investigador.

- 2014SGR249 Grup de Quimiometria Aplicada. Convocatòria de suport als Grups de Recerca de Catalunya (SGR2014). IP: Santiago MasPOCH Andrés. 01/01/2014 - 31/12/2016. Investigador.

2009SGR1470 Grup de Quimiometria Aplicada. Convocatòria de suport als Grups de Recerca de Catalunya (SGR2009). IP: Santiago MasPOCH Andrés. 01/01/2009 - 31/12/2013. 42260€. Investigador.

C.3. Contratos

- Kern Pharma S.L. Construcción de bibliotecas NIR de MP y evaluación de parámetros críticos. CF617548/D04032. IP: Jordi Coello Bonilla. 16/12/2020 – 12/09/2021. 13500€

- Bodegas Torres SA Estudios sobre problemas detectados de las enfermedades de la madera ACV15116 (18/05/2016-17/10/2016): 6000€

- CDTI. Proyecto DEMETER. Convenio UAB código 10269. CTQ2005-01946. Desarrollo de Estrategias y Métodos vitícolas y Enológicos frente al cambio climático. Aplicación de nuevas Tecnologías que mejoren la Eficiencia de los procesos Resultantes. IP: Jordi Coello Bonilla. Entidad financiadora: Bodegas Torres. 01/03/2008 – 31/03/2012. 164164,36€

- CDTI. Proyecto IDI-20080259. Definición de espacio de diseño mediante herramientas PAT en el desarrollo y fabricación de medicamentos. IP: Marcelo Blanco Romía. Entidad Financiadora: Laboratorios Menarini S.A. 01/01/2008 – 31/12/2011. 90000€. Investigador.

C.4. Patentes

C.5. Dirección de trabajos

- Judit Puig. “Application of vibrational spectroscopy as a technique for analytical process control in the pharmaceutical industry”. Tesis doctoral. Presentación en julio de 2022.

- Andrea Pangrazi, de la facultad Scienze della vita, de la Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia. “Use of a portable Raman spectrometer as an analytical tool in the pharmaceutical industry” 19/10/2020 – 30 /04/2021. Erasmus+

- Iván Avilés. “Avaluació d'un Raman portàtil per al seu ús amb preparacions farmacèutiques”. TFG julio 2019.

- Barbara Łopieńska, “Validation of the quantitative determination method of EDTA by HPLC in animal care medicines containing moxidectin”, master realizado en los laboratorios Zoetis SA. Julio 2017

C.6. Participación en tareas de evaluación y organización de actividades

Organización del Congreso International X Colloquium Chemiometricum Mediterraneum (Menorca)
11-14 juny 2019, Comité científico.

C.7. Miembro de comités internacionales

C.8. Gestión de la actividad científica

C.9. Comités editoriales

C.10. Premios

C.11. Otros

Director del Servicio de Análisis Químico de la UAB 2005-2018

INSTRUCCIONES PARA RELLENAR EL CVA

AVISO IMPORTANTE

En virtud del artículo 11 de la convocatoria **NO SE ACEPTARÁ NI SERÁ SUBSANABLE EL CURRÍCULUM ABREVIADO** que no se presente en este formato.

Este documento está preparado para que pueda rellenarse en el formato establecido como obligatorio en las convocatorias (artículo 11.7.a): letra Times New Roman o Arial de un tamaño mínimo de 11 puntos; márgenes laterales de 2,5 cm; márgenes superior e inferior de 1,5 cm; y espaciado mínimo sencillo.

La extensión máxima del documento (apartados A, B y C) no puede sobrepasar las 4 páginas.

Parte A. DATOS PERSONALES

Researcher ID (RID) es una comunidad basada en la web que hace visibles las publicaciones de autores que participan en ella. Los usuarios reciben un número de identificación personal estable (RID) que sirve para las búsquedas en la Web of Science. Los usuarios disponen de un perfil donde integrar sus temas de investigación, sus publicaciones y sus citas.

Acceso: Web of Science > Mis herramientas > Researcher ID

Código ORCID es un identificador compuesto por 16 dígitos que permite a los investigadores disponer de un código de autor inequívoco que les permite distinguir claramente su producción científico-técnica. De esta manera se evitan confusiones relacionadas con la autoría de actividades de investigación llevadas a cabo por investigadores diferentes con nombres personales coincidentes o semejantes.

Acceso: www.orcid.org

Si no tiene Researcher ID o código ORCID, no rellene estos apartados.

A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica

Se incluirá información sobre el número de sexenios de investigación y la fecha del último concedido, número de tesis doctorales dirigidas en los últimos 10 años, citas totales, promedio de citas/año durante los últimos 5 años (sin incluir el año actual), publicaciones totales en primer cuartil (Q1), índice h. Adicionalmente, se podrán incluir otros indicadores que el investigador considere pertinentes.

Para calcular estos valores, se utilizarán por defecto los datos recogidos en la Web of Science de Thomson Reuters. Cuando esto no sea posible, se podrán utilizar otros indicadores, especificando la base de datos de referencia.

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

Describa brevemente su trayectoria científica, los principales logros científico-técnicos obtenidos, los intereses y objetivos científico-técnicos a medio/largo plazo de su línea de

investigación. Indique también otros aspectos o peculiaridades que considere de importancia para comprender su trayectoria.

Si lo considera conveniente, en este apartado se puede incluir *el mismo resumen* del CV que se incluya en la solicitud, teniendo en cuenta que este resumen solo se utilizará para el proceso de evaluación de este proyecto, mientras que el que se incluye en la solicitud podrá ser difundido.

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

Teniendo en cuenta las limitaciones de espacio, detalle los méritos más relevantes ordenados por la tipología que mejor se adapte a su perfil científico. Los méritos aportados deben describirse de una forma concreta y detallada, evitando ambigüedades.

Los méritos aportados se pondrán en orden cronológico inverso dentro de cada apartado. Salvo en casos de especial importancia para valorar su CV, se incluirán únicamente los méritos de los últimos 10 años.

C.1. Publicaciones

Incluya una reseña completa de las 5-10 publicaciones más relevantes.

Si es un artículo, incluya autores por orden de firma, año de publicación, título del artículo, nombre de la revista, volumen: pág. inicial-pág. final.

Si se trata de un libro o de capítulo de un libro, incluya, además, la editorial y el ISBN.

Si hay muchos autores, indique el número total de firmantes y la posición del investigador que presenta esta solicitud (p. ej., 95/18).

C.2. Participación en proyectos de I+D+i

Indique los proyectos más destacados en los que ha participado (máximo 5-7), incluyendo: referencia, título, entidad financiadora y convocatoria, nombre del investigador principal y entidad de afiliación, fecha de inicio y de finalización, cuantía de la subvención, tipo de participación (investigador principal, investigador, coordinador de proyecto europeo, etc.) y si el proyecto está en evaluación o pendiente de resolución.

C.3. Participación en contratos de I+D+i

Indique los contratos más relevantes en los que ha participado (máximo 5-7), incluyendo título, empresa o entidad, nombre del investigador principal y entidad de afiliación, fecha de inicio y de finalización, cuantía.

C.4. Patentes

Relacione las patentes más destacadas, indicando los autores por orden de firma, referencia, título, países de prioridad, fecha, entidad titular y empresas que las estén explotando.

C.5, C.6, C.7... Otros

Mediante una numeración secuencial (C.5, C.6, C.7...), incluya los apartados que considere necesarios para recoger sus principales méritos científicos-técnicos: dirección de trabajos, participación en tareas de evaluación, miembro de comités internacionales, gestión de la actividad científica, comités editoriales, premios, etc.

Recuerde que todos los méritos presentados deberán presentarse de forma concreta, incluyendo las fechas o período de fechas de cada actuación.

El currículum abreviado pretende facilitar, ordenar y agilizar el proceso de evaluación. Mediante el número de identificación individual del investigador es posible acceder a los trabajos científicos publicados y a información sobre el impacto de cada uno de ellos. Si considera que este currículum abreviado no recoge una parte importante de su trayectoria, puede incluir voluntariamente el currículum en extenso en la documentación aportada, que será facilitado también a los evaluadores de su solicitud.



CURRICULUM VITAE (CVA)

IMPORTANT – The Curriculum Vitae cannot exceed 4 pages. Instructions to fill this document are available in the website.

Part A. PERSONAL INFORMATION

| | |
|---------|------------|
| CV date | 22/04/2022 |
|---------|------------|

| | | | |
|--|-----------------|-------------------------|--|
| First name | Ana | | |
| Family name | Herrero | | |
| Gender (*) | Female | Birth date (dd/mm/yyyy) | |
| Social Security, Passport, ID number | | | |
| e-mail | aherrero@ubu.es | URL Web | |
| Open Researcher and Contributor ID (ORCID) (*) | | 0000-0001-6126-1907 | |

(*) Mandatory

A.1. Current position

| | | | |
|-------------------|---|---------------------|-----------|
| Position | PTUN | | |
| Initial date | 6/9/2002 | | |
| Institution | University of Burgos | | |
| Department/Center | Chemistry | Faculty of Sciences | |
| Country | Spain | Teleph. number | 947259571 |
| Key words | Experimental Design. Optimization. Food analysis. Environmental Quality. Quality Assurance. Analytical Quality by Design. Validation of Analytical Methods. Multivariate Regression. Multiway Analysis. Liquid Chromatography. Gas Chromatography. UV-Vis Spectrophotometry. Fluorescence Spectrophotometry. ATR-FTIR | | |

A.2. Previous positions (research activity interruptions, art. 14.2.b)

| Period | Position/Institution/Country/Interruption cause |
|--------|---|
|--------|---|

A.3. Education

| PhD, Licensed, Graduate | University/Country | Year |
|-------------------------|--------------------------|------|
| Licenced in chemistry | University of Valladolid | 1991 |
| PhD in Chemistry | University of Burgos | 1996 |

Part B. CV SUMMARY (max. 5000 characters, including spaces)

My research interests are in chemometrics and its application to diverse analytical fields. I have participated in more than thirty regional, national and international projects as a member of the "Chemometrics and Qualimetrics" group of the University of Burgos, which is a "consolidated research unit" (UIC 237) of Castilla y León characterized by its clearly interdisciplinary nature since it comprises researchers from Analytical Chemistry and Statistics and O.R. I have published around 50 research papers in international journals (1119 citations, 386 in the last five years; h-index: 20, i10-index: 36, Source: Google Scholar; 85.4% of the JCR indexed publications in Q1 journals) and has co-written 3 chapters in books. Until now, I have 4 six-year research periods (sexenios), the last one recognized in 2019.

The work of the research group has been funded by regional and national agencies through competitive projects on an ongoing basis. During the last ten years, the various projects I was



involved in provided me training on using n-way methods and coupled instrumentation in the development of analytical methods for pharmacologically active substances, pesticides and migrants, in the regulatory framework of food safety.

The subject of my research has been focused on the optimization of analytical procedures by using the **experimental design methodology, DoE** (screening, response surface, *D*-optimal designs, *ad-hoc* blocked designs) and **multi-objective optimization** techniques (desirability function, Pareto front with parallel coordinates). The more factors and factor levels are considered, the higher the experiments required. This methodology makes it possible to adapt the experimentation in a most efficient way.

In this context, parallel factor analysis (**PARAFAC**) was chosen to approach n-way data due to its capability to detect and handle overlapping and interferences caused by unexpected derivatization artifacts or by unknown interferents in **complex matrices**. The uniqueness property of PARAFAC makes it possible to **identify compounds unequivocally** by their chromatographic and spectral profiles as laid down in some official regulations and guidelines. **PARAFAC2** has been used to solve deviations from trilinearity when small shifts in the retention time appear.

The potential of PARAFAC was explored covering different aspects of target analysis such as the determination of triazines in the presence of non-intentionally added substances (Paper C.1.10), the optimization of the determination of bisphenols and their diglycidyl ethers after migration from **polycarbonate tableware** (C.1.8), the analysis of triazines in **oranges** (C.1.9) and of dichlobenil and its major metabolite (BAM) in **onions** (C.1.7), or polymer additive residues released from **coffee capsules** (C.1.1). The analyses were carried out by **CG/MS** in all these cases and, when necessary, some pre-treatment procedures (**solid phase extraction, dispersive-solid phase extraction, stir bar sorptive extraction...**) were used. The combination of DoE and n-way methods results a truly powerful tool to deal with these issues.

PARAFAC was also useful to study the impact of time and temperature of storage on the spoilage of swordfish and the evolution of biogenic amines by **HPLC-FLD** (C.1.6). In addition, cold chain breaks were detected using PLS-CM based on the biogenic amine profiles in tuna (C.1.4).

More recently, my current research involves developing chromatographic methods by applying the principles of the **AQbD** in the fields of quality assurance and validation. This methodology increases efficiency and reduces workload while guaranteeing the compliance of the results. The strategy that is being used is based on DoE and latent variables model inversion; once the Analytical Target Profile (ATP) is defined, the inversion of the model gives the Control Method Parameters (CMPs). A model-based approach has been developed and used to identify the CMPs related to the composition and flow rate of the mobile phase for the determination with preset quality characteristics of eight triazines in surface waters by means of **SPE-HPLC-DAD** (C.1.2).

The **multidisciplinary character of the group** gives us great capacity to address, on a very solid basis, aspects related both to instrumental analysis methods applied to determinations in complex matrices and to the implementation and development of advanced data analysis techniques.

The work of the research group has impacted on people's health and environment since it provides reliable analytical methods that lead to comply with the current regulations. In addition, using DoE methodology makes it possible to significantly reduce the economic, time and environmental cost of the studies.

The results of the research are disseminated through conference communications and papers, which are open-access published when possible. Pre-prints are available on the [institutional repository](#) of the University of Burgos. The university is also publishing the blog [UBUINVESTIGA](#), where short papers about the results of researches are published.



