

**DR. EDUARDO DELGADO RAMIREZ**

DOCTOR EN CIENCIAS CON MENCIÓN EN QUÍMICA, UNIVERSIDAD DE CONCEPCIÓN, CHILE,  
2005

**LÍNEA(S) DE INVESTIGACIÓN O ÁREAS DE TRABAJO**

- ✓ QUÍMICA BIOORGÁNICA, QUIMIOMETRÍA APLICADA

**NÚMERO DE TESIS DE DOCTORADO DIRIGIDAS EN LOS ÚLTIMOS 10 AÑOS (FINALIZADAS)**

Gonzalo Jaña V., 13-12-06 Graduado (co-director)

“Estudio Químico-Computacional para la Inhibición de la Enzima ácido Acetohidroxi Sintasa,  
por una Sulfonilurea”

**NÚMERO DE TESIS DIRIGIDAS O ACTIVIDAD FORMATIVA EQUIVALENTE GUIADAS EN EL  
PROGRAMA, EN LOS ÚLTIMOS 10 AÑOS (FINALIZADAS)**

Gerardo Díaz Monsalves, 20-01-2009 Excede Permanencia (co-director)

“Determinación de Propiedades de Interés Ambiental para Derivados Fenólicos Mediante  
Métodos Químico Cuánticos”

**LISTADO DE PUBLICACIONES EN LOS ÚLTIMOS 10 AÑOS.**

**Libros**

- ✓ **Libro:** Perovskite: Crystallography, Chemistry and Catalytic Performance

**Editor:** Jinghua Zhang, Huan Li.

**Capítulo:** Perovskites as Catalysts for Environmental Remediation

**Autores:** Gina Pecchi, Eduardo Delgado

**Editorial:** Nova

**Fecha de Publicación:** 2013

**ISBN:** 978-1-62417-800-9.

✓ **Libro:** *Herbicides, Theory and Applications*

**Editor:** *Andreas Kortekamp*

**Capítulo:** *Pyrimidinylsalicylic based herbicides: Modeling and Prediction*

**Autores:** *Eduardo J. Delgado*

**Editorial:** *InTech, 2011*

**ISBN:** 978-953-307-476-4

✓ **Libro:** *Thermodynamics, Solubility and Environmental Issues*

**Editor:** *Trevor M. Letcher*

**Capítulo:** *Modeling the Solubility in Water of Environmentally Important Organic Compounds.*

**Autores:** *Ernesto Estrada, Eduardo J. Delgado y Yamil Simón-Manso*

**Editorial:** *Elsevier, 2007.*

**ISBN-13:** 978-0-444-52707-3

### **Publicaciones**

G.A. Jaña, E. Delgado, F.E. Medina, "How important is the synclinal conformation of sulfonylureas to explain the inhibition of AHAS: a theoretical study", **J. Chemical information and modeling**, **54**, 926-932 (2014).

L.Sanchez, G. Jaña, E.J. Delgado, "A QM/MM study on the reaction pathway leading to 2-aceto-2-hydroxybutyrate in the catalytic cycle of AHAS", **J. Computational Chemistry** **35**, 488-494. (2014).

G.A. Jaña, E.J. Delgado, "Electron density reactivity indexes of the tautomeric/ionization forms of thiamin diphosphate", **J. Mol. Model.** **19**, 3799-3803 (2013).

G. Pecchi, B. Cabrera, E.J. Delgado, R. Jimenez, "Activity of  $\text{KNbO}_3$  as catalyst for soot combustion: Effect of the preparation method", **Applied Catalysis A: General** **453**, 341-348 (2013).

G. Pecchi, B. Cabrera, A. Buljan, E.J. Delgado, A.L. Gordon, "Catalytic oxidation of soot over alkaline niobates", R. Jimenez, **Journal of Alloys and Compounds** **551**, 255-261 (2013).

O. Alvarado, G. Jaña, E.J. Delgado, "Computer-assisted study on the reaction between pyruvate and ylide in the pathway leading to lactyl-ThDP", **J. Comput. Aided Mol. Des.** **26**, 977-982 (2012).

G. Pecchi, M. Graciela Jiliberto, Eduardo J. Delgado, "Reaction kinetics of methane combustion over  $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{FeO}_3$  perovskites", **J. Chil. Chem. Soc.** **56(4)**, 895-900 (2011) (F.I.: 0.532).

G.A. Jaña, J.B. Alderete, E.J. Delgado, "On the inhibition of AHAS by chlorimuron ethyl: A theoretical study", **Chemical Physics Letters** **516**, 239-243 (2011) (F.I. 2.28)

G. Pecchi, M.G. Jiliberto, E.J. Delgado, L.E. Cadús, J.L.G. Fierro, "Effect of B-site cation on the catalytic activity of  $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{BO}_3$  ( $B=\text{Fe}, \text{Ni}$ ) perovskite-type oxides for toluene combustion", **J. Chem. Technol. Biotechnol.** **86**, 1067-1073 (2011) (F.I. 1.82).

