



FACULTAD DE
CIENCIAS
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

Departamento de
Química



DEPARTAMENTO DE QUÍMICA MEMORIA DE INVESTIGACIÓN 2016

UAM

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA
DE MADRID

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

MEMORIA DE INVESTIGACIÓN 2016

La presente Memoria de Investigación 2016, elaborada por la Biblioteca de Ciencias, viene a dar cuenta de los resultados de la investigación que se realiza en el Departamento de Química de la Facultad de Ciencias.

La información procede del Portal de Producción Científica (Imarina), de distintas bases de datos así como de la información suministrada por el personal docente e investigador del Departamento.

Contiene información relativa a:

- **PUBLICACIONES: 70**, de las que 64 son artículos y 6 otro tipo de publicaciones.
 - Cuadro con información relativa a los distintos tipos de publicaciones. En relación con los artículos incluimos ratio: número de publicaciones / PDI de la Facultad, así como información sobre Indicadores de calidad: artículos editados en revistas del primer cuartil - Q1 de JCR (Journal Citation Reports) o de SJR (Scimago Journal Rank) 2016; información sobre artículos sin factor de impacto
 - Relación completa de Artículos ordenados alfabéticamente
 - Relación completa de otras publicaciones [Libros, Capítulos de Libros, Conferencia publicada, Editoriales, Notas, *Letters*, *Working Papers*, Erratum, Libro de Actas, *Meeting-Abstracts* ordenadas alfabéticamente
- **PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN: 22**
- **AYUDAS INDIVIDUALES: 5**
- **TESIS DOCTORALES: 2**
 - Cuadro con información de las Tesis Doctorales leídas en 2016 en el Departamento y de la Facultad de Ciencias, con información de las dirigidas, tutorizadas y codirigidas en otras instituciones.
 - Relación de completa de Tesis Doctorales ordenadas por programa de Doctorado y título.

PUBLICACIONES

	Total	Artículos	Otras publicaciones	% art./total	Ratio Publicaciones /PDI	Indicadores de Calidad			
						Q1	%	SIN FI	%
QUIMICA	70	64	6	4,56%	1,32	57	89,06%	0	0,00%
TOTAL FACULTAD CIENCIAS	1.598	1.403	195		1,86	1025	73,06%	81	5,77%

Indicadores de calidad:

Q1: artículos publicados en revistas del primer cuartil

SIN FI: artículos publicados en revistas sin factor de impacto (sin indicador de calidad)

ARTÍCULOS

1) Ares García, Pablo; Aguilar Galindo, Fernando; Rodríguez San Miguel, David; A. Aldave, Diego; Díaz-Tendero, Sergio; Alcamí, Manuel; Martín, Fernando; Gómez-Herrero, Julio; Zamora, Félix (2016). Mechanical Isolation of Highly Stable Antimonene under Ambient Conditions. *ADVANCED MATERIALS*, 28(23)

<https://doi.org/10.1002/adma.201602128>

2) Argenti, L; Moccia, R (2016). Autoionizing states of atomic boron. *PHYSICAL REVIEW A*, 93(4), 042503

<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.93.042503>

3) Arpa, EM; Frías, M; Alvarado, C; Aleman, J; Díaz-Tendero, S (2016). Weakly bounded intermediates as a previous step towards highly-enantioselective iminium type additions of β -keto-sulfoxides and -sulfones. *JOURNAL OF MOLECULAR CATALYSIS A: CHEMICAL*, 423, 308-318

<https://doi.org/10.1016/j.molcata.2016.03.013>

4) Borondo, F; Benito, R; Hernández, R; García-Muller, P; Bartsch, T; Revuelta, F (2016). Transition state theory for solvated reactions beyond recrossing-free dividing surfaces. *PHYSICAL REVIEW E - STATISTICAL, NONLINEAR, AND SOFT MATTER PHYSICS*, 93(6)

<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.93.062304>

5) Borondo, F; Benito, R; Losada, J; López-Pina, A (2016). Frequency analysis of the laser driven nonlinear dynamics of HCN. *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, 145(24)

<https://doi.org/10.1063/1.4972260>

6) Brea, O; Alkorta, I; Mó, O; Yáñez, M; Elguero, J; Corral, I (2016). Exergonic and Spontaneous Production of Radicals through Beryllium Bonds. *ANGEWANDTE CHEMIE - INTERNATIONAL EDITION*, 55(30), 8736-8739