Part C. RELEVANT MERITS (sorted by typology)

C.1. Publications (see instructions)

1. L. Valverde Som, C. Reguera, **A. Herrero**, L.A. Sarabia, M.C. Ortiz, Determination of polymer additive residues that migrate from coffee capsules by means of stir bar sorptive extraction-gas chromatography-mass spectrometry and PARAFAC decomposition. Food Packaging and Shelf Life 28 (2021) 100664. DOI: [10.1016/j.foodpack.2021.100664](https://doi.org/10.1016/j.foodpack.2021.100664)
2. M.C. Ortiz (CA), L.A. Sarabia, **A. Herrero** et al. (3/9), Partial Least Squares model inversion in the chromatographic determination of triazines in water, Microchemical Journal 164 (2021) 105971. DOI: [10.1016/j.microc.2021.105971](https://doi.org/10.1016/j.microc.2021.105971)
3. M.C. Ortiz (CA), S. Sanllorente, **A. Herrero** et al. (3/10), Three-way PARAFAC decomposition of chromatographic data for the unequivocal identification and quantification of compounds in a regulatory framework, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 200 (2020) 104003, DOI: [10.1016/j.chemolab.2020.104003](https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2020.104003)
4. C. Reguera, S. Sanllorente, **A. Herrero**, L.A. Sarabia y M.C. Ortiz, Detection of cold chain breaks using partial least squares-class modelling based on biogenic amine profiles in tuna. Talanta, 202 (2019) 443-451. DOI: [10.1016/j.talanta.2019.04.072](https://doi.org/10.1016/j.talanta.2019.04.072)
5. J.A. Custodio-Mendoza, A.M. Carro, M.A. Lage-Yusty, **A. Herrero**, I.M. Valente, J.A. Rodrigues y R.A. Lorenzo, Occurrence and exposure of 3-monochloropropanediol diesters in edible oils from Spanish market, Food Chemistry, 270 (2019) 214-222. DOI: [10.1016/j.foodchem.2018.07.100](https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2018.07.100)
6. M.C. Ortiz, S. Sanllorente, **A. Herrero**, C. Reguera y L.A. Sarabia, Impact of time and temperature of storage on the spoilage of swordfish and the evolution of biogenic amines through a multi-way model, Journal of Chemometrics, 32 (2018) e2965. DOI: [10.1002/cem.2965](https://doi.org/10.1002/cem.2965)
7. **A. Herrero**, C. Reguera, M.C. Ortiz, L.A. Sarabia y M.S. Sánchez, *Ad-Hoc* Blocked Design for the Robustness Study in the Determination of Dichlobenil and BAM in Onions by PTV-GC-MS. Journal of Chromatography A, 1370 (2014) 187-199. DOI: [10.1016/j.chroma.2014.10.016](https://doi.org/10.1016/j.chroma.2014.10.016)
8. M.L. Oca, M.C. Ortiz, **A. Herrero** y L.A. Sarabia, Optimization of a GC/MS Procedure that uses Parallel Factor Analysis for the Determination of Bisphenols and their Diglycidyl Ethers after Migration from Polycarbonate Tableware. Talanta, 106 (2013) 266–280. DOI: [10.1016/j.talanta.2012.10.086](https://doi.org/10.1016/j.talanta.2012.10.086)
9. **A. Herrero**, M.C. Ortiz y L.A. Sarabia, D-Optimal Experimental Design coupled with PARAFAC Decomposition a Useful Tool in the Determination of Triazines in Oranges by PTV-GC/MS when Using Dispersive-Solid Phase Extraction. Journal of Chromatography A, 1288 (2013) 111-126. DOI: [10.1016/j.chroma.2013.02.088](https://doi.org/10.1016/j.chroma.2013.02.088)
10. L. Rubio, L.A. Sarabia, **A. Herrero** y M.C. Ortiz (2012) Advantages of a Programmed Temperature Vaporizer Inlet and Parallel Factor Analysis in the Determination of Triazines in the Presence of Non-Intentionally Added Substances by Gas Chromatography. Analytical and Bioanalytical Chemistry, 403, 1131-1143. DOI: [10.1007/s00216-011-5428-y](https://doi.org/10.1007/s00216-011-5428-y)

C.3. Research projects

1. **Erasmus+ 2021-1-ES01-KA220-SCH-000024569**, STEAM in the secondary school with no barriers for blind and visually impaired pupils, Unión Europea. Coordinador: G. Casado (Colegio Aurelio Gómez Escolar, Burgos), 1/11/2021-31/10/2023, 185,426 €. (IP UBU)
2. **BU052P20**, Nuevos desarrollos metodológicos del diseño de experimentos para análisis químicos, bioquímicos y en tecnología analítica de procesos. Junta de Castilla y León. Convocatoria de subvenciones del programa de apoyo a proyectos de investigación



- cofinanciadas por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional. M.C. Ortiz (Universidad de Burgos). 1/11/2020-31/10/2023. 264,000 €. (Investigadora)
3. **Erasmus+ 2018-1-ES01-KA201-049936**, Oenoculture: Start of European enology, prefilloxeric European grapes, Unión Europea. Coordinador: G. Casado (Colegio Aurelio Gómez Escolar, Burgos), 1/9/2018-31/8/2021, 145,651 €. (IP UBU)
 4. **CTQ2017-88894-R**, Nuevas herramientas quimiométricas con variables latentes para la toma de decisiones en tecnología analítica de procesos y en contextos regulados de seguridad alimentaria. Ministerio de Economía, Industria y Competitividad. Programa Estatal De Investigación, Desarrollo e Innovación Orientada a los Retos de la Sociedad. M.C. Ortiz (Universidad de Burgos). 1/1/2018-31/7/2021. 68,970 €. (Investigadora)
 5. **BU012P17**, Herramientas quimiométricas para mejorar la toma de decisiones enmarcadas en la tecnología analítica de procesos y en seguridad alimentaria. Junta de Castilla y León. Convocatoria de subvenciones del programa de apoyo a proyectos de investigación cofinanciadas por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional. M.C. Ortiz (Universidad de Burgos). 2017-2019. 120,000 €. (Investigadora)
 6. **Erasmus+ 2016-1-ES01-KA201-024948**, Oenological Project, Unión Europea. Coordinador: G. Casado (Colegio Aurelio Gómez Escolar, Burgos), 1/9/2016-31/8/2018, 125,790 €. (IP UBU)
 7. **CTQ2014-53157-R**, Plataformas analíticas, basadas en la ventaja de segundo orden, para abordar retos en análisis regulados de contaminantes, test de migración y estudios de degradación. Ministerio de Economía y Competitividad. Programa Estatal de Investigación, Desarrollo e Innovación Orientada a los Retos de la Sociedad. M.C. Ortiz (Universidad de Burgos). 01/01/2015-30/06/2018. 101,640 €. (Investigadora)
 8. **CTQ2011-26022**, Desarrollo de métodos analíticos para residuos veterinarios, pesticidas y migrantes en alimentos de acuerdo con la normativa europea usando diseño de experimentos y PARAFAC. Ministerio de Economía y Competitividad. M.C. Ortiz (Universidad de Burgos). 2012-2014. 91,000 €. (Investigadora)
 9. **BU108A11-2**, Diseño de experimentos y calibrados de n-vías basados en PARAFAC para manejar la información proporcionada por instrumentación acoplada. Desarrollo de métodos para el análisis de residuos veterinarios, pesticidas, monómeros y aditivos en alimentos. Junta de Castilla y León. Convocatoria de subvenciones del programa de apoyo a proyectos de investigación. M.C. Ortiz (Universidad de Burgos). 01/01/2011-15/10/2013. 30,000 €. (Investigadora)
 10. Red temática de Quimiometría. Ministerio de Ciencia e Innovación. Subprograma de acciones complementarias a proyectos de investigación fundamental no orientada. A.M. de Juan (Universitat de Barcelona). 2011-2012. 12,000 €. (Investigadora)

C.5. Final Master's Project on subjects related to the proposed project

1. Rosa María Cobo Zubia. Estudio del envejecimiento de envases plásticos mediante el uso de herramientas estadísticas. 14/09/2021. Máster en Biotecnología y Seguridad Alimentarias.
2. Alvar Martín Valdivielso. Aproximación al análisis multi-vía de plastificantes en filmes de PVC mediante ATR-FTIR y PARAFAC. 11/09/2020. Máster en Química Avanzada.
3. Adrián Torres Andrés. Métodos analíticos empleados en la gestión de agua en la ciudad de Burgos. Aplicación de herramientas estadísticas para el control de parámetros. 05/09/2018. Máster en Química Avanzada.

CURRICULUM VITAE (CVA)

Parte A. INFORMACIÓN PERSONAL

| | | | |
|---|---------------------|---------------------|---|
| | | Fecha del CV | 20/04/2022 |
| Nombre | Joan | | |
| Apellidos | Ferré Baldrich | | |
| Género | Hombre | Fecha de nacimiento | |
| DNI | | | |
| e-mail | joan.ferre@urv.cat | URL Web | http://www.quimica.urv.es/quimio/ |
| Open Researcher and Contributor ID (ORCID) | 0000-0001-6240-413X | | |
| Evaluaciones positivas de periodos de investigación de seis años ("sexenios") | 4 | | |

A.1. Posición actual

| | | | |
|---------------------|--|----------|--------------|
| Posición | Profesor titular | | |
| Fecha inicial | 29/11/2002 | | |
| Institución | Universitat Rovira i Virgili | | |
| Departamento/Centro | Departamento de Química Analítica y Química Orgánica / Facultad de Química | | |
| País | España | Teléfono | +34977559564 |
| Palabras clave | quimiometría, espectroscopia | | |

A.2. Cargos anteriores

| Periodo | Posición/Institución/País |
|-------------------------|---|
| 18/10/1999 – 29/11/2001 | Profesor Titular de Escuela Universitaria (interino) Universitat Rovira i Virgili, España |
| 30/11/2001 – 28/11/2002 | Profesor Titular de Escuela Universitaria. Universitat Rovira i Virgili, España |

A.3. Educación

| | Universidad/País | Año |
|-----------------------|------------------------------|------|
| Licenciado en Química | Universitat Rovira i Virgili | 1993 |
| Doctor en Química | Universitat Rovira i Virgili | 1998 |

Parte B. Resumen

Me licencié en Química en 1993 (Premio Extraordinario de Graduación, Universitat Rovira i Virgili (URV)), defendí mi tesis doctoral en 1998 (URV, Premio Extraordinario de Doctorado) e hice una estancia postdoctoral en la Universidad de Delaware (Estados Unidos) con el Prof. Steven D. Brown (1999). Mi carrera profesional comenzó como profesor titular de escuela universitaria en la URV en el grupo de investigación "Quimiometría, Cualimetría y Nanosensores" (QCN), y en 2002 obtuve mi puesto actual como profesor titular en la URV. Desde 1995 el QCN está reconocido como Grupo de Investigación Consolidado por el Departamento de Investigación de la Generalitat de Catalunya (actualmente a través de la convocatoria de apoyo a grupos de investigación).

Mi investigación es en el campo de la quimiometría y el análisis multivariante. Los temas incluyen calibración multivariante, diseño de experimentos, transferencia de calibración, señal analítica neta y figuras de mérito en calibración, calibración de segundo orden, clasificación multivariante y métodos de especificación para determinar el origen de los alimentos, análisis de datos de *microarrays* de ADN, fusión de datos aplicada a la determinación instrumental de propiedades sensoriales de alimentos, modelado multivariante para control de procesos (PAT) y últimamente el análisis multivariante para la predicción del contenido de nutrientes en piensos y excrementos en animales de granja centrado

en la obtención de formulaciones óptimas de piensos. La investigación se ha combinado con la (co)dirección de cinco tesis doctorales y dos tesis doctorales más que están en curso. La investigación ha sido financiada por proyectos de investigación catalanes, españoles y europeos concedidos en convocatorias competitivas. Deseo destacar dos de ellos en los que fui IP: el proyecto nacional "Evaluación de fiabilidad en métodos de clasificación multivariante" CTQ2007-66918, 2007-2009 y el proyecto europeo "ProPAT: Robust and affordable process control technologies for improving standards and optimizing industrial operations " 2015-2018, ID 637232, convocatoria H2020-SPIRE-2014).

La investigación actual se centra en la implementación de métodos quimiométricos basados en espectroscopia para los procesos de producción. El enfoque no es solo el desarrollo de modelos de prueba de concepto, sino también la transferencia práctica de estos modelos de la academia a la industria, resolviendo los problemas que impiden su implementación para el uso rutinario. En este sentido, soy coautor de una patente (ver C.4) y en 2022 estoy codirigiendo dos tesis doctorales, ambas sobre quimiometría y espectroscopia NIR. Uno busca la implementación en el laboratorio de la refinería de REPSOL de modelos de predicción de propiedades de gasolina y diésel predichos a partir de espectros NIR-MIR (apoyados por un proyecto de investigación de Repsol S.A., ver C.3), y el otro es la predicción de las propiedades nutritivas de los piensos para aves de corral, lo que en última instancia debería facilitar la formulación óptima de piensos. Soy experto en programación de Matlab, lo cual es una importante ventaja competitiva a la hora de implementar nuevos métodos quimiométricos.

Soy (co)autor de 67 artículos científicos (24 en los últimos 10 años) (índice H 26), nueve capítulos de libros y diez artículos de divulgación sobre quimiometría. Además de la participación en congresos internacionales, colaboro regularmente con científicos extranjeros (por ejemplo, el Dr. Nicolaas M. Faber de los Países Bajos, el Prof. Aderval Luna de Brasil y el Prof. John Kalivas de los Estados Unidos). El trabajo realizado ha sido reconocido en **cuatro sexenios de investigación y un sexenio de transferencia** y la actividad docente por cinco evaluaciones de la enseñanza ("quinquenios"). En cuanto a la transferencia de conocimientos, imparto cursos bajo demanda sobre quimiometría (por ejemplo, "Diseño experimental" en Faes Farma S.A. España, 2018 y "Quimiometría", Instituto Nacional de Metrología de Brasil, Brasil, 2014) y tengo contratos regulares de transferencia de conocimiento (durante los últimos 20 años) con Repsol S.A. en los que se ofrece asistencia quimiométrica para el control de productos en línea con NIR en la refinería de Tarragona, los últimos contratos (2021-2022) sobre la implantación de nuevos modelos para gasolina y gasóleo en el laboratorio analítico de la refinería de Tarragona. Otros méritos incluyen: miembro del comité organizador del congreso "Chemometrics in Analytical Chemistry International Conference". Barcelona, 2016, miembro del *Editorial Advisory Board* de la revista *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* (2002-actualidad) y *Fellow* de la IUPAC. Entre las responsabilidades institucionales desempeñadas, he sido miembro de la Junta de Facultad de la Facultad de Química (2009 – hoy), Secretario del Departamento de Química Analítica y Química Orgánica (DQAQO ,2014) y representante del grupo QCN en la Comisión Permanente de la DQAQO (2015-hoy).