G. Pecchi, M.G. Jiliberto, A. Buljan, E.J. Delgado, "Relation between defects and catalytic activity of calcium doped  $\text{LaFeO}_3$  perovskite", **Solid State Ionics** **187**, 27-32 (2011) (F.I. 2.491).

Gonzalo Jaña, Verónica Jiménez, Jordi Villa-Freixa, Xavier Prat-Resina, Eduardo Delgado, Joel B. Alderete, "A QM/MM study on the last two steps of the catalytic cycle of acetohydroxyacid synthase", **Computational and Theoretical Chemistry** **966**, 159-166 (2011) (F.I. 1.50).

Eduardo J. Delgado, Joel B. Alderete, Gonzalo Jaña, "Density-functional study on the equilibria in the ThDP activation", **J. Mol. Model.** **17**, 2735-2739 (2011) (F.I. 1.871).

Gonzalo Jaña, Verónica Jiménez, Jordi Villa-Freixa, Xavier Prat-Resina, Eduardo Delgado, Joel Alderete, "Computational study on the carbonylation reaction of acetohydroxycarboxylate: New approach on the role of the HETHP- Intermediate". **Proteins Struct.Funct.Bioinform.** **78**, 1774-1788 (2010). ISI (F.I. 3.09 )

Eduardo J. Delgado, "Theoretical calculation of partition coefficients of dimethoxypyrimidinylsalicylic acids". **J. Mol. Model.** **16**, 1421-1425 (2010) ISI (F.I. 2.34)

Eduardo J. Delgado, "DFT calculation of pKa's for dimethoxypyrimidinylsalicylic based herbicides". **Chemical Physics Letters** **471**, 133-135 (2009). ISI (F.I.: 2.291)

Eduardo J. Delgado y Gonzalo A. Jaña, "Quantitative Prediction of Solvation Free Energy in Octanol of Organic Compounds", **International Journal of Molecular Sciences** **10**, 1031-1044 (2009). ISI (F.I.: 1.387)

Gerardo A. Díaz, Eduardo J. Delgado, "Quantitative Prediction of AHAS inhibition by pyrimidinylsalicylate based herbicides", **Pesticide Biochemistry and Physiology** **95**, 33-27 (2009). ISI (F.I.: 1.719)

G. Pecchi, C.M. Campos, M.G. Jiliberto, E.J. Delgado, J.L.G. Fierro. "Effect of additive Ag on the physicochemical and catalytic properties of LaMn<sub>0.9</sub>Co<sub>0.1</sub>O<sub>3.5</sub> perovskite" **Applied Catalysis A: General** **371**, 78-84 (2009) ISI. (F.I.: 3.19)

Eduardo J. Delgado, Joel B. Alderete, Gonzalo A. Jaña. "DFT derived solvation models for organic compounds in alkane solvents", **Chemical Physics** **325**, 220-224 (2006). FI: 1.934

Eduardo J. Delgado\*, Gerardo A. Díaz. "A molecular structure based model for predicting surface tension of organic compounds". *SAR and QSAR in Environmental Research* **17**, 483-496 (2006). FI: 1.753

Ernesto Estrada, Gerardo A. Díaz, Eduardo J. Delgado, "Predicting infinite dilution activity coefficients of organic compounds in water by quantum-connectivity descriptors". *Journal of Computer-Aided Molecular Design* **20**, 539-548 (2006) FI: 2.082

Verónica Jiménez, Joel B. Alderete, Eduardo J. Delgado, Julio Belmar, José Gavín. "On the complexation of allopurinol with  $\beta$ -cyclodextrin". *Structural Chemistry* **17**, 217-223 (2006) FI: 1.333.

Eduardo J. Delgado, Joel B. Alderete, Adelio R. Matamala, Gonzalo A. Jaña "On the aggregation state and QSPR models. The solubility of herbicides as a case of study", *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **44**, 958-963 (2004). (FI: 3.078)

Ernesto Estrada, Eduardo J. Delgado, Joel B. Alderete, Gonzalo A. Jaña "Quantum-Connectivity Descriptors in Modeling Solubility of Environmentally Important Organic Compounds", *Journal of Computational Chemistry* **25**, 1787-1796 (2004). (FI: 3.186)

Eduardo J. Delgado, Joel B. Alderete, Gonzalo Jaña "A simple QSPR model for predicting soil sorption coefficients of polar and nonpolar organic compounds from molecular formula", *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **43**, 1928-1932 (2003). (FI: 3.078)

Eduardo J. Delgado, Joel B. Alderete. "Prediction of Henry's law constants of triazine derived herbicides from quantum chemical continuum solvation models" *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **43**, 1226-1230 (2003). (FI: 3.078)