<https://doi.org/10.1002/anie.201603690>

7) Brea, O; Corral Pérez, I; Mó, O; Yáñez, M; Alkorta, I; Elguero, J (2016). Beryllium-based Anion sponges. Close relatives of proton sponges. *CHEMISTRY - A EUROPEAN JOURNAL*, 22(51), 18322-18325

<https://doi.org/10.1002/chem.201604325>

- 8) Brea, O; El Khatib, M; Bendazzoli, GL; Evangelisti, S; Leininger, T; Angeli, C (2016). The Spin-Partitioned Total-Position Spread Tensor: An Application To Diatomic Molecules. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A*, 120(27), 5230-5238
<https://doi.org/10.1021/acs.jpca.6b01043>
- 9) Brea, O; M6, O; Y6ñez, M; Alkorta, I; Elguero, J (2016). On the existence of intramolecular one-electron Be-Be bonds. *CHEMICAL COMMUNICATIONS*, 52(62), 9656-9659
<https://doi.org/10.1039/c6cc04350j>
- 10) Bruña, S; Garrido-Castro, AF; Perles, J; Montero-Campillo, MM; M6, O; Kaifer, AE; Cuadrado, I (2016). Multi-Ferrocene-Containing Silanols as Redox-Active Anion Receptors. *ORGANOMETALLICS*, 35(20), 3507-3519
<https://doi.org/10.1021/acs.organomet.6b00559>
- 11) Calegari, F; Trabattoni, A; Palacios, A; Ayuso, D; Castrovilli, MC; Greenwood, JB; Decleva, P; Mart6n, F; Nisoli, M (2016). Charge migration induced by attosecond pulses in bio-relevant molecules. *JOURNAL OF PHYSICS B: ATOMIC, MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS*, 49(14)
<https://doi.org/10.1088/0953-4075/49/14/142001>
- 12) Carlo, GG; Benito, RM; Borondo, F (2016). Theory of short periodic orbits for partially open quantum maps. *PHYSICAL REVIEW E*, 94(1)
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.94.012222>
- 13) Cheng, Y; Chini, M; Wang, X; Gonz6lez-Castrillo, A; Palacios, A; Argenti, L; Mart6n, F; Chang, Z (2016). Reconstruction of an excited-state molecular wave packet with attosecond transient absorption spectroscopy. *PHYSICAL REVIEW A*, 94(2), 023403
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.94.023403>
- 14) Cohen, AJ; Mori-S6nchez, P (2016). Landscape of an exact energy functional. *PHYSICAL REVIEW A*, 93(4)
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.93.042511>
- 15) de Jong, M; Biner, D; Kramer, KW; Barandiar6n, Z; Seijo, L; Meijerink, A (2016). New Insights in 4f(12)5d(1) Excited States of Tm(2+) through Excited State Excitation Spectroscopy. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS*, 7(14), 2730-2734
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.6b00924>
- 16) Decleva, P.; Orr-Ewing, A.J.; Kowalewski, M.; Kornilov, O.; Marangos, J.P.; W6rner, H.J.; Johnson, A.S.; Forbes, R.; Rolles, D.; Townsend, D.; Schalk, O.; Mai, S.; Penfold, T.J.; Miller, R.J.D.; Centurion, M.; Ueda, K.; Domcke, W.; Weber, P.M.; Baeck, K.K.; Travnikova, O.; Liekhus-Schmaltz, C.; Figueira Nunes, J.P.; Neumark, D.M.; Gessner, O.; Stolow, A.; Rudenko, A.; Mishra, P.K.; Kirrander, A.; Dowek, D.; Mart6n, F.; Vib6k, 6.; Minitti, M.P.; Stankus, B.; Burger, C. Structural dynamics: General discussion. *FARADAY DISCUSSIONS*, 194, 583-620
<https://doi.org/10.1039/c6fd90072k>
- 17) del Cueto, M.; Muzas, A.; F6chsel, G.; Gatti, F.; Mart6n, F.; D6az, C. (2016). Role of van der Waals forces in the diffraction of noble gases from metal surfaces. *PHYSICAL REVIEW B - CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS*, 93(6), 060301
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.060301>