Part C. MÉRITOS RELEVANTES

C.1. Publicaciones

A. Cruz-Conesa, J. Ferré, A. M. Pérez-Vendrell, M.P. Callao, I. Ruisánchez. Use of visible-near infrared spectroscopy to predict nutrient composition of poultry excreta. *Animal Feed Science and Technology* 283 (2022) 115169. <https://doi.org/10.1016/j.anifeedsci.2021.115169>

C.Avila, C.Mantzaris, J. Ferré (3 de 11 authors), ... R. A. Bourne. Acid number, viscosity and end-point detection in a multiphase high temperature polymerisation process using an online miniaturised MEMS Fabry-Pérot interferometer. *Talanta* (2021) DOI: 10.1016/j.talanta.2020.121735

S. Sans, J. Ferré, R. Boqué, J. Sabaté, J. Casals, J. Simó Estimating sensory properties with near-infrared spectroscopy: A tool for quality control and breeding of 'Calçots' (*Allium cepa* L.). *Agronomy* (2020) DOI: 10.3390/agronomy10060828

J. Cavaglia, D. Schorn-García, B. Giussani, J. Ferré, O. Busto, L. Aceña, M. Mestres, R. Boqué, ATR-MIR spectroscopy and multivariate analysis in alcoholic fermentation monitoring and lactic acid bacteria spoilage detection. *Food control* (2019). DOI: 10.1016/j.foodcont.2019.106947

J. Cavaglia, B. Giussani, M. Mestres, M. Puxeu, O. Busto, J. Ferré, R. Boqué. Early detection of undesirable deviations in must fermentation using a portable FTIR-ATR instrument and multivariate analysis. *J. Chemometr.* 33 (2019) e3162 DOI: 10.1002/cem.3162

S. Sans, J. Ferré, R. Boqué, J. Sabaté, J. Casals, J. Simó Determination of chemical properties in 'calçot' (*Allium cepa* L.) by near infrared spectroscopy and multivariate calibration *Food Chemistry* 262 (2018) 178-183 DOI: 10.1016/j.foodchem.2018.04.102

J. H. Kalivas, J. Ferré, A. J. Tencate Selectivity-relaxed classical and inverse least squares calibration and selectivity measures with a unified selectivity coefficient. *J. Chemometr.* 31 (2017) DOI: 10.1002/cem.2925

E. Borrás, J. Ferré, R. Boqué, M. Mestres, L. Aceña, A. Calvo, O. Busto Prediction of olive oil sensory descriptors using instrumental data fusion and partial least squares (PLS) regression. *Talanta* 155 (2016) 116-123. DOI: 10.1016/j.talanta.2016.04.040

E. Borrás, J. Ferré, R. Boqué, M. Mestres, L. Aceña, A. Calvo, O. Busto Olive oil sensory defects classification with data fusion of instrumental techniques and multivariate analysis (PLS-DA). *Food Chemistry* 203 (2016) 314-322 DOI: 10.1016/j.foodchem.2016.02.038

E. Borrás, M. Mestres, L. Aceña, O. Busto, J. Ferré, R. Boqué, A. Calvo. Identification of olive oil sensory defects by multivariate analysis of mid infrared spectra. *Food Chemistry* 187 (2015) 197-203 DOI: 10.1016/j.foodchem.2015.04.030

C.2. Congresos

A. Cruz-Conesa, I. Ruisánchez, M. P. Callao, A. M. Pérez-Vendrell, J. Ferré Use of Vis-NIR spectroscopy to predict nutrient composition of poultry excreta. Poster. 20th International Conference on NIR, 17/10/2021, Beijing, China.

A. Cruz-Conesa, J. Ferré, M. P. Callao, A. M. Pérez-Vendrell, I. Ruisánchez. Simultaneous updating of NIR calibration models to predict protein, gross energy, fat and fibre in pig feces using a sample selection algorithm based on D-optimal criterion. poster. 20th International Conference on NIR, 17/10/2021, Beijing, China.

M. S. Rodríguez-Barrios, M. Montragull, E. Ruiz, M. S. Larrechi, J. Ferré. Evidencing the importance of preprocessing NIR spectra to determine the physicochemical properties of diesel using chemometric strategies. poster. 20th International Conference on NIR, 17/10/2021, Beijing, China.

R. de Oliveira, J. Ferré, T. Zampetakis, A. Bianchin, A. de Juan. Data fusion for on-line control of granulometry properties and performance of milling and classification processes. poster. AFACT 30/04/2019, Chester, United Kingdom.

J. Ferré, J. Cavaglia, D. Schorn-García, B. Giussani, O. Busto, L. Aceña, R. Boqué, M. Mestres. Monitoring fermentation problems in wine production using an ATR-FTIR portable spectrometer and multivariate analysis. poster. X Colloquium Chemiometricum Mediterraneum. 12/06/2019, Menorca, España.

C.3. Proyectos de investigación

Analytical Process Technologies (PATs) for the control of wine production (AGL2015-70106-R) MEYC - Ministerio de Economía y Competitividad. PI: Olga Busto Busto, Ricard Boqué Martí. Period:2016-2018. Amount: 91.738 €. Type of participation: Researcher.

ProPAT- Robust and affordable process control technologies for improving standards and optimizing industrial operations (ID 637232, EUROPEAN COMMISSION Horizon 2020 - Research and Innovation Framework Programme H2020-SPIRE-2014). PI: **Joan Ferré Baldrich**. Period: 2015-2018. Amount: 173.336 €. Type of participation: PI

Instrumental sensometry applied to the determination of specifications of origin and quality of foods typical of the Mediterranean diet (AGL2011-26456). Ministerio de Ciencia e Innovación. PI: Olga Busto Busto (URV). Period: 2012-2014. Amount: 100.000 €. Type of participation: Researcher

Specifications of origin and quality of typical Mediterranean diet products (AGL2010-19688). Ministerio de Ciencia e Innovación. PI: Olga Busto Busto (URV). Period: 2011-2012. Amount: 25.000 €. Type of participation: Researcher.

C.4. Contratos, méritos tecnológicos o de transferencia

Contrato con empresa. “Metodología NIR-Repsol 2021 para nuevas propiedades de gasolina y reformado”. Duration: 2021 (5 months). Entidad de realización: Fundación Universitat Rovira i Virgili (FURV). IP: Joan Ferré Baldrich. Entidad financiadora: Repsol S.A. (9.922 €)

Contrato con empresa. “Metodología NIR-Repsol 2020 para nuevas propiedades de gasolina y reformado”. Duration: 2019-2021. Entidad de realización: FURV. PI: Joan Ferré Baldrich. Funding entity: Repsol S.A. (48.000 €).

Contrato con empresa. Aplicaciones de la espectroscopia NIR a la caracterización del diésel. Duración: 2019-2022. Realization entity: FURV. PI: Joan Ferré Baldrich. Entidad financiadora: Repsol S.A. (115.593,60 €).

Contrato con empresa. Validación de modelos de predicción en U-200 (fases 1 and 2) Duración: 2016-2017. Entidad de realización: FURV. IP: Joan Ferré Baldrich. Entidad financiadora: Repsol S.A. (27.600,00 €).

Contrato con empresa. Mantenimiento de la metodología NIR-Repsol (contratos, últimos 10 años). Duración y cuantía: 2021-2022 (39.688 €), 2020-2021 (16.200 €), 2019-2020 (16.200 €), 2018-2019 (16.200 €), 2017-2018 (16.200 €), 2016-2017 (16.200 €), 2015-2016 (16.200 €), 2014-2015 (16.200 €), 2013-2014 (16.200 €), 2012-2013 (16.200 €), 2011-2012 (15.000 €). Entidad de realización: FURV. IP: Joan Ferré Baldrich. Entidad financiadora: Repsol S.A

Patente. J. Ferré (author 4 de 8) et al. Equipos de inspección para la clasificación o discriminación automatizada de almendras en función del procedimiento de concentración e inspección de amigdalina (P201730562, accepted 2019). Solicitante: Arboreto S.A.T Ltda. (Riudoms, Spain).

Curso In-company. “Diseño experimental' (10 h). Faes Farma S.A. (Getxo, Spain), 2018

Curso In-company. “Quimiometría introductoria' (18 h). 2014. Compañía: Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia (INMETRO), Duque de Caxias, Brazil, 2014.



| | | | | |
|--------------------------------------|---------------------------|----------------------|--|------------|
| Parte A. DATOS PERSONALES | | Fecha del CVA | | 21/04/2022 |
| Nombre y apellidos | JOSE MANUEL ANDRADE GARDA | | | |
| DNI/NIE/pasaporte | | Edad | | |
| Núm. identificación del investigador | Researcher ID | | | |
| | Código Orcid | 0000-0003-1020-5213 | | |

A.1. Situación profesional actual

| | | | | |
|-----------------------|--|--------------------|--|------------|
| Organismo | UNIVERSIDAD DE A CORUÑA | | | |
| Dpto./Centro | Dpto. QUÍMICA ANALÍTICA / FACULTAD DE CIENCIAS | | | |
| Dirección | Campus da Zapateira, s/n, 15071 | | | |
| Teléfono | 981167000 | correo electrónico | andrade@udc.es | |
| Categoría profesional | Catedrático de Universidad | | Fecha inicio | 08/06/2011 |
| Espec. cód. UNESCO | 2301-01 2301-08 2391 2301-99 (Quimiometría) | | | |
| Palabras clave | Espectrometría IR, análisis multivariable de datos, medio ambiente | | | |

A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica

Sexenios de Investigación evaluados positivamente: 4 + 1 (Sexenio de Transferencia)

Sexenio 2016-2021 en evaluación

Tesis Dirigidas en los últimos años: 4

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

La **investigación** realizada ha sido evaluada positivamente por la ANECA en todos los tramos posibles, así como por la Agencia Gallega ACSUG, de la cual ha recibido la Evaluación de Excelencia Curricular Investigadora (2007 y 2011). Además, el grupo investigador en el cual se integra (Química Analítica Aplicada, QANAP) y en donde realiza sus actividades investigadoras ha sido evaluado por la XUNTA DE GALICIA (Consellería de Educación y Ordenación Universitaria) y ha sido considerado Unidad de Investigación Competitiva del Sistema Universitario Gallego. Según Resoluciones publicadas en el Diario Oficial de Galicia, «D.O.G.» de 13 de diciembre de 2006; Ref: 2006/50, «D.O.G.» de 24 de marzo de 2008, Ref: 2006/50; «D.O.G.» de 15 de septiembre de 2010, Ref: 2010/52 y . «D.O.G.» de 25 de octubre de 2013, Ref: GRC2013-047. Así mismo, el grupo QANAP fue calificado como A (Excelente, máxima calificación) por la ANEP (Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva) en el área de Química, año 2018.

En total se han publicado 128 trabajos. De ellos, 95 en revistas con índice JCR –de los cuales 79 lo son en revistas del primer cuartil de su especialidad-; 22 en revistas sin índice JCR (o que no lo tuvieron permanente, caso de las revistas españolas Química Analítica y Afinidad) y 8 artículos de divulgación general. De todos ellos puede destacarse la publicación de 4 trabajos en Analytical Chemistry, 1 en Trends in Analytical Chemistry, 3 en Analytical and Bionalytical Chemistry, 16 en Analytica Chimica Acta, 13 en Talanta y 5 en el Journal of Atomic Absorption Spectrometry. Se han presentado un total de 137 comunicaciones a congresos científicos (tanto orales como tipo póster).

Se ha colaborado con investigadores de Alemania, Argentina, Francia, Holanda, Hungría, Italia, México, Portugal, Reino Unido, República Checa y Suecia. Dentro de España se ha colaborado con investigadores de las Universidades de Barcelona, Burgos, Canarias, Granada, Ramón Lull (IQS), Tarragona, Valencia y Vigo. Además, se ha sido miembro de la "Red Temática Nacional de Quimiometría". Parte de estas relaciones se plasmaron en 10 estancias de investigación tanto en España como fuera de ella.

Se han impartido 11 conferencias plenarias en congresos, 15 cursos de formación en empresas y 29 conferencias o cursos breves. De entre estos, cabe destacar los 10 cursos de formación impartidos en



EEUU (Congreso Internacional PITTCON) y los 6 cursos en la Universidad Nacional Autónoma de México.

Ha sido editor de tres libros publicados por la RSC (2) y por World Scientific (Imperial College Press, UK). Se ha participado como autor en 12 capítulos de libros.

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

C.1. Publicaciones, Libros y Capítulos de libros:

J.M. Andrade-Garda (Editor)

“Basic Chemometric Techniques In Atomic Spectroscopy”

Editado por: Royal Society of Chemistry, Reino Unido

Año: 2009; ISBN: 978-0-85404-159-6

J.M. Andrade-Garda (Editor)

“Basic Chemometric Techniques In Atomic Spectroscopy” 2nd Edition

Editado por: Royal Society of Chemistry, Reino Unido

Año: 2013; ISBN: 978-1-84973-796-8

Andrade-Garda, J.M. (Editor)

“Problems of Instrumental Analytical Chemistry: a hands-on guide”

Editado por: World Scientific Publishing Europe, Reino Unido

Año: 2017; ISBN: 978-1-78634-179-2;

M. Gestal Pose, A. Cancela Carollo, J.M. Andrade Garda, M.P Gómez-Carracedo

“Several approaches to variable selection by means of Genetic Algorithms”

Editado por: Idea Group Publishing, Hershey, PA 17033, USA (Editores: J.R. Rabuñal y J. Dorado)

Año: 2006; ISBN: 159140903-9; Capítulo: VII; Páginas: 141-164

I. M. Mackay, S. A. Bustin, J. M. Andrade, M. Kubista and T. P. Sloots

“Quantification of Microorganisms: not human, not simple, not quick”

Editado por: Caister Academic Press (Horizon Press), Reino Unido

Año: 2007; ISBN: 978-1-904455-18-9; Capítulo: V; Páginas: 133-182

M. Gestal y J. M. Andrade

"Evolutionary Approaches to Variable Selection"

Editado por: IGI Global Publishers, Pennsylvania, USA (Information Science Reference)

Año: 2008; ISBN: 978-1-59904-849-9 (hardcover) ; Capítulo: 'E' ; Páginas: 581-588, Encyclopedia of Artificial Intelligence

Gómez-Carracedo, M.P.; Ballabio, D.; Andrade, J.M. ; Fernández-Varela, R.; Consonni, V.

