

Fecha del CVA	21/05/2026
---------------	------------

Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre	M ^a PAZ		
Apellidos	FERNÁNDEZ DE LIENCRE DE LA TORRE		
Sexo	██████	Fecha de Nacimiento	
DNI/NIE/Pasaporte			
URL Web			
Dirección Email			
Open Researcher and Contributor ID (ORCID)	0000-0003-3831-3427		

A.1. Situación profesional actual

Puesto	Profesora Titular de Universidad		
Fecha inicio	2001		
Organismo / Institución	Universidad de Jaén		
Departamento / Centro	Química Física y Analítica / Facultad de Ciencias Experimentales		
País	España	Teléfono	
Palabras clave	Polímeros conductores; Teoría del funcional de la densidad; Simulaciones; Propiedades eléctricas; Propiedades ópticas; Química física de materiales; Química computacional; Espectroscopía		

Parte B. RESUMEN DEL CV

La actividad investigadora comenzó en la Universidad de Granada con los trabajos de tesina de licenciatura (1989) y tesis doctoral (1993) sobre el estudio cinético y mecanismo de reacciones de nitrosación de derivados de aminas con uso terapéutico y otros compuestos derivados, ingeridos o presentes en la dieta. Fue becaria en un contrato de colaboración de investigación (1989-1990) firmado entre la UGR y Boehringer Ingelheim S.A. y fue seleccionada para firmar un contrato como Profesora Contratada a Tiempo Parcial en Química Física (1990 a 1993) en la UGR. Realizó una estancia postdoctoral en la Universidad de Salamanca (1994) en el grupo del Prof. J. Casado. Durante este período su trabajo de investigación se centró en ampliar el conocimiento de la cinética de las reacciones de nitrosación de aminas terapéuticas y componentes fenólicos debido a las actividades cancerígenas o mutagénicas de sus derivados nitrosados. En 1993 obtuvo un contrato a tiempo completo en la Universidad de Jaén (UJA) y en 2001 obtuvo una plaza permanente como Profesora Titular de Química Física. Ha ocupado el puesto de Vicedecana de Química en la Facultad de Ciencias Experimentales de la UJA (2008-2011). En 1995 inició una nueva investigación en el campo del análisis vibracional mediante el uso combinado de Química Computacional y técnicas de Espectroscopía Vibratoria (IR y Raman) y de dispersión inelástica de neutrones (INS). Realizó varias estancias de investigación en la Universidad Eötvös Loránd de Budapest (Hungría) (1995) con el Prof. G. Fogarasi para realizar cálculos mecánico-cuánticos e interpretar los espectros vibracionales de sistemas moleculares mediante el método SQM, en el Instituto Laue Langevin (Grenoble, Francia) (1997) para realizar experimentos de difracción de neutrones y su análisis, y dos visitas al Laboratorio Rutherford Appleton (Reino Unido) para registro y análisis de espectros de dispersión inelástica de neutrones. Estas estancias de investigación le permitieron realizar análisis estructurales y vibracionales de compuestos orgánicos y algunos complejos metálicos con diversas aplicaciones. Desde 2007, su investigación se ha centrado en la caracterización teórica mediante la Teoría del Funcional de la Densidad de nuevos semiconductores orgánicos pi-conjugados con propiedades electrónicas y de transporte de carga mejoradas, que son de interés en Electrónica Orgánica. En esta línea de investigación, ha participado en dos propuestas de colaboración con el Dr. Yi Liu del Molecular Foundry, Lawrence Berkeley National Laboratory (EE.UU.) en las que los cálculos TD-DFT permitieron validar varias hipótesis de relación estructura-propiedad sobre algunos polímeros conjugados

