

Fecha del CVA 09/03/2026

Part A. DATOS PERSONALES

Nombre	Ana María
Apellidos	Simonet Morales
Open Researcher and Contributor ID (ORCID) (*)	0000-0002-6516-1783

* datos obligatorios

A.1. Situación profesional actual

Puesto	Profesora Titular de Universidad/Responsable científica RMN
Fecha inicio	2002/2014
Organismo/ Institución	Universidad de Cádiz
Departamento/ Centro	Departamento de Química Orgánica/Facultad de Ciencias
País	España
Palabras clave	Metabolitos especializados, aleloquímicos, saponinas, Resonancia Magnética Nuclear, desreplicación, espectrometría de masas, metabolómica

A.2. Situación profesional anterior

Periodo	Puesto/ Institución/ País
1992-1994	Beca predoctoral/UCA/España (35 meses)
1995-2002	Profesora asociada/UCA/España (92 meses)
2015-2021	Coordinadora del grado en Química (72 meses)

(Incorporar todas las filas que sean necesarias)

A.3. Formación Académica

Grado/Master/Tesis	Universidad/País	Año
Tesis	Universidad de Cádiz/España	1997

(Incorporar todas las filas que sean necesarias)

Parte B. RESUMEN DEL CV

A.M. Simonet es Profesora Titular en la Universidad de Cádiz (UCA) desde 2002. Su carrera investigadora comenzó en 1991 como miembro del Grupo de Alelopatía de Cádiz, culminando con la obtención de su doctorado "cum laude" en 1997. Realizó dos estancias postdoctorales: una de tres meses en el "Institute of Soil and Plant Cultivation" en Pulawy (Polonia) y otra de nueve meses en el "Dipartimento di Chimica Organica e Biologica" de la Universidad Federico II de Nápoles (Italia), donde investigó diversos tipos de metabolitos especializados, trabajo que se vio reflejado en cuatro publicaciones.

Su carrera investigadora se ha centrado en la obtención de forma biodirigida de aleloquímicos a partir de fuentes naturales, abarcando fenoles simples, cumarinas, flavonoides, lignanos, terpenoides, benzoxazinoides y saponinas, entre otros, incluyendo una nueva familia de terpenoides: los espiroditerpenoides denominados brevionas. Ha aislado y elucidado por primera vez en la literatura científica 113 metabolitos especializados de origen vegetal, marino y fúngico, entre los cuales se incluyen 58 nuevas saponinas triterpénicas y esteroidales. Los importantes retos que plantea el aislamiento de estos metabolitos la llevaron a desarrollar un método de desreplicación para saponinas de *Agave* mediante el método HMAI, utilizando técnicas de Resonancia Magnética Nuclear (RMN) y Espectrometría de Masas (EM) aplicadas a fracciones enriquecidas. Este método permite la caracterización de dichas fracciones sin necesidad de separación previa, identificando incluso saponinas no descritas anteriormente y facilitando su uso como potenciales bioherbicidas.

Además, ha explorado el potencial fitotóxico de los ácidos hidroxámicos y sus productos de degradación en el suelo, como el APO. Actualmente colabora también con la Universidad de Concepción (Chile) en estudios de metabolómica mediante espectrometría de masas e impartió el curso postdoctoral "Ecología química: nuevas perspectivas de estudio desde la multidisciplinariedad (ecometabolómica)" en enero de 2024.

Sus resultados de investigación están documentados en 52 artículos con 1.861 citas, y posee un índice h de 25 (Scopus). Cuenta con cinco tramos de investigación reconocidos (sexenios de la CNEAI), el más reciente en 2023. Ha participado en 14 proyectos nacionales o regionales y es autora de una patente derivada del Proyecto Europeo QLRT-2000-0197 "Fate and Toxicity of Allelochemicals in Relation to Environment and Consumer".

A lo largo de los años, ha colaborado extensamente en la elucidación estructural de metabolitos especializados con grupos de investigación de instituciones como el "Institute of Soil and Plant Cultivation" (Polonia), la Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas (Cuba), la Universidad de Concepción (Chile), la Universidad Estatal Paulista (Brasil), la UNAM (México), la Universidad de Santiago de Chile (Chile), la Universidad de Campania "Luigi Vanvitelli" (Italia) y la Universidad Mercer (Georgia, EE. UU.).