"Applications of Self-organizing Maps to Address Environmental Studies"

Editado por: IGI Global Publishers, Pennsylvania, USA (Information Science Reference)

Año: 2010; ISBN: 978-1-61520-893-7; Capítulo 20 ; Páginas: 331-352

Andrade-Garda, J.M.; Carlosena-Zubieta, A.; Soto-Ferreiro, R.; Terán-Baamonde, J.; Thompson, M.

“Classical Linear Regression by the Least Squares Method”

Editado por: Royal Society of Chemistry, Reino Unido

Año: 2013; ISBN: 978-1-84973-796-8; Capítulo 2 ; Páginas: 52-122

Andrade-Garda, J.M.; Carlosena-Zubieta, A.; Boqué-Martí, R.; Ferré-Baldrich, J.

“Partial Least Squares Regression”

Editado por: Royal Society of Chemistry, Reino Unido

Año: 2013; ISBN: 978-1-84973-796-8; Capítulo 5 ; Páginas: 280-347

Andrade-Garda, J.M.; Gestal-Pose, M.; Cedrón-Santaeufemia, F.A.; Dorado-de-la-Calle, J.; Gómez-Carracedo, M.P.

“Multivariate Regression Using Artificial Neural Networks and Support Vector Machines”

Editado por: Royal Society of Chemistry, Reino Unido

Año: 2013; ISBN: 978-1-84973-796-8; Capítulo 6 ; Páginas: 348-397

Carlosena-Zubieta, A.; Andrade-Garda, J.M.



“Fundamental calculations in Analytical Chemistry”

Editado por: World Scientific Publishing Europe, Reino Unido

Año: 2017; ISBN: 978-1-78634-179-2; Capítulo 1; Páginas: 1-41

Andrade-Garda, J.M.; Gómez-Carracedo, M.P.

“Basic data analysis”

Editado por: World Scientific Publishing Europe, Reino Unido

Año: 2017; ISBN: 978-1-78634-179-2; Capítulo 2; Páginas: 43-142

Andrade-Garda, J.M.; Gómez-Carracedo, M.P.

“Infrared spectrometry”

Editado por: World Scientific Publishing Europe, Reino Unido

Año: 2017; ISBN: 978-1-78634-179-2; Capítulo 4; Páginas: 189-261

C.1.2. Publicaciones, Artículos recientes más recientes:

Ferreiro, B.; Andrade, J.M.; Paz-Quintans, C.; López-Mahía, P.; Muniategui, S.

“New ways for the advanced quality control of liquefied natural gas”

ENERGIES, 2022, 15, 010359

Ferreiro, B.; Andrade, J.; López-Mahía, P.; Muniategui, S.; Vázquez, C.; Pérez, A.; Rey, M.; Vales, C.

“Fast quality control of natural gas for commercial supply and transport utilities”

FUEL, 305, 2021, 121500

Fernández-González, V.; Andrade, J.M.; López-Mahía, P.; Muniategui Lorenzo, S

“Monitorization of polyamide microplastics weathering using attenuated total reflectance and microreflectance infrared spectrometry”.

SPECTROCHIMICA ACTA, PART A, 263, 2021, 120162

López-Rosales, A.; Andrade, J.M.; Grueiro-Noche, G.; Fernández-González, V.; López-Mahía, P.; Muniategui-Lorenzo, S.

“Development of a fast and efficient method to analyse microplastics in planktonic samples”

MARINE POLLUTION BULLETIN, 168, 2121, 112379

Pérez-Beltrán, C.H.; Zúñiga-Arroyo, V.M.; Andrade, J.M.; Cuadros-Rodríguez, L.; Pérez-Caballero, G.; Jiménez-Carvelo, A.M.

“A sensor-based methodology to differentiate pure and mixed white tequilas based on fused infrared spectra and multivariate data treatment”

CHEMOSENSORS, 9, 2021, 47.

Andrade, J.M.; Ferreiro, B.; López-Mahía, P.; Muniategui Lorenzo, S.

“Standardization of the minimum information for publication of infrared-related data when microplastics are characterized”

MARINE POLLUTION BULLETIN, 2020, 154, 11103

León, V.M.; García Agüera, I.; Moltó, V.; Fernández González, V.; Llorca Pérez, L.; Andrade, J.M.; Muniategui Lorenzo, S.; Campillo, J.A.

“PAHs, pesticides, personal care products and plastic additives in plastic debris from Spanish Mediterranean beaches”

SCIENCE OF THE TOTAL ENVIRONMENT, 2019, 670, 672-684

Pérez-Caballero, L.; Andrade, J.M.; Olmos, P.; Molina, Y.; Jiménez, I.; Durán, J.J.;

Fernandez-Lozano, C.; Miguel-Cruz, F.

“Authentication of tequilas using pattern recognition and supervised Classification”

TRENDS IN ANALYTICAL CHEMISTRY, TrAC, 2017, 94, 117-129

Kulakova, V.; Butuzova, L.; Andrade, J.M.; Shevkoplyas, Turchanina, O.

“Characterization of sulfur coal-derived liquids as a source of hydrocarbons to produce chemicals and synthetic fuels”

FUEL, 2016, 184, 314-324

Estévez-Pérez, G.; Andrade, J.M.; R.R. Wilcox

“Bootstrap approach to compare the slopes of two calibrations when few standards are available”

ANALYTICAL CHEMISTRY, 2016, 88, 2289-2295

Fernández Varela, R.; Gómez Carracedo, M.P.; Ballabio, D.; Andrade, J.M.

“The use of diagnostic ratios, biomarkers and 3-way Kohonen neural networks to



monitor the temporal evolution of oil spills”
MARINE POLLUTION BULLETIN, 2015, 96, 313-320

Gómez-Carracedo, M.P.; Andrade, J.M.; Prada, D.
“Differentiation of weathered oils using infrared indexes and self-organizing maps”
FUEL, 2015, 158, 57-65

Terán Bamonde, J. ; Andrade, J.M. ; Soto Ferreiro, R.M. ; Carlosena, A. ; Prada, D.
‘A simple procedure to select a model for mass discrimination correction in isotope dilution inductively coupled plasma mass spectrometry’
JOURNAL OF ANALYTICAL ATOMIC SPECTROMETRY, 2015, 30, 1197-1206

Gómez-Carracedo, M.P.; Andrade, J.M.; Ballabio, D.; Prada, D.; Muniategui-Lorenzo, S.; M. Piñeiro-Iglesias; P. López-Mahía.
“Impact of medium-distance pollution sources in a Galician suburban site (NW Iberian peninsula)”
SCIENCE OF THE TOTAL ENVIRONMENT, 2015, 512-513, 114-124

Besada, V.; Quelle, C.; Andrade, J.M.; Gutiérrez, N.; Gómez-Carracedo, M.P.; Schultze, F.
‘A 10-year survey of trace metals in sediments using self-organizing maps’
JOURNAL OF CHEMOMETRICS, 2014, 28, 558-566

Andrade, J.M.; Estévez-Pérez, G.
“Statistical comparison of the slopes of two regression lines: a tutorial”
ANALYTICA CHIMICA ACTA, 2014, 838, 1-12

C.2. Proyectos

“Alternativas ambientalmente respetuosas para polímeros y sus aditivos químicos en medio acuático (ARPA-ACUA).”

Investigadores responsables del Subproyecto 1: Soledad Muniategui Lorenzo y José Manuel Andrade Garda

IP del proyecto Coordinado: Ricardo Beiras García-Sabell (Estación de Ciencias Mariñas de Toralla (ECIMAT), Universidad de Vigo).

Ministerio de Economía y Competitividad (Programa Estatal de Investigación, Desarrollo e Innovación Orientada a los Retos de la Sociedad, 2016). Financiación FEDER (50%)

Referencia: CTM2016-77945-C3-3-R; 2016-2018

“Defining the baselines and standards for microplastics analyses in European waters (BASEMAN)”

IP del Proyecto Coordinado: Prof. Gunnar Gerdt. Alfred Wegener Institute Helmholtz Centre for Polar and Marine Research (Helgoland, Germany).

IP del WP1 (Defining baselines for all relevant identification approaches): Soledad Muniategui Lorenzo

J.M. Andrade Garda (Investigador del grupo)

Unión Europea: JPI OCEANS JPI on Ecological aspects of microplastics in the marine environment

Ministerio de Economía y Competitividad (Programa Estatal de Investigación, Desarrollo e Innovación Orientada a los Retos de la Sociedad, Convocatoria de 2013 - BOE de miércoles 6 de noviembre de 2013)

Subprograma: Actuaciones de programación conjunta internacional

Referencia: PCIN-2015-170-C02-01; 01/12/2015 – 30/11/2018

“Impacto de microplásticos, contaminantes regulados y emergentes en ecosistemas marinos y establecimiento de sus criterios de calidad ambiental (“IMPACTA”)”

Investigador responsable: del Subproyecto 1: Soledad Muniategui Lorenzo

J.M. Andrade Garda (Investigador del grupo)

IP del Proyecto Coordinado: Instituto Español de Oceanografía (IP Coordinador, Víctor Manuel León)

Ministerio de Economía y Competitividad (Programa Estatal de Investigación, Desarrollo e Innovación Orientada a los Retos de la Sociedad, 2013).

Ref: CTM2013-48194-C3-2-R; desde: 01/01/2014 hasta:31/12/2016

| | |
|---------------|------------|
| Fecha del CVA | 22/04/2022 |
|---------------|------------|

Parte A. DATOS PERSONALES

| | | | |
|--|---|---------------------|--|
| Nombre | M. Asunción | | |
| Apellidos | Alonso Lomillo | | |
| Sexo | Mujer | Fecha de Nacimiento | |
| DNI/NIE/Pasaporte | | | |
| URL Web | https://investigacion.ubu.es/investigadores/34964/detalle | | |
| Dirección Email | malomillo@ubu.es | | |
| Open Researcher and Contributor ID (ORCID) | 0000-0002-5714-3956 | | |

A.1. Situación profesional actual

| | | | |
|-------------------------|----------------------------------|----------|----------------|
| Puesto | Profesora Titular de Universidad | | |
| Fecha inicio | 2011 | | |
| Organismo / Institución | Universidad de Burgos | | |
| Departamento / Centro | Química / Facultad de Ciencias | | |
| País | España | Teléfono | (34) 947258818 |
| Palabras clave | Sensores; Electroanálisis | | |

Parte B. RESUMEN DEL CV

M.A. Alonso Lomillo se licenció en Químicas en la UBU en junio de 1997. En el último año de la licenciatura, obtuvo una beca Erasmus en la Université Libre de Bruxelles, supervisada por el Prof. J.M. Kauffman, donde tuvo el primer contacto con biosensores electroquímicos. Ese mismo curso disfrutó de una beca de colaboración en el Área de Química Analítica de la UBU, bajo la dirección de la Dra. M. Julia Arcos. En diciembre de 1997 presentó la Tesis de Licenciatura "Contribución a la investigación analítica de polifenoles utilizando voltamperometría y biosensores amperométricos" con la calificación de Sobresaliente. En abril de 1998 obtuvo una beca predoctoral de la UBU. Realizó una estancia predoctoral en la Université Libre de Bruxelles, supervisada por el Prof. J.M. Kauffmann, para realizar un estudio electroquímico de algunos antibióticos. En junio de 2000 recibió una beca de la Junta de Castilla y León para la Formación del Personal Investigador, con duración hasta mayo de 2004. Defendió su Tesis Doctoral "Estudio electroquímico de rifamicinas. Aplicación al análisis de fármacos comerciales y muestras biológicas" el 2 de septiembre de 2002, con la calificación de Sobresaliente "Cum laude", Mención de Doctor Europeo y Premio Extraordinario de Doctorado. En septiembre de 2003 se incorporó al grupo de investigación dirigido por el Prof. G.G. Guilbault en el University College Cork, donde adquirió destreza en la fabricación de electrodos serigrafados y en el desarrollo de inmunosensores para la determinación de andrógenos en orina de vacuno. En abril de 2004 realizó una estancia de investigación en el grupo del Dr. F.J. Muñoz en el Instituto de Microelectrónica de Barcelona del CSIC, al que siguió vinculada a través de un contrato de Titulado Superior y desde el 1 de abril de 2005 a través de un contrato I3P-PC2004 doctor. En esta etapa continuó con el desarrollo de microistemas utilizando tanto tecnología serigráfica como de silicio. Desde diciembre de 2005 realizó una estancia en el Instituto de Catálisis y Petroleoquímica del CSIC, en el grupo del Dr. V.M. Fernández. Fruto de la colaboración entre ambos grupos se realizó el trabajo basado en la inmovilización del enzima hidrogenasa sobre microchips de oro con nanotubos de carbono, para su posterior utilización como sensores de hidrógeno y pilas de combustible. En febrero de 2007 se incorporó como Investigadora contratada Ramón y Cajal a la UBU, donde tomó posesión como Profesora Titular de Universidad en diciembre de 2011. Actualmente es responsable del Grupo de Investigación Reconocido SAMS, donde continúa trabajando en la fabricación y caracterización de sensores y biosensores para la determinación de analitos de interés en el sector alimentario, medioambiental y clínico.

Sus trabajos se resumen en 2 Trabajos Académicamente Dirigidos, 19 Trabajos Fin de Grado, 11 Prácticum, 14 Trabajos Fin de Máster, 4 Tesis Doctorales, 72 publicaciones en revistas

internacionales (57 incluidas en el primer cuartil en el año de su publicación), 2 capítulos de libro, 7 patentes de invención y 71 comunicaciones en congresos científicos (3 comunicaciones invitadas y 7 comunicaciones orales). Ha participado en 25 proyectos de I+D+i financiados en convocatorias competitivas (en 7 como investigadora principal), en 9 proyectos con empresas (en 1 como investigadora principal) y en 2 proyectos de innovación docente. Es, además, co-autora de 4 publicaciones docentes y de 14 comunicaciones en congresos orientados a la formación docente. Cuenta con **3 sexenios de investigación**, concedido el último el 13/06/2016 correspondiente al periodo 2010-2015 (cuarto sexenio solicitado, pendiente de resolución), y con 3 quinquenios docentes, concedido el último el 01/01/2018 correspondiente al periodo 2012-2017.