semiconductores. Posteriormente, esta línea se ha ampliado al estudio de las propiedades luminiscentes de varios sistemas químicos con aplicaciones tecnológicas y biológicas como OLED, VLC (Visible Light Communication), láseres orgánicos o sensores químicos. Está interesada en resaltar los mecanismos que causan el cambio en las propiedades fotofísicas de los compuestos luminiscentes en varias condiciones ambientales, como la relajación vibracional no radiativa, AIE (Emisión Inducida por Agregación) o la transferencia intramolecular de protones en estado excitado ESIPT). La investigación más reciente se ha centrado en el estudio de la estructura molecular y las propiedades emisivas de nuevas sondas luminiscentes orgánicas con propiedades fotofísicas ajustables, como oligo(estiril)bencenos, indolazinas o arilvinilpirimidinas. Ha publicado 53 artículos de investigación publicado en revistas JCR y un capítulo de libro con un número total de citas de 644 e índice h: 16 (Scopus), ha presentado 70 comunicaciones en congresos nacionales e internacionales y ha participado en 10 proyectos de investigación financiados a nivel regional y nacional. Ha recibido 4 sexenios de investigación positivos (última 2016-2021), 6 quinquenios docentes positivos y 5 evaluaciones autonómicas positivas. Es miembro del grupo de investigación PAIDI-FQM337 Estructura y Dinámica de Sistemas Químicos, y también es miembro de la Real Sociedad Española de Química y de los grupos especializados Química y Computación GEQC y Nanociencia y Materiales Moleculares GENAM. Ha participado en eventos de divulgación científica como la Semana de la Ciencia y Ciencia para Todos, y fue nombrada Comisionada del Año Internacional de la Química en 2011 en la UJA.

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 citaciones

- 1 **Artículo científico.** Luis Crovetto; (2/8) M. Paz Fernández-Lienres; Elena Villegas-Garcia; Jodie Henningway; M. Dolores Giron; Ramon Rios; Amparo Navarro; Jose M. Paredes. 2026. Anti-Kasha fluorescence for polarity detection in cellular compartments. *Dyes and Pigments*. 246, pp.113413.
- 2 **Artículo científico.** Antonio Cuesta-Casas; (2/5) M. Paz Fernández-Lienres; Juan Tolosa Barrilero; Amparo Navarro; Joaquín C. García-Martínez. 2026. Trapping-induced emission in polymers and supramolecular Networks: Unlocking fluorescence in non-emissive molecules. *Materials Today Chemistry*. 53, pp.103489.
- 3 **Artículo científico.** Gonçalo Pedro; Georgi M. Dobrikov; Atanas Kurutos; et al; Carlos Lodeiro; (5/9) M. Paz Fernández-Lienres. 2026. Water-induced aggregation governing fluorescence and metal recognition in dansyl-pyridine containing chemosensors. *Inorganic Chemistry Communications*. 188, pp.116546.
- 4 **Artículo científico.** Antonio Cuesta-Casas; Victor Vazquez-Villar; Ana Sousa-Herves; et al; Joaquín C. García-Martínez; (4/9) M. Paz Fernández-Lienres. 2025. Fluorescent gels: Immobilization of non-fluorescence molecules beyond the aggregation induced emission. *European Polymer Journal*. 229, pp.113865.
- 5 **Artículo científico.** Eva M. García-Frutos; (2/7) Javier Álvarez-Conde; M. Paz Fernández-Lienres; Sonia B. Jiménez-Pulido; Cristina Martín; Amparo Navarro; Juan Cabanillas-González. 2025. Lasing in Crystals Based on 7-Azaindole-Phenylhydrazone Organoboron Compounds. *Advanced Functional Materials*. pp.2402859.
- 6 **Artículo científico.** Clément Diguët; Amparo Navarro; (3/9) M. Paz Fernández-Lienres; et al; Sylvain Achelle. 2025. Synthesis and photophysical properties of 6-aryl-2,4-bis(2'-hydroxyphenyl)pyrimidines ligands and their boron fluoride complexes. *Dyes and Pigments*. ELSEVIER. 236, pp.112660.

