

CURRICULUM VITAE ABREVIADO (CVA)

Fecha del CVA	08/02/2024
----------------------	------------

Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre	María del Rocío		
Apellidos	Sánchez de Armas		
Sexo		Fecha de nacimiento	
DNI			
Dirección email	rociosa@us.es	URL Web	
Open Researcher and Contributor ID (ORCID) (*)	0000-0002-2384-4893		

A.1. Situación profesional actual

Puesto	Profesora Titular de Universidad		
Fecha inicio	12/07/2021		
Organismo/ Institución	Universidad de Sevilla		
Departamento/ Centro	Departamento de Química Física		
País	España	Teléfono	
Palabras clave	Química teórica y computacional. DFT. Estructura electrónica. Adsorción. Simulación de propiedades magnéticas.		

A.2. Situación profesional anterior

Periodo	Puesto/ Institución/ País / Motivo interrupción
Feb 2021 – Julio 2021	Profesora Titular Interina de Universidad, Universidad de Sevilla
Junio 2018 – Feb 2021	Investigadora Posdoctoral, Universidad de Sevilla (Interrupción de 6 meses por permiso maternal)
Sept 2017 – Junio 2018	Profesora Sustituta Interina, Universidad Pablo de Olavide
Marzo 2016 – Julio 2017	Profesora Sustituta Interina, Universidad de Sevilla (Interrupción de 6 meses por permiso maternal)
Agosto 2013 – Feb 2016	Investigadora Posdoctoral, Universidad de Uppsala, Uppsala, Suecia (Interrupción de 6 meses por permiso maternal)
Junio 2011 – Mayo 2013	Investigadora Posdoctoral, KTH, Estocolmo, Suecia
Nov 2010 – Marzo 2011	Profesora Sustituta Interina, Universidad de Sevilla
Oct 2005 – Sept 2010	Investigadora predoctoral, Universidad de Sevilla

A.3. Formación Académica

Grado/Master/Tesis	Universidad/País	Año
Licenciatura en Ciencias Químicas	Universidad de Sevilla	Octubre 2005
Diploma de Estudios Avanzados	Universidad de Sevilla	Octubre 2007
Doctora por la Universidad de Sevilla	Universidad de Sevilla	Julio 2010

Parte B. RESUMEN DEL CV

- Desde el año 2005 he trabajado en diferentes líneas de investigación dentro del **área de la química teórica y computacional**. En concreto, me he dedicado al **empleo de métodos cuánticos aplicados al tratamiento teórico de una gran variedad de sistemas de interés en Ciencia de Materiales**.
- Poseo un sólido conocimiento de la **Teoría del Funcional de la Densidad y sus aplicaciones** a muy diversos sistemas. Especializada en el estudio de la adsorción de moléculas en superficies, sólidos porosos y nanotubos de carbono, simulación de imágenes de STM, estudio de propiedades magnéticas mediante métodos periódicos, simulación de espectros de absorción de colorantes orgánicos con aplicaciones en celdas solares y simulación de espectros de rayos X, estudio teórico de sistemas complejos, incluyendo moléculas de gran tamaño (como porfirinas o ftalocianinas) y sólidos porosos (MOFs y zeolitas).
- Adscrita actualmente al departamento de Química Física de la Universidad de Sevilla, he llevado a cabo **estancias predoctorales y postdoctorales en distintos centros nacionales y europeos**. He obtenido **becas postdoctorales** en convocatorias competitivas, tanto en España como en el extranjero, financiadas por el Royal Institute of Technology (Estocolmo, Suecia), la Universidad de Uppsala (Uppsala, Suecia) y la Universidad de Sevilla.
- **34 publicaciones en revistas** de alto índice de impacto, pertenecientes en su mayoría al primer cuartil en JCR (Q1). Los trabajos publicados presentan un total de **1080 citas**, alcanzando un **índice h de 15**. 25 aportaciones a congresos internacionales, incluyendo posters (17), comunicaciones orales (6) y 1 ponencia invitada.
- Participación en **12 proyectos financiados en convocatorias competitivas** tanto en España como en el extranjero. **Investigadora principal** de un proyecto financiado por la Junta de Andalucía con 69280 euros.
- Durante mis dos estancias postdoctorales en el extranjero he contribuido a la formación de los estudiantes de los grupos en los que he estado, mediante la participación en reuniones de grupo y reuniones personales con los estudiantes. En España, he impartido más de **1200 horas de docencia** (de tipo teórica, práctica y teórico-práctica) desde el curso 2006/07, abarcando 14 asignaturas diferentes pertenecientes al área de la química física y la química general en 2 universidades distintas. Además, he dirigido 4 trabajos de fin de grado de estudiantes del Grado en Química y del Grado en Farmacia (US) y actualmente superviso una tesis doctoral.
- Amplia experiencia en **tareas de evaluación de la investigación**, mediante la revisión de artículos científicos en revistas de alto índice de impacto, revisión de proyectos para convocatorias competitivas y participando en tribunales de tesis.
- Mantengo **colaboraciones activas** con grupos experimentales y teóricos como el grupo de la Prof. Sofía Calero (Universidad Pablo de Olavide), la Prof. Barbara Brena (Universidad de Uppsala), el Dr. Enrique Burzuri (Instituto IMDEA-Nanociencia) y la Dra. Ioanna Mantouvalou (Technische Universität Berlin).
- 2 quinquenios de docencia y 2 sexenios de investigación concedidos.