Parte C. LISTADO DE APORTACIONES MÁS RELEVANTES

C.1. Publicaciones más importantes en libros y revistas con “peer review” y conferencias

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

- 1 Artículo científico.** Alonso-Lomillo, M. Asunción (AC); López-Gil, Sheila; del Campo, Javier; Domínguez-Renedo, O.(1/4). 2021. Electrochemical detection of mercaptans in wine using gold nanoparticle-modified carbon electrodes Journal of The Electrochemical Society. ELECTROCHEMICAL SOC INC. 168-8, pp.086509. ISSN 0013-4651. <https://doi.org/10.1149/1945-7111/ac1fae>
- 2 Artículo científico.** Domínguez-Renedo, O.; Navarro-Cuñado, A.M.; Arnaiz-Lozano, V.; Alonso-Lomillo, M.A.(4/4). 2020. Molecularly imprinted polypyrrole based electrochemical sensor for selective determination of 4-ethylphenol Talanta. ELSEVIER SCIENCE BV. 207. ISSN 0039-9140. SCOPUS (9) <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2019.120351>
- 3 Artículo científico.** Domínguez-Renedo, O.; Navarro-Cuñado, A.M.; Ventas-Romay, E.; Alonso-Lomillo, M.A.(4/4). 2019. Determination of aluminium using different techniques based on the Al(III)-Morin complex Talanta. ELSEVIER SCIENCE BV. 196, pp.131-136. ISSN 0039-9140. SCOPUS (15) <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2017.07.015>
- 4 Artículo científico.** Alonso-Lomillo, M.A. (AC); Domínguez-Renedo, O.; Saldaña-Botín, A.; Arcos-Martínez, M.J.(1/4). 2017. Determination of ascorbic acid in serum samples by screen-printed carbon electrodes modified with gold nanoparticles Talanta. ELSEVIER SCIENCE BV. 174, pp.733-737. ISSN 0039-9140. SCOPUS (30) <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2017.07.015>
- 5 Artículo científico.** M. Asunción Alonso-Lomillo (AC); Olga Domínguez-Renedo. (1/2). 2017. Screen-printed biosensors for drug analysis Current Pharmaceutical Analysis. Bentham Science PUBL LTD. 13-2, pp.169-174. ISSN 1573-4129. SCOPUS (11) <https://doi.org/10.2174/1573412912666160922112628>
- 6 Artículo científico.** Lorena del Torno de Román; (AC); Olga Domínguez Renedo; M. Julia Arcos Martínez. (2/4). 2016. Tyrosinase based biosensor for the electrochemical determination of sulfamethoxazole Sensors and Actuators B. Elsevier Science SA. 227, pp.48-53. ISSN 0925-4005. SCOPUS (26) <https://doi.org/10.1016/j.snb.2015.12.053>
- 7 Artículo científico.** Henao-Escobar, W.; del Torno-de Román, L.; Domínguez-Renedo, O.; Alonso-Lomillo, M.A.; Arcos-Martínez, M.J.(4/5). 2016. Dual enzymatic biosensor for simultaneous amperometric determination of histamine and putrescine Food Chemistry. ELSEVIER SCI LTD. 190, pp.818-823. ISSN 0308-8146. SCOPUS (53) <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2015.06.035>
- 8 Artículo científico.** Henao-Escobar, W.; Domínguez-Renedo, O.; Alonso-Lomillo, M.A.; Arcos-Martínez, M.J.(3/4). 2015. Resolution of quaternary mixtures of cadaverine, histamine, putrescine and tyramine by the square wave voltammetry and partial least squares method Talanta. ELSEVIER SCIENCE BV. 143, pp.97-100. ISSN 0039-9140. SCOPUS (21) <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2015.05.047>

C.2. Congresos

- 1 O. Domínguez Renedo; M.A. Alonso Lomillo; A. Calvo Pérez; L. del Torno de Román; M.J. Arcos Martínez. Determination of metals based on electrochemical biosensors. XXXIV REUNIÓN BIENAL DE LA REAL SOCIEDAD ESPAÑOLA DE QUÍMICA. Real Sociedad Española de Química. 2013. España. Participativo - Ponencia oral (comunicación oral).
- 2 M. Asunción Alonso Lomillo; Olga Domínguez Renedo; M. Julia Arcos Martínez. Electrochemical biosensors in the analysis of target compounds in food, pharmaceutical and environmental fields. XXXIV Reunión del GE-RSEQ y XV Encuentro Ibérico de Electroquímica. Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química. 2013. España. Participativo - Ponencia invitada/ Keynote. Congreso.
- 3 A.L. De Lacey; M.A. Alonso Lomillo; O. Rüdiger; V.M. Fernández. Electroodos enzimáticos de carbon para la activación catalítica de hidrógeno. Reunión del Grupo de Electroquímica de la RSEQ. Universidad de Lleida. 2007. España. Participativo - Ponencia invitada/ Keynote.
- 4 M. Asunción Alonso Lomillo.. Resolution of ternary mixtures of rifampicin, isoniazid and pyrazinamide by differential pulse polarography and partial least squares method. II International Conference on New Biomedical Analysis. De Montfort University. 2003. Reino Unido. Participativo - Ponencia invitada/ Keynote.

C.3. Proyectos o líneas de investigación

- 1 **Proyecto**. PID2020-117095RB-I00, Detección electroquímica simultánea de fenoles y mercaptanos en vinos (FEMERVIN). Ministerio de Ciencia e Innovación. M. Asunción Alonso Lomillo. (Universidad de Burgos). 01/09/2021-31/08/2024. 84.700 €. Investigador principal.
- 2 **Proyecto**. BU018G19, Determinación electroquímica de compuestos causantes de defectos organolépticos en vino utilizando sensores basados en líquidos iónicos. Junta de Castilla y León. M. Asunción Alonso Lomillo. (Universidad de Burgos). 02/2019-30/09/2021. 12.000 €. Investigador principal.
- 3 **Proyecto**. TEC2013-40561-P, Serigrafiado de sensores y biosensores electroquímicos en soportes flexibles. Desarrollo de prototipos de dispositivos sensores electrónicos. Ministerio de Economía y Competitividad. Arcos Martínez. (Universidad de Burgos). 01/2014-31/12/2016. 36.000 €. Miembro de equipo.
- 4 **Proyecto**. BU212A12-2, Desarrollo de dispositivos serigrafiados nanoestructurados. Aplicación en sectores de interés: Automoción, textil y alimentario.. Junta de Castilla y León. M^a Julia Arcos Martínez. (Universidad de Burgos). 01/2012-31/12/2014. 30.000 €. Miembro de equipo.
- 5 **Proyecto**. SERIBIO-IPT-2011-1766-010000, Biosensores electroquímicos desechables, basados en la tecnología de serigrafiado - Proyecto SERIBIO.. Ministerio de Ciencia e Innovación, Subprograma INNPACTO. M. Julia Arcos Martínez. (Universidad de Burgos). 05/2011-31/10/2014. 259.360 €. Miembro de equipo.
- 6 **Proyecto**. BU003B08, Desarrollo de biosensores miniaturizados para análisis clínicos, medioambientales y alimentarios.. Junta de Castilla y León. M. Asunción Alonso Lomillo. (Universidad de Burgos). 01/2008-31/12/2009. 9.800 €. Investigador principal.
- 7 **Proyecto**. RYC, Desarrollo de micro y nano biosensores integrados para su aplicación en análisis clínicos.. MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA. M. Asunción Alonso Lomillo. (Universidad de Burgos). 02/2007-31/01/2008. 15.000 €. Investigador principal.
- 8 **Contrato**. Investigación y desarrollo de un sistema multisensor para la monitorización continua y automática de contaminantes de la producción acuícola en aguas saladas que permite la detección, análisis de la información, generación de alarmas y visualización en tiempo real, en entornos móviles mediante sistemas de Cloud Computing (BIO-ACUISENSOR) Dominion Instalaciones y Montajes, S.A.. M. Julia Arcos Martínez. (Universidad de Burgos). 01/2015-01/07/2017. 19.500 €.
- 9 **Contrato**. SERIGRAFIKIT, puesta a punto de sistemas serigrafiados en métodos electroquímicos para el desarrollo de biosensores Biolan Microbiosensores S.L.- Contrato CDTI. (Universidad de Burgos). 06/2010-01/06/2011. 12.711,86 €.

10 Contrato. Investigación de nuevas funcionalidades e inteligencia implementadas en textiles (INFINITEX) Grupo Antolín Ingeniería, S.A. - 5ª Convocatoria Programa CENIT-E. M. Julia Arcos Martínez. (Universidad de Burgos). 01/2009-01/01/2013. 95.000 €.

C.4. Actividades de transferencia de tecnología/conocimiento y explotación de resultados

- 1 Patente de invención.** M. Julia Arcos Martínez; Olga Domínguez Renedo; M. Asunción Alonso Lomillo; Abraham Saldaña Botín. P201631238. Dispositivo electródico para la detección de ácido ascórbico, procedimiento de fabricación y uso de dicho dispositivo. Patente concedida por el procedimiento general de concesión. España. 19/10/2018. Universidad de Burgos.
- 2 Patente de invención.** M. Julia Arcos Martínez; Olga Domínguez Renedo; M. Asunción Alonso Lomillo; Julia Bujes Garrido. P201400313. Dispositivo electródico para la detección de ión cloruro, procedimiento de fabricación y uso de dicho dispositivo. Patente concedida por el procedimiento general de concesión. España. 26/04/2016. Universidad de Burgos.
- 3 Patente de invención.** Begoña Molinero Abad; M. Asunción Alonso Lomillo; Olga Domínguez Renedo; Arrate Jaureguibeitia; M. Julia Arcos Martínez. P201300554. Dispositivo electródico para la detección de sulfitos, procedimiento de fabricación y uso de dicho dispositivo. Patente concedida con examen previo. España. 22/12/2015. Universidad de Burgos.
- 4 Patente de invención.** M. Julia Arcos Martínez; Olga Domínguez Renedo; M. Asunción Alonso Lomillo; Ana Cristina Mendes Dias-Cabral; Filipa Andreia Velez Pires; Francisco Soares Marques; Fernanda da Conceição Dominguez; Sofia Isabel Agular Almeida. PT107029. Dispositivo electródico para la detección de la Glicoproteína B, procedimiento de fabricación y uso de dicho dispositivo. Portugal. 03/07/2015. Universidad de Beira Interior (Portugal) y Universidad de Burgos (España).
- 5 Patente de invención.** Lorena del Torno de Román; M. Asunción Alonso Lomillo; Olga Domínguez Renedo; Arrate Jaureguibeitia; M. Julia Arcos Martínez. 2 484 665. Dispositivo electródico para la detección de ácido glucónico, procedimiento de fabricación y uso de dicho dispositivo. Patente concedida con examen previo. España. 09/03/2015. Universidad de Burgos.
- 6 Patente de invención.** M. Julia Arcos Martínez; Olga Domínguez Renedo; M. Asunción Alonso Lomillo; Laura Asturias Arribas. P201000738. Dispositivo electródico para la detección de cocaína, procedimiento de fabricación y uso de dicho dispositivo. Patente concedida por el procedimiento general de concesión. España. 27/07/2012. Universidad de Burgos.
- 7 Patente de invención.** M. Julia Arcos Martínez; Olga Domínguez Renedo; M. Asunción Alonso Lomillo; Ana Calvo Pérez. P201000737. Dispositivo electródico para la detección de cromo, procedimiento de fabricación y uso de dicho dispositivo. Patente concedida con examen previo. España. 13/07/2012. Universidad de Burgos.

| | | | | |
|--------------------------------------|----------------------------------|----------------------|--|----------|
| Parte A. DATOS PERSONALES | | Fecha del CVA | | 26/04/22 |
| Nombre y apellidos | María de la Cruz Ortiz Fernández | | | |
| DNI/NIE/pasaporte | | Edad | | |
| Núm. identificación del investigador | Researcher ID | Scopus: 7202127568 | | |
| | Código Orcid | 0000-0002-4751-8929 | | |

A.1. Situación profesional actual

| | | | | |
|-----------------------|--|--------------------|----------------|------------|
| Organismo | Universidad de Burgos | | | |
| Dpto./Centro | Facultad de Ciencias | | | |
| Dirección | Plaza Misael Bañuelos s/n | | | |
| Teléfono | 947259571 | correo electrónico | mcortiz@ubu.es | |
| Categoría profesional | CAUN | | Fecha inicio | 16/12/2010 |
| Espec. cód. UNESCO | 120903, 120905, 120909, 230103, 230110, 239100, 230100 | | | |
| Palabras clave | Quimiometría; Diseño de experimentos; Tecnología Analítica de Procesos (PAT); Calidad Analítica Diseñada (AQbD); técnicas N-vías; CG-MS; LC-FLD-DAD; PARAFAC; fluorescencia molecular; residuos veterinarios, pesticidas; migrantes; Autenticación | | | |

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

| Licenciatura/Doctorado | Universidad | Año |
|-------------------------|-------------|------|
| Licenciatura en Química | Valladolid | 1981 |
| Doctorado en Química | Valladolid | 1988 |

A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica

- Núm. tramos investigación reconocidos (CNEAI): 5 (100% de los posibles; último 2015-20)
- Índice h: 33. Núm. Citas Scopus: 3395/1944 últimos 10 años. Research Gate h-index:34
- En Scopus 155 artículos desde 1993 (más de 145 en Q1); 9 cap. libro de ed. Internacional.
- 15 tesis dirigidas/ 4 en los últimos 10 años.
- IP de la Unidad de Investigación Consolidada de la Junta Castilla y León UIC-237.
- IP en 8 proyectos de investigación nacionales/autonómicos competitivos (últimos 10 años).

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

Licenciada en Químicas (1981) por la Universidad de Valladolid y doctora, desde 1988. Mi actividad investigadora se centra en el Análisis Químico y la Quimiometría. Desde el 2000 soy investigadora responsable del Grupo de Quimiometría y Cualimetría (Q&C), grupo interdisciplinar formado por profesores de las Áreas de Química Analítica y Estadística e Investigación Operativa. Del 2012 al 2016 IP del Grupo de Excelencia de la JCYL (GR231) en la actualidad IP de la Unidad de Investigación Consolidada de la JCYL (UIC237, Resolución 9/06/17).