Eduardo J. Delgado, Adelio Matamala, Joel B. Alderete. "Predicting Gas Chromatographic Retention Time of Polychlorinated Dibenzo-p-Dioxins from Molecular Structure". **Z. Phys. Chem.216, 451-457 (2002). (FI: 0.636)**

Eduardo J. Delgado. "Predicting Aqueous Solubility of Chlorinated Hydrocarbons from Molecular Structure". **Fluid Phase Equilibria199, 101-107 (2002). (FI: 1.165)**

Eduardo J. Delgado, Joel Alderete. "On the Calculation of Henry's Law Constants of Chlorinated Benzenes in Water from Semiempirical Quantum Chemical Methods". *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 42, 559-563 (2002). (FI: 3.078)

#### **LISTADO DE PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN EN LOS ÚLTIMOS 10 AÑOS**

✓ FONDECYT 1130082

"Theoretical study on the molecular basis for the conversion of AHAS into a chiral acyloin synthase"

Responsabilidad: Investigador Responsable

Periodo: 2013-2016.

✓ FONDECYT 1130005

"Structural stability and catalytic activity of lanthanum A-site perovskites"

Responsabilidad: **Co-investigador**

Período: 2013-2016.

✓ FONDECYT 1100064

"Theoretical study on the biosynthetic pathway catalyzed by AHAS"

Responsabilidad: Investigador **Responsable**

Periodo: 2010-2012

✓ FONDECYT 1090018

*“Thermal stability against reduction of  $\text{La}_{1-x}\text{A}'_x\text{Co}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{O}_3$  ( $\text{A}'=\text{Er}, \text{Y}$ ) perovskite type oxides catalysts”*

Responsabilidad: **Co-investigador**

Período: 2009-2012.

✓ FONDECYT 1080282

*STRUCTURE-PROPERTY RELATIONSHIPS FOR THE COMPLEXATION OF ORGANIC GUESTS WITH CYCLODEXTRIN-DENDRIMER CONJUGATES*

Responsabilidad: **Coinvestigador**

Período: 2008-2011

✓ FONDECYT 1020464

*“Modelos QSPR para la Predicción de Propiedades Físico-Químicas de Herbicidas a partir de Descriptores Químico-Cuánticos”.*

Responsabilidad : Investigador **Responsable**

Período: 2002-2005

✓ FONDECYT 7020464 (Incentivo a la Cooperación Internacional)

*“Modelos QSPR para la Predicción de Propiedades Físico-Químicas de Herbicidas a partir de Descriptores Químico-Cuánticos”.*

Responsabilidad : Investigador **Responsable**

Período: 2002-2005

✓ FONDECYT 1040463

*“Modelos QSPR para la Inclusión de Heterociclos Aromáticos en Ciclodextrinas”.*

Responsabilidad : **Coinvestigador**

Período: 2004-2008

### **Proyectos Patrocinados por la Universidad de Concepción.**

✓ DIUC 209.022.023-1.0

*“Theoretical study on the tautomeric equilibrium of thiamin diphosphate (ThDP) model*

*Responsabilidad: Investigador **Responsable***

*Período: Agosto 2009-Agosto 2011*

✓ DIUC 207.022.023-1.0

*“Inhibición de la enzima acetohidroxiacidosintasa (AHAS) por herbicidas. Un estudio de docking molecular y QM/MM*

*Responsabilidad : Investigador **Responsable***

*Período: Mayo 2007-Mayo 2009*

### **Participación en Proyectos de Colaboración Internacional.**

✓ CNRS-Conicyt

*“Laboratoire International Associe de Materiales Inorganicos Funcionales (LIAMIF)”*

*Responsabilidad: **Coinvestigador***

*Agencia:*

*Período: Septiembre 2009-Septiembre 2013.*

✓ CNRS-CONICYT 22785

*“Correlación entre propiedades magnéticas y catalíticas de perovskitas de  $La_{1-x}A'_xCoO_3$ ,  $La_{1-x}A'_xMnO_3$  y  $La_{1-x}A'_xCo_{0.5}Mn_{0.5}O_3$  ( $A'=Er, Y$ )”.*

*Responsabilidad: **Coinvestigador***

*Período: 2009-2011*



✓ CNPq N° 08/2010-10-27

*“Aproveitamento do glicerol para geracao de hidrogenio por reforma a vapor”*

*Responsabilidad: **Coinvestigador***

*Agencia: Assesoria de Cooperacaointernational-ASCIN/CNPq. Programas Multilaterais.*

*Periodo: 2011-2012*

✓ Agencia Cytel

*“Tratamiento de Emisiones Gaseosas Industriales de Disolventes para la Protección Ambiental”*

*Responsabilidad: **Coinvestigador***

*Período: 2005-2008*