Parte C. LISTADO DE APORTACIONES MÁS RELEVANTES (últimos 10 años)

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

- R. Sánchez-de-Armas, I. Jaber El Lala, C. J. Calzado. **How complex-surface interactions modulate the spin transition of Fe(II) SCO complexes supported on metallic surfaces?** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2023**, *25*, 21673-21683. (<https://doi.org/10.1039/D3CP02539J>). 1cita.
- D. Arias-Olivares, R. Sánchez-de-Armas, C. J. Calzado. **Theoretical approach to the one-step versus two-step spin transitions in Hofmann-like Fell SCO metal-organic frameworks.** *Materials Today Chemistry*, **2023**, *30*, 2468-5194. (Q1) (<https://doi.org/10.1016/j.mtchem.2023.101489>)
- R. Sánchez-de-Armas, C. J. Calzado. **Spin-crossover Fe(II) complexes on surface: the mixture of low-spin and high-spin molecules at low temperature from quantum-chemistry calculations.** *Inorg. Chem. Front.*, **2022**, *9*, 753-760. (Q1) (<https://doi.org/10.1039/D1QI01487K>). 4 citas.
- R. Sánchez-de-Armas, N. Montenegro-Pohlhammer, A. Develioglu, E. Burzurí, C. J. Calzado. **Spin-crossover complexes in nanoscale devices: main ingredients of the molecule–substrate interactions.** *Nanoscale*, **2021**, *13*, 18702-18713 (Q1) (<https://doi.org/10.1039/D1NR04577F>) 9 citas.
- J. Villalva, A. Develioglu, N. Montenegro-Pohlhammer, R. Sánchez-de-Armas, A. Gamonal, E. Rial, M. García-Hernández, L. Ruiz-González, J. Sánchez Costa, C. J. Calzado, E. Pérez, E. Burzuri. **Spin-state-dependent electrical conductivity in single-walled carbon nanotubes encapsulating spin-crossover molecules.** *Nat Commun* **2021**, *12*, 1578. (Q1, D1) (<https://doi.org/10.1038/s41467-021-21791-3>). 37 citas.
- N. Montenegro-Pohlhammer, R. Sánchez-de-Armas, C. J. Calzado. **Deposition of the spin crossover fell–pyrazolyborate complex on Au(111) surface at the molecular level.** *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 712-723. (Q1). <https://doi.org/10.1002/chem.202003520>. 9 citas.
- Jonas, K. Dammer, H. Stiel, B. Kanngiesser, R. Sánchez-de-Armas, I. Mantouvalou. **Transient Sub-nanosecond Soft X-ray NEXAFS Spectroscopy on Organic Thin Films.** *Anal. Chem.* **2020**, *92*, 15611–15615. (Q1, D1). <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.0c03845>. 5 citas.
- González-Galán, A. Luna-Triguero, J.M. Vicent-Luna, A.P. Zaderenko, A. Sławek, R. Sánchez-de-Armas, S. Calero. **Exploiting the π -bonding for the separation of benzene and cyclohexane in zeolites.** *Chem. Eng. J.* **2020**, *398*, 125678. (Q1, D1). <https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.125678>. 19 citas.
- Luna-Triguero, A. Sławek, R. Sánchez-de-Armas, J. J. Gutiérrez-Sevillano, C. O. Ania, J. B. Parra, J. M. Vicent-Luna, S. Calero. **π -Complexation for Olefin/Paraffin Separation using Aluminosilicates.** *Chem. Eng. J.* **2020**, *380*, 122482. (Q1, D1). <https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.122482>. 24 citas.
- R. Sánchez-de-Armas, N. Cruz-Hernández, C. J. Calzado. **Copper–nitroxide based breathing crystals: a unified mechanism of gradual magnetostructural transition supported by quantum chemistry calculations.** *Inorg. Chem. Front.* **2019**, *6*, 1228-1237. (Q1, D1). <https://doi.org/10.1039/C9QI00129H>. 5 citas.
- Luna-Triguero, J. M. Vicent-Luna, A. Poursaeidesfahani, T. J. H. Vlugt; R. Sánchez-de-Armas, P. Gomez-Alvarez, S. Calero. **Improving Olefin Purification Using Metal Organic Frameworks with Open Metal Sites.** *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2018**, *10*, 16911–16917. (Q1, D1). <https://doi.org/10.1021/acsami.8b04106>. 24 citas.