Durante los años, 1988-1994 me formé en el campo de la Quimiometría con el prof. Michele Forina en el Instituto di Analisi e Technologie Farmaceutiche ed Alimentari. Desde 1992 participo como investigadora en proyectos competitivos (4 europeos, 10 nacionales, en 9 de ellos soy IP, 12 autonómicos también como IP y 9 redes temáticas. Los resultados de mi actividad investigadora se resumen en: i) más de 200 publicaciones de las que 155 aparecen en Scopus (145 de ellas en el cuartil Q1 y 9 capítulos en libros); teniendo un índice h igual a 33, ii) 250 comunicaciones a congresos (16 ponencias invitadas), iii) 15 tesis doctorales iv) 74 (TFM, TFG y tesis de licenciatura), v) 40 contratos de investigación I+D+i, con empresas e instituciones (art-83) vi). En el ámbito de la Gestión: Vicedecana de Ordenación Académica (2004-08), soy coordinadora ECTS en Facultad Ciencias.

Cualitativamente, la investigación desarrollada se ha dirigido a aspectos metodológicos novedosos, con resultados originales en análisis de agrupamientos, clasificación, modelado, regresión multivariante-multivía, diseño de experimentos y validación del análisis químico siempre como respuesta a un problema analítico desde el punto de vista de la obtención de información química contenida en los datos. La línea de trabajo desarrollada, incorpora los calibrados multivía al ámbito de los análisis sometidos a regulación (residuos veterinarios,

pesticidas, migrantes), que han de garantizar la identificación inequívoca de los analitos, con especial énfasis en la evaluación de falsas no conformidades y falsas conformidades.

En el campo del diseño de experimentos he colaborado en la implementación de métodos completamente nuevos, basados en algoritmos genéticos, para resolver problemas de metodología experimental, en la construcción del Frente Pareto de soluciones optimales en problemas con muchos factores cuando existen varias respuestas en conflicto. Todo esto se ha desarrollado para diseños de mezclas, superficies de respuesta, diseños con bloqueo y selección de diseños cumpliendo criterios de calidad multirrespuesta.

Esta metodología se está utilizando en: i) en el ámbito de la Tecnología Analítica de Procesos y la Calidad Analítica Diseñada (PAT&AQbD), ii) en el campo de los análisis de residuos veterinarios tóxicos, pesticidas y migrantes en alimentos. El tándem de la técnica multivía PARAFAC (Análisis Paralelo de Factores) con la propiedad de 'segundo orden' y la metodología de diseño de experimentos ha permitido resolver problemas con un coste experimental y medioambiental sostenible y cumpliendo la legislación europea vigente encaminada a proteger la salud del ciudadano.

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES

C.1. Publicaciones *(15 de los, últimos 4 años)*

Campo científico: Química Analítica y Estadística y Probabilidad (11 son Q1, 1 es Q2)

1. M.M. Arce*, S. Sanllorente, S. Ruiz*, M.S. Sánchez, L.A. Sarabia, M.C. Ortiz, Method Operable Design Region obtained with a partial least squares model inversion in the determination of ten polycyclic aromatic hydrocarbons by liquid chromatography with fluorescence detection, *Journal of Chromatography A*, 1657 (2021) 462577
2. M. M. Arce, S. Ruiz, S. Sanllorente, M.C. Ortiz, L.A. Sarabia, M.S. Sánchez, A new approach based on inversion of a Partial Least Squares model searching for a preset analytical target profile. Application to the determination of five bisphenols by liquid chromatography with diode array detector, *Analytica Chimica Acta*, 114 (2021) 338217.
3. O. Valencia, M.C. Ortiz, L.A. Sarabia, Principal Component Regression that minimises the sum of the squares of the relative errors: Application in multivariate calibration models, *Journal of Chemometrics*, e3342 (2021).
4. L. Valverde-Som, C. Regueraa, A. Herreroa, L.A. Sarabiab, M.C. Ortiz, Determination of polymer additive residues that migrate from coffee capsules by means of stir bar sorptive extraction-gas chromatography-mass spectrometry and PARAFAC decomposition, *Food Packaging and Shelf Life* 28 (2021) 100664.
5. M.C. Ortiz, L.A. Sarabia, A. Herrero, C. Reguera, S. Sanllorente, M.M. Arce, O. Valencia, S. Ruiz, M.S. Sánchez, Partial Least Squares model inversion in the chromatographic determination of triazines in water, *Microchemical Journal*, 164 (2021) 105971.
6. M.C. Ortiz, L.A. Sarabia, M.S. Sánchez, A. Herrero., "Quality of Analytical Measurements: Statistical methods for internal validation" (cap. 1.01, pg. 1-52) Ed: Steven Brown, Romà Tauler, Beata Walczak in *Comprehensive Chemometrics (Second Edition)*. Elsevier, 2020, ISBN: 9780444641663
7. M.C. Ortiz, M.S. Sánchez, L.A. Sarabia., "Quality of Analytical Measurements: Univariate regression (cap. 1.03, pg. 71-105, Ed. Steven Brown, Romà Tauler, Beata Walczak in *Comprehensive Chemometrics (Second Edition)*, Elsevier, 2020, ISBN: 9780444641663
8. L.A. Sarabia, M.C. Ortiz, M.S. Sánchez, "Response Surface Methodology" (cap. 1.12, pg. 287-326) Ed. Steven Brown, Romà Tauler, Beata Walczak in *Comprehensive Chemometrics (Second Edition)*, Elsevier, 2020, ISBN: 9780444641663.
9. M.C. Ortiz, S. Sanllorente, A. Herrero, C. Reguera, L. Rubio, M.L. Oca, L. Valverde-Som, M.M. Arce, M.S. Sánchez, L.A. Sarabia, Three-way PARAFAC decomposition of chromatographic data for the unequivocal identification and quantification of compounds in a regulatory framework, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 200 (2020) art.no. 104103.

10. C. Reguera, S. Sanllorente, A. Herrero, L. A. Sarabia, M. C. Ortiz, Detection of cold chain breaks using partial least squares-class modelling based on biogenic amine profiles in tuna, *Talanta*, 202 (2019) 443-451.
11. S. Sanllorente, L. Rubio, M.C. Ortiz, L.A. Sarabia, Signal transfer with excitation-emission matrices between a portable fluorimeter based on light-emitting diodes and a master fluorimeter, *Sensors & Actuators: B. Chemical* 285 (2019) 240-247.
12. M. Hooshiyari, L. Rubio, M. Casale, S. Furlanetto, F. Turrini, L.A. Sarabia, M.C. Ortiz., D-optimal design and PARAFAC as useful tools for the optimization of signals from fluorescence spectroscopy prior to the characterisation of green tea samples, *Food and Analytical Methods*, 12 (2019) 761-772.
13. L. Rubio, L. Valverde-Som, L. A. Sarabia, M.C. Ortiz, The behaviour of Tenax as food simulant in the migration of polymer additives from food contact materials by means of gas chromatography/mass spectrometry and PARAFAC, *Journal of Chromatography A*, 1589 (2019) 18-29.
14. L. Rubio, S. Sanllorente, L.A. Sarabia, M.C. Ortiz, Determination of cochineal and erythrosine in cherries in syrup in the presence of quenching effect by means of excitation-emission fluorescence data and three-way PARAFAC decomposition, *Talanta* (2019) 196, 153-162
15. S. Ruiz, M.C. Ortiz, L.A. Sarabia., M:S. Sánchez, A computational approach to partial least squares model inversion in the framework of the process analytical technology and quality by design initiatives, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 182 (2018) 70-82.

C.2. Proyectos I+D+i competitivos (últimos 10 años)

(BU052P20) Nuevos desarrollos metodológicos del diseño de experimentos para análisis químicos, bioquímicos y en tecnología analítica de procesos.

ENTIDAD FINANCIADORA: Junta de Castilla y León. Dirección General de Universidades e Investigación. Duración: **2020-2023**. IP: M^a Cruz Ortiz Fernández (UIC-237)

(CTQ2017_88894-R) Nuevas herramientas quimiométricas con variables latentes para la toma de decisiones en tecnología analítica de procesos y en contextos regulados de seguridad alimentaria.

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Economía y Competitividad. Dirección General de Proyectos de Investigación; Duración: **2018-2021**, IP: M^a Cruz Ortiz Fernández

(CTQ2014-53157-R) Plataformas analíticas, basadas en la ventaja de segundo orden, para abordar retos en análisis regulados de contaminantes, tests de migración y estudios de degradación.

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Economía y Competitividad. Dirección General de Proyectos de Investigación; Duración: **2015-2017**, IP: M^a Cruz Ortiz Fernández

Análisis multielemental y de nanopartículas mediante FFF-ICP-MS-MS (UBU02)

ENTIDAD FINANCIADORA: Consejería de Educación de la Junta de Castilla y León. (ORDEN EDU/171/2018, de 14 de febrero por la que se resuelve subvención de Infraestructuras en red de Castilla y León cofinanciadas por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional para **2018**. IP: M^a Cruz Ortiz Fernández (UIC-237)

(BU012P17) Título del proyecto: Herramientas quimiométricas para mejorar la toma de decisiones enmarcadas en la tecnología analítica de procesos y en seguridad alimentaria.

ENTIDAD FINANCIADORA: Junta de Castilla y León. Dirección General de Universidades e Investigación. **1/1/2017** hasta **21/10/2019**, IP: M^a Cruz Ortiz Fernández

(CTQ2011-26022/BQU) Desarrollo de métodos analíticos para residuos veterinarios, pesticidas y migrantes en alimentos de acuerdo con la normativa europea usando diseño de experimentos y PARAFAC

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Economía y Competitividad. Dirección General de Proyectos de Investigación; Duración: **2012-2014**, IP: M^a Cruz Ortiz Fernández

(BU108A11-2) Diseño de experimentos y calibrados de n-vías basados en PARAFAC para manejar la información proporcionada por instrumentación acoplada. desarrollo de métodos para el análisis de residuos veterinarios, pesticidas y monómeros y aditivos en alimentos. (30.000 euros); ENTIDAD FINANCIADORA: Junta de Castilla y León. Dirección General de Universidades e Investigación. **1/1/2011 hasta 20/12/2013**, IP: M^a Cruz Ortiz Fernández

(CTQ2008-02264/BQU) Desarrollo de métodos con calibrados PARAFAC para el análisis de residuos veterinarios y plaguicidas en el marco de la legislación europea. (99.000 euros) ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia e Innovación. Secretaría de Estado de Universidades. Dirección General de Programas y Transferencia de Conocimiento. **Del 2008 al 2011**. IP: M^a Cruz Ortiz Fernández

C.3. Contratos I+D+i

TÍTULO CONTRATO: Desarrollo de modelos predictivos aplicado a estudios de estabilidad de dispositivos de respiratorio y consultoría. Empresa: GLAXOSMITHKLINE, S.A.; Tipo contrato: artículo 83 de la LOU. IMPORTE: 3.000 €. Investigador responsable: M.Cruz Ortiz (2 participantes). Fecha: 2005

TÍTULO CONTRATO: Desarrollo de los conceptos naturalidad, frescura y autenticidad de alimentos y su evaluación mediante señales multivariantes. Empresa francesa: SPECTRALYS S.A.; Tipo de contrato: artículo 83. IMPORTE: 2.500 euros. Investigador responsable: M.Cruz Ortiz (2 participantes), Fecha: 15/12/2010 31/12/2011

C.4. Patentes

DENOMINACIÓN: Materiales poliméricos sólidos para la detección fluorogénica de explosivos nitroderivados y utilización de los mismos. Patente de invención (país: España). INVENTORES/AUTORES: J. M. García-Pérez; F. C. García; F. J. Serna; A. Mendía; M. C. Ortiz; L. A. Sarabia; M. A. Muñoz; S. Vallejo; M. Trigo; J. L. Pablos. TITULAR/FECHA: Univ. de Burgos. Núm: **P201400073**, Concesión Examen Previo: 29/01/16

C.5. Tesis Doctorales: últimos 10 años(Doctorado en Química UBU)

TÍTULO: Ensuring analytical quality in regulated markets through multivariate, multiway and DoE strategies. (Sobresaliente cum laude, Mención doctorado internacional). DOCT: María Leticia Oca Casado, 18/03/2022.

TÍTULO: Estrategias quimiométricas aplicadas a técnicas cromatográficas para el análisis de monómeros y aditivos. (Sobresaliente cum laude y premio extraordinario) DOCT: M. M. Arce Antón, 17/02/21.

TÍTULO: Nuevas estrategias basadas en la Quimiometría para la identificación y cuantificación de pesticidas, migrantes y residuos veterinarios con técnicas de fluorescencia molecular y de cromatografía con detección por espectrometría de masas (Sobresaliente cum laude y Premio extraordinario). DOCTORANDO, Laura Rubio Martínez, 11/06/16.

TÍTULO: Utilidad de la Quimiometría para la Autenticación, el Modelado y el Control en Viticultura y Enología. (Sobresaliente cum laude y Premio extraordinario) DOCTORANDO: María Elena Meléndez Álvarez, 21/12/15.

C.6 Cargos de gestión más relevantes.

Vicedecana de ordenación académica de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Burgos desde julio de 2000 a julio de 2004. Coordinadora E.C.T.S. (del 2000 al 2020). Vicepresidenta de la Spanish Chemometrics and Qualimetrics Society (2008-2022).