Desde hace once años, ejerce como responsable científica del Servicio de Resonancia Magnética Nuclear (RMN) de la UCA, que alberga tres instrumentos operando a 400, 500 y 700 MHz. Durante este periodo, ha sido la investigadora principal de dos Proyectos de Infraestructura Científica destinados a la actualización de este equipamiento: EQC2019-006410-P (334.400 €) y EQC2018-004899-P (999.460 €).

En el ámbito de la gestión universitaria, fue Coordinadora del Grado en Química durante seis años (de 2015/16 a 2020/21).

Junto con su labor investigadora, A.M. Simonet ha impartido docencia en la UCA desde 1995, principalmente en el Grado en Química de la Facultad de Ciencias. También participa en el programa de Máster en Biotecnología. A lo largo de su trayectoria, ha dirigido a 9 estudiantes de posgrado (DEA, TFM) y 16 de grado (TFG), así como a investigadores pre y postdoctorales internacionales. A nivel de doctorado, ha dirigido tres tesis sobre saponinas esteroidales en especies de la familia Agavaceae, y actualmente dirige una en curso sobre holoturinas. También ha tutelado las estancias de investigación predoctoral de tres estudiantes brasileños dentro de programas de doctorado "sandwich" y actualmente co-dirige a un estudiante de doctorado de la Universidad de Concepción. Dos de sus antiguos doctorandos son ahora profesores universitarios y el tercero es gerente de laboratorio en "Eurofins Villapharma Research" (España).

Part C. LISTADO DE APORTACIONES MÁS RELEVANTES

C.1. Publicaciones más importantes en libros y revistas con "peer review" y conferencias (últimos 10 años).

- 1.- López-Sampedro, E., Arreguin-Espinosa, R. Simonet, A.M. (AC) (2025) Cytotoxic triterpene glycosides from mexican sea cucumber *Holothuria inornata*. *Journal of Natural Products*. 88, 2372-2382. (3/3). Citas: 1. Prom: 1
- 2.- Guzzo, F., Aliaño-González, M.J., Chinchilla, N., Carrera, C., Macías, F.A., Durán, A.G. (AC), Simonet, A.M. (2025) Unlocking *Agave bracteosa* Saponins: Optimized green extraction through Box-Behnken design. *Sustainable Chemistry and Pharmacy*. 47, 102162. (7/7). Citas: 2. Prom: 2
- 3.- Simonet, A. M. (AC), Durán, A. G., Macías, F. A. (2024). Dereplication of Bioactive *Agave* Saponin Fractions: The Hidden Saponins. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 72, 13740-13756. (1/3). Citas: 3. Prom: 1,5
- 4.- Durán, A.G., Chinchilla, N., Simonet, A.M., Gutiérrez, M.T., Bolívar, J., Valdivia, M.M., Molinillo, J.M.G., Macías, F.A. (AC) (2023). Biological Activity of Naphthoquinones Derivatives in the Search of Anticancer Lead Compounds. *Toxins*, 15, 348. (3/8). Citas: 12. Prom: 4
- 5.- Durán, A. G., Calle, J. M., Butrón, D., Pérez, A. J., Macías, F. A., Simonet, A. M. (AC) (2022). Steroidal Saponins with Plant Growth Stimulation Effects; *Yucca schidigera* as a Commercial Source. *Plants*, 11, 3378. (6/6). Citas: 9. Prom: 2,25