- R. Sánchez-de-Armas, N. Cruz-Hernández, C. J. Calzado. **Light-induced spin transitions in copper-nitroxide-based switchable molecular magnets: insights from periodic DFT+U calculations.** *Chem. Eur. J.* **2018**, 24,1–11. (Q1). <https://doi.org/10.1002/chem.201803962>. 3 citas.
- R. Marcos, L. Xue, R. Sánchez-de-Armas, M. S. G. Ahlquist. **Bicarbonate Hydrogenation Catalyzed by Iron: How the Choice of Solvent Can Reverse the Reaction.** *ACS Catal.* **2016**, 6, 2923–2929. (Q1, D1). <https://doi.org/10.1021/acscatal.6b00071>. 24 citas.
- R. Sánchez-de-Armas, B. Brena, I. Rivalta, C. M. Araujo. **Soft X-ray Spectroscopic Properties of Ruthenium Complex Catalyst under CO₂ Electrochemical Reduction Conditions: A First-principles Study.** *J. Phys. Chem. C* **2015**, 119, 22899–22907. (Q1) <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b05626>. 2 citas. *Corresponding autor.* 2 citas.
- R. Sánchez-de-Armas, L. Xue, M. S. G. Ahlquist. **One Site is Enough – A Theoretical Investigation of Iron Catalyzed Dehydrogenation of Formic Acid.** *Chem. Eur. J.* **2013**, 19, 11869–11873. (Q1). <https://doi.org/10.1002/chem.201301970>. 27 citas

C.2. Congresos. Solo se detallan las comunicaciones orales.