C.7. Formación de postgrado

Organización y docencia de 17 ediciones de la “Escuela de Quimiometría”, curso de perfeccionamiento de la Universidad de Burgos. Docencia en actividades transversales de la Escuela de Doctorado de la Universidad de Burgos (desde marzo 2014). Cursos de postgrado: “Herramientas quimiométricas para PAT” dirigido a profesionales de la industria organizado por la Red Temática de Quimiometría, Tarragona (julio 2014), Barcelona (julio 2012) y Valencia (2015). Curso de posgrado “Quimiometría alimentaria: Análisis de datos en la industria alimentaria” 11-12 de julio (Módulo I: Inferencia estadística y técnicas multivariantes) y 22-23 de septiembre de 2011 (Módulo II: Diseño de experimentos), dirigido a profesionales de la industria alimentaria, dentro de la Cátedra Tomás Pascual.

| | |
|---------------|------------|
| Fecha del CVA | 22/04/2022 |
|---------------|------------|

Parte A. DATOS PERSONALES

| | | | |
|--|---------------------|---------------------|--|
| Nombre | Olga | | |
| Apellidos | Domínguez Renedo | | |
| Sexo | Mujer | Fecha de Nacimiento | |
| DNI/NIE/Pasaporte | | | |
| URL Web | | | |
| Dirección Email | olgado@ubu.es | | |
| Open Researcher and Contributor ID (ORCID) | 0000-0003-2067-0274 | | |

A.1. Situación profesional actual

| | | | |
|-------------------------|---------------------------------|----------|-----------|
| Puesto | Profesor Titular de Universidad | | |
| Fecha inicio | 2009 | | |
| Organismo / Institución | Universidad de Burgos | | |
| Departamento / Centro | Química / Facultad de Ciencias | | |
| País | España | Teléfono | 947258818 |
| Palabras clave | Sensores; Electroanálisis | | |

A.3. Formación académica

| Grado/Master/Tesis | Universidad / País | Año |
|--------------------------------|--------------------------------|------|
| Tesis de Licenciatura (Tesina) | Universidad de Burgos / España | 1997 |

Parte B. RESUMEN DEL CV

Olga Domínguez cursó la Licenciatura en Química en la Universidad de Burgos (UBU) entre 1991 y 1996. En el último año disfrutó de una beca de colaboración del MEC en el área de Química Analítica de la UBU. En 1997 presentó la tesis de licenciatura titulada: "Determinación de cromo por voltamperometría diferencial de impulsos de redisolución adsorbtiva con diversos complejantes". En 2000, obtuvo el grado de Doctor en la UBU, con la tesis titulada "Especiación de cromo mediante voltamperometría diferencial de impulsos de redisolución adsorbtiva. Aplicación a muestras reales", dirigida por la Dra. M. Julia Arcos Martínez, con la calificación de Sobresaliente "cum laude". Durante el periodo de realización de la tesis doctoral disfrutó de 1 beca predoctoral para la Formación del Personal Investigador concedida por la Junta de Castilla y León (JCyL). Ese mismo año consigue un contrato de Profesora Asociada con el que inició su carrera docente y continuó con su labor investigadora. En 2003 obtiene la acreditación para Profesor Ayudante Doctor de ANECA puesto de trabajo que comenzó a ocupar en octubre de ese año. En 2005 obtiene la evaluación positiva de la actividad docente e investigadora para Profesor Contratado Doctor de ANECA y de ACSUCyL. En 2008 consigue un contrato de Contratado Doctor Fijo y en 2009 toma posesión de una plaza de profesor Titular de Universidad. Su labor investigadora se inició en el grupo de investigación de la UBU liderado por la Dra. Arcos Martínez con la utilización de electrodos de mercurio como electrodos de trabajo. A continuación trabajó en una nueva línea de investigación del grupo basada en el empleo de biosensores enzimáticos con electrodos de diferente naturaleza. Sus primeras experiencias en el desarrollo de estos biosensores son fruto de 2 estancias de investigación, realizadas en 2003 y en 2005 en el laboratorio de Química Analítica Instrumental y Bioelectroquímica de la Universidad Libre de Bruselas, bajo la supervisión del Profesor Jean-Michel Kauffmann con el que ha colaborado en varias publicaciones. Seguidamente trabajó en el diseño y producción de electrodos serigrafados y en su posterior modificación con nanopartículas metálicas y con enzimas inmovilizados, para la generación de sensores desechables y útiles en la determinación sensible y selectiva de diferentes especies de interés, y que han dado lugar a numerosas publicaciones de alto impacto. Actualmente forma parte del Grupo de Investigación Reconocido SAMS de la UBU donde ha iniciado con éxito la puesta a punto de sensores electroquímicos, para la determinación de parámetros de interés

en alimentos, medioambiente y salud empleando electrodos modificados con polímeros de impresión molecular.

Los trabajos de investigación realizados en las distintas etapas se resumen en 4 Tesis Doctorales dirigidas, 85 publicaciones en revistas internacionales (63 Q1), 3 capítulos de libro, 7 patentes de invención, 1 modelo de utilidad y 79 comunicaciones en congresos científicos. Ha participado como investigadora en 23 proyectos de I+D+i financiados en convocatorias competitivas (3 como IP), en 7 proyectos con empresas y en 7 proyectos de innovación docente. Es además co-autora de 6 publicaciones docentes y de 15 comunicaciones en congresos orientados a la formación docente. Además, cuenta con 4 sexenios, el último concedido para el periodo 2015-2020 y 4 quinquenios docentes, el último concedido el 01/01/2022.

Parte C. LISTADO DE APORTACIONES MÁS RELEVANTES

C.1. Publicaciones más importantes en libros y revistas con “peer review” y conferencias

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

- 1 Artículo científico.** M. Asunción Alonso Lomillo; Sheila López Gil; Francisco Javier del Campo García; Olga Domínguez Renedo. (4/4). 2021. Electrochemical detection of mercaptans in wine using gold nanoparticle-modified carbon electrodes. *Journal of the Electrochemical Society*. 168, pp.120351-086509.
- 2 Artículo científico.** (AC); A. Marta Navarro Cuñado; Victor Arnaiz Lozano; M. Asunción Alonso Lomillo. (1/4). 2020. Molecularly imprinted polypyrrole based electrochemical sensor for selective determination of 4-ethylphenol *Talanta*. Elsevier Science BV. 207, pp.120351. ISSN 0039-9140. SCOPUS (5) <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2019.120351>
- 3 Artículo científico.** (AC); A. Marta Navarro Cuñado; Eduardo Ventas Romay; M. Asunción Alonso Lomillo. (1/4). 2019. Determination of aluminium using different techniques based on the Al (III)-morin complex *Talanta*. Elsevier Science BV. 196, pp.131-136. ISSN 0039-9140. SCOPUS (10) <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2018.12.048>
- 4 Artículo científico.** M. Asunción Alonso Lomillo; Olga Domínguez Renedo; Abraham Saldaña Botín; M. Julia Arcos Martínez. (2/4). 2017. Determination of ascorbic acid in serum samples by screen-printed carbon electrodes modified with gold nanoparticles *Talanta*. Elsevier Science BV. 174, pp.733-737. ISSN 0039-9140. SCOPUS (27) <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2017.07.015>
- 5 Artículo científico.** Wilder Henao Escobar; Lorena del Torno de Román; (AC); M. Asunción Alonso Lomillo; M. Julia Arcos Martínez. (3/5). 2016. Dual enzymatic biosensor for simultaneous amperometric determination of histamine and putrescine *Food Chemistry*. ELSEVIER SCI LTD. 190, pp.818-823. ISSN 0308-8146. SCOPUS (47) <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2015.06.035>
- 6 Artículo científico.** Begoña Molinero Abad; M. Asunción Alonso Lomillo; Olga Domínguez Renedo; M. Julia Arcos Martínez. (3/4). 2015. Simultaneous amperometric determination of malic and gluconic acids in wine using screen-printed carbon electrodes *Sensors and Actuators B Chemical*. Elsevier Science S.A.. 211, pp.250-254. ISSN 0925-4005. SCOPUS (6) <https://doi.org/10.1016/j.snb.2015.01.101>
- 7 Artículo científico.** Lorena del Torno de Román; M. Asunción Alonso Lomillo; Olga Domínguez Renedo; Arrate Jaureguibeitia; M. Julia Arcos Martínez. (3/5). 2014. GADH screen-printed biosensor for gluconic acid determination in wine samples *Sensors and Actuators B Chemical*. Elsevier Science S.A.. 192, pp.56-59. ISSN 0925-4005. SCOPUS (11) <https://doi.org/10.1016/j.snb.2013.10.098>

- 8 **Artículo científico.** Begoña Molinero Abad; M. Asunción Alonso Lomillo; Olga Domínguez Renedo; M. Julia Arcos Martínez. (3/4). 2014. Malate quinone oxidoreductase biosensors based on tetrathiafulvalene and gold nanoparticles modified screen-printed carbon electrodes for malic acid determination in wine Sensors and Actuators B Chemical. Elsevier Science S.A.. 202, pp.971-975. ISSN 0925-4005. SCOPUS (17) <https://doi.org/10.1016/j.snb.2014.06.057>
- 9 **Artículo científico.** Begoña Molinero Abad; M. Asunción Alonso Lomillo; Olga Domínguez Renedo; M. Julia Arcos Martínez. (3/4). 2014. Sulfite oxidase biosensors based on tetrathiafulvalene modified screen-printed carbon electrodes for sulfite determination in wine Analytica Chimica Acta. 812, pp.41-44. ISSN 0003-2670. SCOPUS (33) <https://doi.org/10.1016/j.aca.2013.12.041>
- 10 **Artículo científico.** Lorena del Torno de Román; M. Asunción Alonso Lomillo; Olga Domínguez Renedo; M. Julia Arcos Martínez. (3/4). 2013. Gluconic acid determination in wine by electrochemical biosensing Sensors and Actuators B Chemical. Elsevier Science S.A.. 176, pp.858-862. ISSN 0925-4005. SCOPUS (25) <https://doi.org/10.1016/j.snb.2012.10.053>

C.2. Congresos

- 1 Olga Domínguez Renedo; M. Asunción Alonso Lomillo; Lorena del Torno de Román; Ana Calvo Pérez; M. Julia Arcos Martínez. Determination of metals based on electrochemical biosensors. XXXIV REUNIÓN BIENAL DE LA REAL SOCIEDAD ESPAÑOLA DE QUÍMICA. REAL SOCIEDAD ESPAÑOLA DE QUÍMICA. 2013. España. Participativo - Ponencia oral (comunicación oral). Congreso.
- 2 M. Asunción Alonso Lomillo; Olga Domínguez Renedo; M. Julia Arcos Martínez. Electrochemical biosensors in the analysis of target compounds in food, pharmaceutical and environmental fields. XXXIV Reunión del GE-RSEQ y XV Encuentro Ibérico de Electroquímica. Grupo de electroquímica de la Real Sociedad Española de Química. 2013. España. Participativo - Ponencia invitada/ Keynote. Congreso.

C.3. Proyectos o líneas de investigación

- 1 **Proyecto.** PID2020-117095RB-I00, Detección electroquímica simultánea de fenoles y mercaptanos en vinos. Agencia Estatal de Investigación. M. Asunción Alonso Lomillo. (Universidad de Burgos). 01/09/2021-31/08/2024. 84.700 €. Investigador principal.
- 2 **Proyecto.** Y146GI, Sensores en alimentación, medioambiente y salud. Universidad de Burgos. M. Asunción Alonso Lomillo. (Universidad de Burgos). 01/01/2019-31/12/2021. 3.300 €. Miembro de equipo.
- 3 **Proyecto.** BU018G19, Determinación electroquímica de compuestos causantes de defectos organolépticos en vino utilizando sensores basados en líquidos iónicos. Junta de Castilla y León. M. Asunción Alonso Lomillo. (Universidad de Burgos). 10/07/2019-30/09/2021. 12.000 €. Investigador principal.
- 4 **Proyecto.** TEC2013-40561-P, Serigrafiado de sensores y biosensores electroquímicos en soportes flexibles. Desarrollo de prototipos de dispositivos sensores electrónicos. Ministerio de Economía y Competitividad. María Julia Arcos Martínez. (Universidad de Burgos). 2014-2016. 36.000 €. Miembro de equipo.
- 5 **Proyecto.** BU212A12-2, Desarrollo de dispositivos serigrafiados nanoestructurados. Aplicación en sectores de interés: automoción, textil y alimentario. Junta de Castilla y León. M. Julia Arcos Martínez. (Universidad de Burgos). 01/01/2012-31/12/2014. 30.000 €. Miembro de equipo.
- 6 **Proyecto.** SERIBIO-IPT-2011-1766-010000, SERIBIO-Biosensores electroquímicos desechables, basados en la tecnología de serigrafiado. Ministerio de Economía y Competitividad, subprograma INNPACTO. M. Julia Arcos Martínez. (Universidad de Burgos). 04/05/2011-31/12/2014. 259.360 €. Miembro de equipo.
- 7 **Proyecto.** TEC2009-12029, Diseño y producción de sensores y circuitos serigrafiados. Aplicación a la determinación de aminas biógenas. Ministerio de Ciencia e Innovación. M. Julia Arcos Martínez. (Universidad de Burgos). 01/01/2010-31/12/2012. 38.900 €. Miembro de equipo.

- 8 **Contrato**. Puesta a punto de biosensores para la determinación de analitos en agua (BIO-ACUISENSOR) DOMINION INSTALACIONES Y MONTAJES, S.A.. María Julia Arcos Martínez. (Universidad de Burgos). 01/01/2015-01/07/2017. 19.500 €.
- 9 **Contrato**. Puesta a punto de sistemas serigrafiados en métodos electroquímicos para el desarrollo de biosensores BIOLAN MICROBIOSENSORES S.L.. María Julia Arcos Martínez. (Universidad de Burgos). 01/10/2011-01/10/2014. 40.000 €.
- 10 **Contrato**. SERIGRAFIKIT, puesta a punto de sistemas serigrafiados en métodos electroquímicos para el desarrollo de biosensores BIOLAN MICROBIOSENSORES S.L.. María Julia Arcos Martínez. (Universidad de Burgos). 01/06/2010-01/06/2011. 12.711,86 €.