- 7 **Artículo científico.** Fernando J. de Lera-Garrido; Víctor Vázquez-Villar; (3/7) M. Paz Fernández-Liencres; Antonio Sánchez-Ruiz; Amparo Navarro; Juan Tolosa; Joaquín C. García-Martínez. 2024. Design of large Stokes shift fluorescent ortho-bis-styrylbenzenes. Optical characterization and fluoride sensing in logical gates. *Dyes and Pigments*. 225, pp.112035.
- 8 **Artículo científico.** Rodrigo Plaza-Pedroche; (2/7) M. Paz Fernández-Liencres; Sonia B. Jiménez-Pulido; Nuria A. Illán-Cabeza; Sylvain Achelle; Amparo Navarro; Julián Rodríguez-López. 2024. Tunable Emission and Structural Insights of 6-Arylvinyl-2,4-bis(2'-hydroxyphenyl)pyrimidines and Their O₃N₂O-Chelated Boron Complexes. *ACS Applied Optical Materials*. 2, pp.2051-2066.
- 9 **Artículo científico.** Teresa Antón-Cánovas; Sylvain Achelle; (3/6) M. Paz Fernández-Liencres; Amparo Navarro; Francisco Alonso; Julián Rodríguez-López. 2023. Acidochromism of amino-substituted indolizine chromophores: Towards white light emission. *Journal of Molecular Liquids*. Elsevier B.V.. 380, pp.121758.
- 10 **Artículo científico.** Fernando de Lera-Garrido; Rocío Domínguez (; (3/11) M. Paz Fernández-Liencres; et al; Amparo Navarro. 2023. Effect of bulky side groups on photophysical properties and electroluminescent performance of oligo(styryl)benzenes. *Dyes and Pigments*. 213, pp.111179.
- 11 **Artículo científico.** Rodrigo Plaza-Pedroche; (2/7) M. Paz Fernández-Liencres; Sonia B. Jiménez-Pulido; Nuria Illán-Cabeza; Sylvain Achelle; Amparo Navarro; Julián Rodríguez-López. 2022. Excited-State Intramolecular Proton Transfer in 2-(2'-Hydroxyphenyl)pyrimidines: Synthesis, Optical Properties, and Theoretical Studies. *Applied Materials and Interfaces*. Article ASAP. DOI: 10.1021/acsami.2c05439.
- 12 **Artículo científico.** (1/9) M.P. Fernández-Liencres; M. Moral-Muñoz; Z. Yilin; et al; B.Z. Tang. 2020. Unraveling the photophysical and semiconducting properties of color converter luminogens with aggregation induced emission characteristics. *Journal of Materials Chemistry C*. 8, pp.16757-16768.
- 13 **Artículo científico.** (1/6) Fernández-Liencres, M.P.; Peña-Ruiz, T.; Granadino-Roldán, J.M.; Moral, M.; Garzón-Ruiz, A.; Navarro, A.2018. Butterfly Molecules: How Cross-Stacking Determines Bulk Physical Properties. *The Journal of Physical Chemistry C*. 122-22, pp.12002-12014.
- 14 **Artículo científico.** Garzón-Ruiz, A.; (2/11) Fernández-Liencres, M. P.; Moral, M.; et al; García- Martínez, Joaquín C.2017. Effect of the Aggregation on the Photophysical Properties of a Blue-Emitting Star-Shaped Molecule Based on 1,3,5-Tristyrylbenzene. *Journal of Physical Chemistry C*. 121, pp.4720-4733.
- 15 **Artículo científico.** Zhang, Y.; Hanifi, D.A.; (3/7) Fernández-Liencres, M. P.; Klivansky, L.M.; Ma, B.; Navarro, A.; Liu, Y.2017. Understanding Electron Transport in Disk-Shaped Triphenylene- Tris(naphthaleneimidazole)s through Structural Modification and Theoretical Investigation. *ACS Applied Materials and Interfaces*. 9, pp.20010-20019.
- 16 **Artículo científico.** Jiménez-Pulido, S.B.; Illán-Cabeza, N. A.; Hueso-Ureña, F.; Rodríguez-Maldonado, C.; Sánchez-Sánchez, M. P.; (6/8) Fernández-Liencres, M. P.; Fernández-Gómez, M.; Moreno-Carretero, M. N.2016. A Combined Experimental and DFT Investigation on the Structure and Co-releasing Properties of Mono and Binuclear Fac-ReI(CO)₃ Complexes with 5-pyridin-2-ylmethylene-amino uracils. *Dalton Transactions*. 45, pp.15142-15154.