- 6.- Durán, A. G., Benito, J., Macías, F. A., Simonet, A. M. (AC) (2021). Agave steroidal saponins as potential bioherbicides. *Agronomy*, 11, 2404. (4/4). Citas: 13. Prom: 2,6
- 7.- Durán, A. G., Celaj, O., Macías, F. A., Simonet, A. M. (AC) (2021). Dereplication of Bioactive Spirostane Saponins from *Agave macroacantha*. *Journal of Natural Products*, 84, 2904-2913. (4/4). Citas: 4. Prom: 0,8
- 8.- Simonet, A. M. (AC), Durán, A. G., Pérez, A. J., Macías, F. A. (2021). Features in the NMR spectra of the aglycones of *Agave* spp. saponins. HMBC method for aglycone identification (HMAI). *Phytochemical Analysis*, 32, 38-61. (1/4). Citas: 10. Prom: 2
- 9.- Dias, M. J.; Simonet, A. M.; Silva, N. C.; Dias, A. L. T.; Vilegas, W.; Macías, F. A. (AC) (2019). Bioassay-Guided Isolation of Fungistatic Compounds from *Mimosa caesalpiniiifolia* Leaves. *Journal of Natural Products*. 82: 1496-1502. (2/6). Citas: 20. Prom: 2,9
- 10.- Figueiredo, D.; Signor, C.A., Lima, S. E., Lima, C. A., Heredia-Vieira, S. C., Vieira, M. C., Simonet, A. M.; Macías, F. A., Gasparotto, A. (AC) (2017). *Alibertia edulis* (L.C. Rich.) A.C. Rich – A potent diuretic arising from Brazilian indigenous species. *Journal of Ethnopharmacology*. 196: 193-200. (6/8). Citas: 15. Prom: 1,7

C.2. Congresos, (últimos dos años):

- 1.- Francesca Guzzo; M. Dolores Vela-Delgado; Ana M. Simonet. Poster.
A Treasure Trove in Leek washing water: dereplication of steroidal saponin content in their foam. Congress: 4th Food Chemistry Conference. Glasgow, Reino Unido. 14/10/2025. Organization: Elsevier.
- 2.- Alexandra García Durán; Rafael, P. Alba; Ana M. Simonet. Poster.
Evolution of the saponin content of *Agave parrasana* throughout its life cycle. Congress: 21th Annual Conference of Metabolomics. Prague, Czech Republic. 23/06/2025. Organization: Metabolomic Society.
- 3.- Francesca Guzzo; María José Aliaño-González; Nuria Chinchilla; Ceferino Carrera; Francisco A. Macías; Alexandra G. Durán; Ana M. Simonet. Invited conference.
From Foam to Function: Revolutionary Advances in Saponin Science. Congress: Trends in Natural Product Research. Wroclaw, Poland. 15/06/2025. Organization: Phytochemical Society of Europe.
- 4.- Ana M. Simonet; Alexandra García Durán; Francisco A. Macías. Poster.
Dereplication of hidden saponins in bioactive extracts. Congress: International Congress on Natural Products Research. Krakow, Poland. 14/07/2024. Organization: Phytochemical Society of Europe.

C.3. Proyectos o líneas de investigación en los que ha participado (últimos 5 años).

1. Valorización sostenible de residuos de *Cynara* spp. con extracción verde mediante NADES (CYNADEX: "Cynara and NADES for Sustainable Bioactive Extraction"). Consejería de Universidad, Investigación e Innovación - Junta De Andalucía. FEDER-UCA-2024-A2-49. Nuria Chinchilla Salcedo. 15/09/2025 – 14/09/2027. 39.600 €.
2. Regenerating biodiversity and the operation of vineyards through the valorization of waste and agri-food by-products (REGENBIOVIN). Consejería de Economía y Conocimiento. Raúl Ochoa Hueso. 01/09/2023-31/12/2025. 252.476 €.
3. PID2020-115747RB-100, Preparation and nanoencapsulation of hybrids of natural phytotoxins for potential application in agriculture" (PENAFIN). Ministerio de Economía y Competitividad. Francisco A. Macías Domínguez. 01/09/2021-30/04/2025. 199.650 €.

4. AGL2017-88083-R, Biostimulants of parasitic plants. New alternatives for their control in crops of interest (BIOESTA). Ministerio de Economía y Competitividad. Francisco A. Macías Domínguez. 01/01/2018-31/12/2021. 133.000€.

5. AGL2013-42238-R, Biocommunicators and strigolactone analogs for the control of parasitic plants and crop improvement. Ministerio de Economía y Competitividad. Francisco A. Macías Domínguez. (Universidad de Cádiz). 01/10/2014-31/12/2017. 180.000 €.

C.4. Participación en actividades de transferencia de tecnología/conocimiento y explotación de resultados.

Francisco A. Macías, Jose M. G. Molinillo, David, M. Mateos, Ana M. Simonet, Diego Castellano, Alberto Oliveros. ES2221806A1. Derivados 7-alquiloxi-2H-1,4-benzoxacin-3(4H)-ona, y su preparación. España. 01-01-2005.