C.4. Actividades de transferencia de tecnología/conocimiento y explotación de resultados

- 1 **Patente de invención**. M. Julia Arcos Martínez; M. Asunción Alonso Lomillo; Olga Domínguez Renedo; Abraham Saldaña Botín. P201631238. Dispositivo electrónico para la detección de ácido ascórbico, procedimiento de fabricación y uso de dicho dispositivo. Patente concedida por el procedimiento general de concesión. España. 19/10/2018. Universidad de Burgos.
- 2 **Patente de invención**. M. Julia Arcos Martínez; M. Asunción Alonso Lomillo; Olga Domínguez Renedo; Julia Bujes Garrido. P201400313. Dispositivo electrónico para la detección de ion cloruro, procedimiento de fabricación y uso de dicho dispositivo. Patente concedida por el procedimiento general de concesión. España. 26/04/2016. Universidad de Burgos.
- 3 **Patente de invención**. Begoña Molinero Abad; M. Asunción Alonso Lomillo; Olga Domínguez Renedo; Arrate Jaureguibeitia; M. Julia Arcos Martínez. P201300554. Dispositivo electrónico para la detección de sulfitos, procedimiento de fabricación y uso de dicho dispositivo. Patente concedida con examen previo. España. 22/12/2015. Universidad de Burgos.
- 4 **Patente de invención**. M. Julia Arcos Martínez; M. Asunción Alonso Lomillo; Olga Domínguez Renedo; Ana Cristina Mendes Diaz-Cabral; Francisco Soares Marques; Sofia Isabel Aguilar Almeida; Fernanda Da Conceicao Domingues; Filipa Andreida Velez Pires. PT 107029. Dispositivo electrónico para la detección de glicoproteína b, procedimiento de fabricación y uso de dicho dispositivo. Portugal. 03/07/2015. Universidad de Beira Interior (Portugal) y Universidad de Burgos (España).
- 5 **Patente de invención**. Lorena del Torno de Román; M. Asunción Alonso Lomillo; Olga Domínguez Renedo; Arrate Jaureguibeitia; M. Julia Arcos Martínez. P201300149. Dispositivo electrónico para la detección de ácido glucónico, procedimiento de fabricación y uso de dicho dispositivo. Patente concedida con examen previo. España. 09/03/2015. Universidad de Burgos.
- 6 **Patente de invención**. M. Julia Arcos Martínez; Olga Domínguez Renedo; M. Asunción Alonso Lomillo; Laura Asturias Arribas. P201000738. Dispositivo electrónico para la detección de cocaína, procedimiento de fabricación y uso de dicho dispositivo. Patente concedida por el procedimiento general de concesión. España. 27/07/2012. Universidad de Burgos.
- 7 **Patente de invención**. M. Julia Arcos Martínez; Olga Domínguez Renedo; M. Asunción Alonso Lomillo; Ana Calvo Pérez. P201000737. Dispositivo electrónico para la detección de cromo, procedimiento de fabricación y uso de dicho dispositivo. Patente concedida con examen previo. España. 13/07/2012. Universidad de Burgos.
- 8 **Modelo de utilidad**. M. Julia Arcos Martínez; Olga Domínguez Renedo. U200600454. Sistema electrónico desechable para análisis electroquímico "in situ" España. 01/09/2006. Universidad de Burgos.

| | |
|---------------|------------|
| Fecha del CVA | 21/04/2022 |
|---------------|------------|

Parte A. DATOS PERSONALES

| | | | |
|--|----------------------|---------------------|--|
| Nombre | María del Sol | | |
| Apellidos | Vega Alegre | | |
| | | Fecha de Nacimiento | |
| DNI/NIE/Pasaporte | | | |
| URL Web | | | |
| Dirección Email | mariasol.vega@uva.es | | |
| Open Researcher and Contributor ID (ORCID) | 0000-0002-3635-7920 | | |

A.1. Situación profesional actual

| | | | |
|-------------------------|---|----------|--|
| Puesto | Catedrática de Universidad | | |
| Fecha inicio | 2020 | | |
| Organismo / Institución | Universidad de Valladolid | | |
| Departamento / Centro | Departamento de Química Analítica / Facultad de Ciencias | | |
| País | | Teléfono | |
| Palabras clave | Otras técnicas analíticas; Toma y tratamiento de muestra; Sensores; Electroanálisis; Quimiometría; Calidad/metrología; Espectrometría atómica; Cromatografía; Espectrometría molecular; Química medioambiental; Análisis del suelo; Química del suelo; Análisis del agua; Protección del medio ambiente; Geoquímica; Hidrología; Control ambiental; Control de pesticidas; Protección de las aguas; Control de polución; Investigación sobre el medio ambiente; Calidad del medio ambiente; Reciclaje de residuos | | |

A.2. Situación profesional anterior (incluye interrupciones en la carrera investigadora - indicar meses totales, según texto convocatoria-)

| Periodo | Puesto / Institución / País |
|-------------|--|
| 1997 - 2020 | Profesor Titular de Universidad / Universidad de Valladolid |
| 1995 - 1997 | Profesor Titular de Universidad interino / Universidad de Valladolid |
| 1990 - 1995 | Ayudante de Universidad / Universidad de Valladolid |
| 1990 - 1990 | Responsable/Jefe de Laboratorio / Industrias Dulciora S.A. |
| 1989 - 1990 | Auxiliar de Laboratorio / Farmaprima S.A. |

A.3. Formación académica

| Grado/Master/Tesis | Universidad / País | Año |
|----------------------------|---------------------------|------|
| Química del Medio Ambiente | Universidad de Valladolid | 1992 |

Parte C. LISTADO DE APORTACIONES MÁS RELEVANTES

C.1. Publicaciones más importantes en libros y revistas con "peer review" y conferencias

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

- Artículo científico.** Edmundo Escareño Juárez; Fernando Jiménez Barredo; Catalina Gascó Leonarte; Ana Isabel Barrado Esteban; Marisol Vega. 2021. Baseline thorium concentration and isotope ratios in topsoil of Zacatecas State, Mexico CHEMOSPHERE. Elsevier. 268-128915, pp.1-8.

- 2 **Artículo científico.** Elena M. Rojo; Irene Piedra; Alicia M. González; Marisol Vega; Silvia Bolado. 2021. Effect of process parameters on the valorization of components from microalgal and microalgal-bacteria biomass by enzymatic hydrolysis *BIORESOURCETECHNOLOGY*. Elsevier. 335-125256, pp.1-11.
- 3 **Artículo científico.** David Marín; Marisol Vega; Raquel Lebrero; Raúl Muñoz. 2020. Optimization of a chemical scrubbing process based on a Fe-EDTA-carbonate based solvent for the simultaneous removal of CO₂ and H₂S from biogas *JOURNAL OF WATER PROCESS ENGINEERING*. Elsevier. 37-101476, pp.1-8.
- 4 **Artículo científico.** Jan Fischer; Javier González-Martín; Pawel Lochyinsky; Hana Dejmková; Karolina Schwarzová-Pecková; Marisol Vega. 2020. Voltammetric study of triazole antifungal agent terconazole on sp³ and sp² carbon-based electrode materials *JOURNAL OF ELECTROANALYTICAL CHEMISTRY*. Elsevier. 863-114054, pp.1-10.
- 5 **Artículo científico.** Edmundo Escareño Juárez; Rafael Pardo; Catalina Gascó Leonarte; Marisol Vega; María Isabel Sánchez Bascónes; Ana Isabel Barrado Olmedo. 2019. Determination of natural uranium by various analytical techniques in soils of Zacatecas State (Mexico) *JOURNAL OF RADIOANALYTICAL AND NUCLEAR CHEMISTRY*. Springer. 319, pp.1135-1144.
- 6 **Artículo científico.** Judit Martín Juárez; Marisol Vega Alegre; Elena Riol Pastor; Raúl Muñoz Torre; Silvia Bolado Rodríguez. 2019. Optimisation of the production of fermentable monosaccharides from algal biomass grown in photobioreactors treating wastewater *BIORESOURCETECHNOLOGY*. Elsevier. 281, pp.239-249.
- 7 **Artículo científico.** Ana Lorenzo Hernando; Javier Ruiz Vegas; Marisol Vega Alegre; Silvia Bolado Rodríguez. 2019. Recovery of proteins from biomass grown in pig manure microalgae-based treatment plants by alkaline hydrolysis and acidic precipitation *BIORESOURCETECHNOLOGY*. Elsevier. 273, pp.599-607.
- 8 **Artículo científico.** Ricardo Saavedra; Raúl Muñoz; María Elisa Taboada; Marisol Vega; Silvia Bolado. 2018. Comparative uptake study of arsenic, boron, copper, manganese and zinc from water by different green microalgae *BIORESOURCETECHNOLOGY*. Elsevier. 263, pp.49-57.
- 9 **Artículo científico.** Elena Giménez Forcada; Marisol Vega Alegre; Susana Timón Sánchez. 2017. Characterization of regional cold-hydrothermal inflows enriched in arsenic and associated trace-elements in the Southern part of the Duero basin (Spain), by multivariate statistical analysis *SCIENCE OF THE TOTAL ENVIRONMENT* 593–594, 211–226, 2017. Elsevier. 593-594, pp.211-226.
- 10 **Artículo científico.** Juan José Jiménez; Beatriz E. Muñoz; María Isabel Sánchez; Rafael Pardo; María Sol Vega. 2016. Fate of the drug chlorpromazine in river water according to laboratory assays. Identification and evolution over time of degradation products. Sorption to sediment *CHEMOSPHERE*. Elsevier. 162, pp.285-292.
- 11 **Artículo científico.** Rosario Soledad Barranquero; Marcelo Varni; Rafael Pardo; Marisol Vega; María Emilia Zabala; Alejandro Ruiz de Galarreta; ;. 2016. Joint interpretation of the hydrochemistry of two neighbouring basins by N-way multivariate methods *ENVIRONMENTAL EARTH SCIENCES*. Springer. 75, pp.335-348.
- 12 **Artículo científico.** Elena Giménez Forcada; Marisol Vega Alegre; ;. 2015. Arsenic, Barium, Strontium and Uranium geochemistry and their utility as tracers to characterize groundwaters from the Espadán-Calderona Triassic Domain, Spain *SCIENCE OF THE TOTAL ENVIRONMENT*. Elsevier. 512-513, pp.599-612.
- 13 **Artículo científico.** Yolanda Castrillejo; Alvaro Vega; Marisol Vega; Prisciliano Hernández; José Antonio Rodríguez; Enrique Barrado; Enrique Barrado Esteban. 2014. Electrochemical formation of Sc-Al intermetallic compounds in the eutectic LiCl-KCl. Determination of thermodynamic properties *ELECTROCHIMICA ACTA*. Elsevier. 118, pp.58-66.
- 14 **Artículo científico.** Rosario Soledad Barranquero; Rafael Pardo; Marcelo Varni; Alejandro Ruiz de Galarreta; Marisol Vega; ;. 2014. Modelling of the groundwater hydrological behaviour of the Languyú creek basin by using N-way multivariate methods *HYDROLOGICAL PROCESSES*. John Wiley & Sons, Ltd.. 28, pp.4743-4755.

- 15 Artículo científico.** Yolanda Castrillejo; Clara de la Fuente; Marisol Vega; Francisco de la Rosa; Rafael Pardo; Enrique Barrado Esteban. 2013. Cathodic behaviour and oxoacidity reactions of samarium (III) in two molten chlorides with different acidity properties: The eutectic LiCl-KCl and the equimolar CaCl₂-NaCl melt ELECTROCHIMICA ACTA. Elsevier. 97, pp.120-131.
- 16 Artículo científico.** Rafael Pardo; Marisol Vega; Enrique Barrado; Yolanda Castrillejo; Isabel Sánchez; Enrique Barrado Esteban. 2013. Three-way Principal Component Analysis as a tool to evaluate the chemical stability of metal bearing residues from wastewater treatment by the ferrite process JOURNAL OF HAZARDOUS MATERIALS. Elsevier. 262, pp.71-82.
- 17 Capítulo de libro.** Elena M. Rojo; Alejandro Filipigh; David Moldes; Marisol Vega; Silvia Bolado. 2022. Potential of microalgae for protein production Algal Biorefineries and the Circular Bioeconomy. Algal Products and Processes. CRC Press. Ch. 4. ISBN 9781032033860.

C.3. Proyectos o líneas de investigación

- 1 Proyecto.** PID2020-113544RB-I00, Recuperación de proteínas y producción de PHA a partir de biomasa generada en plantas de tratamiento de aguas residuales (PROPHACTION). Agencia Estatal de Investigación – Fondos FEDER. Silvia Bolado Rodríguez. (Universidad de Valladolid). 01/09/2021-31/08/2024. 140.000 €.
- 2 Proyecto.** PDC2021-121861-C22, Producción sostenible de bioestimulantes y biopesticidas agrícolas a partir de residuos agroindustriales (GREENFARM). Agencia Estatal de Investigación – Fondos FEDER. Silvia Bolado Rodríguez. (Universidad de Valladolid). 01/12/2021-30/11/2023. 48.300 €.
- 3 Proyecto.** VA068G18, Identificación y modelización quimiométrica de factores naturales y antropogénicos que regulan la movilidad y ecotoxicidad de elementos traza tóxicos y radionucleidos en la listosfera. Junta de Castilla y León. Rafael Pardo Almudí. (Universidad de Valladolid). 04/06/2018-31/12/2020. 12.000 €. Miembro de equipo.
- 4 Proyecto.** CTQ2017-84006-C3-1-R, Caracterización y valorización fraccionada de biomasa algal crecida en plantas de tratamiento de purines (BIOFRACTAL).. Ministerio de Ciencia e Innovación. Silvia Bolado Rodríguez. (Universidad de Valladolid). 01/06/2018-31/12/2020. 139.150 €. Miembro de equipo.
- 5 Proyecto.** VA291U14, Evaluación espacio-temporal de las características físico-químicas de los sedimentos y las aguas de dos cursos tributarios del río Paraná. Secretaría General de Ciencia y Técnica, Universidad Nacional del Nordeste (UNNE). María del Sol Vega Alegre. (Universidad Nacional del Nordeste). 01/01/2015-31/12/2018. 565 €. Coordinador.
- 6 Proyecto.** VA291U14, Movilización de arsénico y otros elementos traza geogénicos en las aguas subterráneas del entorno del río Cega (SE Cuenca del Duero). Elucidación de los procesos de interacción agua-sedimento. Junta de Castilla y León, Consejería de Educación. María del Sol Vega Alegre. (Universidad de Valladolid). 01/01/2015-31/12/2016. 24.415 €. Coordinador.
- 7 Proyecto.** Identificación de factores geoambientales que controlan la distribución de arsénico y otros ETGPT como herramienta de gestión en la planificación hidrológica de masas de agua con riesgo hidrogeotóxico. Ministerio de Ciencia e Innovación. 1. (Instituto Geológico y Minero de España). 01/06/2014-31/05/2016. 47.900 €.
- 8 Proyecto.** CTQ2010-19912, Comportamiento electroquímico de productos de fisión. Aplicación a los procesos de separación piroquímica y descontaminación salina.. Ministerio de Ciencia e Innovación. M^a Yolanda Castrillejo Hernández. 01/01/2011-31/12/2013. 65.000 €.
- 9 Proyecto.** AIB2010PT-00234, Diseño de soportes magnéticos funcionalizados para sistemas de separación y determinación. Desarrollo de sistemas automatizados de flujo con detección voltamperométrica.. MICINN. Enrique Barrado Esteban. (Universidad de Valladolid). 01/01/2011-21/12/2012. 5.000 €.