C.3. Proyectos o líneas de investigación

- 1 **Proyecto.** Imanes unimoleculares estables y química computacional para el desarrollo de aplicaciones tecnológicas en materiales multifuncionales (MultiComBle). M. Mar Quesada-Moreno. (FEDER-UJA convocatoria 2023). 01/09/2024-31/08/2026. 30.000 €.
- 2 **Proyecto.** Sondas Luminiscentes para Nanoscopia de Agregación Amiloide (AMYNanoSens). PAIDI 2020. Juan Antonio Vera. 02/12/2022-31/12/2025. 157.607 €.
- 3 **Proyecto.** Obtención de nuevos compuestos metalorgánicos con capacidad liberadora de monóxido de carbono frente a células tumorales gliales (Cód. 1380736). FEDER-UJA convocatoria 2020. Sonia B. Jiménez Pulido. 01/01/2021-31/12/2022. 61.399,52 €.

- 4 **Proyecto.** CTQ2017-84561-P, Supramolecularidad en Polifenilenvinilenos Luminiscentes: Control y optimización de la agregación para impresión 3D (CTQ2017-84561-P). Ministerio de Economía, Industria y Competitividad. Julián Rodríguez López. 01/01/2018-31/12/2022. 64.399,52 €.
- 5 **Proyecto.** Acción 1 PAIUJA 2017-2018: FQM337 (2017/00334/001). Universidad de Jaén. Amparo Navarro Rascón. 01/01/2017-31/12/2018. 40.000 €.
- 6 **Proyecto.** UJA2015/08/04, Puente_UJA_MINECO Excelencia 2013: Diseño teórico de sistemas pi-Conjugados con interés en electrónica molecular: Sistemas discóticos (UJA2015/08/04). Universidad de Jaén. Manuel Fernández Gómez. 12/02/2015-31/12/2015. 3.750 €.
- 7 **Proyecto.** P06-FQM-01864, Simulación Teórica de Propiedades de Polímeros. Una Aproximación al Diseño Racional de Materiales de Interés Industrial.. Junta de Andalucía. Consejería de Economía, Innovación y Ciencia. Manuel Fernández Gómez. 01/09/2007-31/08/2008. 188.999,88 €.
- 8 **Proyecto.** MAT2007-11267, Simulación Teórica de Propiedades de Polímeros. Una Aproximación al Diseño Racional de Materiales de Interés Industrial.. Ministerio de Educación y Ciencia. Manuel Fernández Gómez. 01/10/2006-30/03/2008. 14.520 €.
- 9 **Proyecto.** BQU2003-08221, Avances en una Nueva Metodología para el Estudio de la Dinámica y Estructura de Precursores de Nuevos Materiales Poliméricos mediante Técnicas Espectroscópicas (IR/RAMAN, INS) y Métodos Numéricos. Ministerio de Educación y Ciencia. Manuel Fernández Gómez. (Universidad de Jaén). 01/01/2004-30/11/2006. 34.500 €.
- 10 **Proyecto.** Sensores fluorescentes de viscosidad en microambientes bioquímicos: Optimización teórica de sus propiedades. Amparo Navarro. (PROGRAMA R.1 UJA INVESTIGA. Ref. RIC_2025_032). Desde 01/03/2026.