- D. Arias-Olivares, R. Sánchez-de-Armas, C. J. Calzado. Magnetic Behaviour of Encapsulated Single Molecule Magnets. “European Workshop on Theoretical Approaches of Molecular Magnetism”, Erquy, Francia, **2022**. (comunicación oral)
- C. J. Calzado; N. Cruz Hernández; R. Sánchez-de-Armas. Modeling of hybrid organic-inorganic systems: spin transitions in copper-nitroxide based switchable molecular magnets. “5th International Conference on Materials Science (ICMS 2019)”, Valdivia, Chile, **2019**. (comunicación oral)
- K. Witte; I. Mantouvalou; R. Sánchez-de-Armas; H. Lokstein; J. Lebendig-Kuhla; A. Jonas; F. Roth; B. Kanngießer; H. Stiel. A Carbon K-edge NEXAFS Study of the Chlorophyll Derivative Sodium Copper Chlorophyllin and its Breakdown Products. “XAFS 2018 - 17th International Conference on X-ray Absorption Fine Structure”, Cracovia, Polonia, **2018**. (comunicación oral)
- L. Tavares Costa, R. Sánchez-de-Armas, G. B. Damas, J. L. Lima de Jesus Silva, B. Brena, C. M. Araujo. Combining Molecular Dynamics Simulations and First-principles Calculations to Understand the Structural and Spectroscopy Properties of Ru-based CO₂ Reduction Electrocatalyst in Aqueous Environment. “XV Brazilian MRS Society Meeting”, Campinas, Brasil, **2016**. (comunicación oral)
- K. Witte, I. Mantouvalou, A. Jonas, J. Lebendig, W. Martyanov, D. Grötzsch, R. Sánchez-de-Armas, R. Jung, H. Stiel, B. Kanngießer. Single shot NEXAFS investigations of biological samples in the soft X-ray region using a Laser Produced Plasma Source. “39th International Conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics (VUVX2016)”, Zurich, Suiza, **2016**. (comunicación oral)
- B. Brena, H. Herper, J. Lüder, R. Sánchez de Armas, O. Eriksson, B. Sanyal. Intermolecular magnetic interactions in phthalocyanine sandwiches. “ecoss 31”, Barcelona, 2015. (comunicación oral)

C.3. Proyectos o líneas de investigación en los que ha participado.

- Moléculas magnéticas en interacción con sustratos (PID2021-127674NB-I00). Plan Estatal 2021-2023 Proyectos Investigación no Orientada. 01/012019 – hoy. **Equipo de investigación**



- Sensores magnéticos basados en sólidos porosos: mejora de las propiedades magnéticas a través de la adsorción en el poro (US-1380922). Proyectos de I+D+i en el marco del programa operativo FEDER Andalucía 2014-2020. 01/01/2022 – 31/05/2023. 69280 euros. **Investigadora Principal.**
- Dispositivos moleculares desde el punto de vista de la química cuántica (PGC2018-101689-B-I00). Plan Estatal 2017-2020 Generación Conocimiento. 01/01/2019 – 30/09/2022. **Equipo de investigación**
- Transiciones de Spin, Fotomagnetismo y Conductividad en Materiales Multifuncionales: Estructura Electrónica, Mecanismos de Transición y Activación Óptica y Térmica. (CTQ2015-69019-P) Plan Estatal 2013-2016 Excelencia - Proyectos I+D. 15/07/2016 – 30/09/2019. **Equipo de trabajo.**
- Interaction of organofunctional silanes with TiO₂. Gender Equality Call, 2014. Dpto de Física y Astronomía, Universidad de Uppsala. 25000 euros. 1/01/2014 – 31/12/2014. **Investigadora principal**
- Simulación de Catalizadores: Nanopartículas de Metales y Óxidos Metálicos Depositadas en un Soporte: Estructura, Propiedades Electrónicas y Actividad Catalítica (MAT2012-31526). Ministerio de Economía y Competitividad. 1/01/2013 – 31/12/2015. **Investigadora.**
- Mechanistic Investigations of Solar Fuel Catalysts by Theoretical Methods. (Vetenskapsrådet diariennr. 2010-4909) Swedish Research Council. 1/06/2011 – 31/12/2014. **Investigadora.**