- 18) Faginas-Lago, N; Yeni, D; Huarte, F; Wang, Y; Alcamí, M; Martín, F (2016). Adsorption of Hydrogen Molecules on Carbon Nanotubes Using Quantum Chemistry and Molecular Dynamics. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, 120(32), 6451-6458
<https://doi.org/10.1021/acs.jpca.5b12574>
- 19) Fuchsel, Gernot; del Cueto, Marcos; Díaz, Cristina; Kroes, Geert-Jan (2016). Enigmatic HCl + Au(111) Reaction: A Puzzle for Theory and Experiment. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 120(45), 25760-25779
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b07453>
- 20) Gómez, CV; Pisarra, M; Gravina, M; Pitarke, JM; Sindona, A (2016). Plasmon Modes of Graphene Nanoribbons with Periodic Planar Arrangements. PHYSICAL REVIEW LETTERS, 117(11)
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.116801>
- 21) Gruson, V.; Barreau, L.; Jiménez-Galán, A.; Risoud, F.; Caillat, J.; Maquet, A.; Carre, B.; Lepetit, F.; Hergott, J. F.; Ruchon, T.; Argenti, L.; Taieb, R.; Martín, F.; Salieres, P. (2016). Attosecond dynamics through a Fano resonance: Monitoring the birth of a photoelectron. SCIENCE, 354(6313), 734-738
<https://doi.org/10.1126/science.aah5188>
- 22) Ha, DT; Yamazaki, K; Wang, Y; Alcamí, M; Maeda, S; Kono, H; Martín, F; Kukk, E (2016). Fragmentation network of doubly charged methionine: Interpretation using graph theory. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 145(9),094302
<https://doi.org/10.1063/1.4962061>
- 23) Heuser, Sebastian; Jiménez Galán, Álvaro; Cirelli, Claudio; Marante, Carlos; Sabbar, Mazyar; Boge, Robert; Lucchini, Matteo; Gallmann, Lukas; Ivanov, Igor; Kheifets, Anatoli S.; Dahlstrom, J. Marcus; Lindroth, Eva; Argenti, Luca; Martín, Fernando; Keller, Ursula (2016). Angular dependence of photoemission time delay in helium. PHYSICAL REVIEW A, 94(6), 063409
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.94.063409>
- 24) Jiménez-Galán, Á; Martín, F; Argenti, L (2016). Two-photon finite-pulse model for resonant transitions in attosecond experiments. PHYSICAL REVIEW A, 93(2), 023429
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.93.023429>
- 25) Jorge, A; Illescas, C; Méndez, L; Pons, B (2016). Switching classical trajectory Monte Carlo method to describe two-active-electron collisions. PHYSICAL REVIEW A, 94(2)
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.94.022710>
- 26) Jorge, A; Suarez, J; Illescas, C; Errea, LF; Méndez, L (2016). Application of a grid numerical method to calculate state-selective cross sections for electron capture in Be⁴⁺ + H(1s) collisions. PHYSICAL REVIEW A, 94(3)
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.94.032707>
- 27) Junginger, A; Craven, GT; Bartsch, T; Revuelta, F; Borondo, F; Benito, RM; Hernández, R (2016). Transition state geometry of driven chemical reactions on time-dependent double-well potentials. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 18 (30), 30270-30281
<https://doi.org/10.1039/c6cp02519f>

- 28) Junginger, A; García-Muller, PL; Borondo, F; Benito, RM; Hernández, R (2016). Solvated molecular dynamics of LiCN isomerization: All-atom argon solvent versus a generalized Langevin bath. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 144(2), 024104
<https://doi.org/10.1063/1.4939480>
- 29) Kamel, EM; Mahmoud, AM; Ahmed, SA; Lamsabhi, AM (2016). A phytochemical and computational study on flavonoids isolated from Trifolium resupinatum L. and their novel hepatoprotective activity. FOOD AND FUNCTION, 7(4), 2094-2106
<https://doi.org/10.1039/c6fo00194g>
- 30) Khachatryan, V; Sirunyan, AM; Tumasyan, A; Adam, W; Asilar, E; Bergauer, T; Brandstetter, J; Brondolin, E; Dragicevic, M; Erö, J; Flechl, M; Friedl, M; Frühwirth, R; Ghete, VM; Hartl, C; Hörmann, N; Hrubec, J; Jeitler, M; Knünz, V; König, A; Krammer, M; Krätschmer, I; Liko, D; Matsushita, T; Mikulec, I; Rabady, D; Rahbaran, B; Rohringer, H; Schieck, J; Schöffbeck, R; Strauss, J; Treberer-Treberspurg, W; Waltenberger, W; Wulz, C-E; Mossolov, V; Shumeiko, N; Suarez, J; Alderweireldt, S; Cornelis, T; De Wolf, EA (2016). Search for massive WH resonances decaying into the $\psi(3700)$ final state at $\sqrt{s} = 8$ TeV. EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL C, 76(5)
<https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-016-4067-z>
- 31) Kotur, M; Guenot, D; Jiménez-Galán, A; Kroon, D; Larsen, EW; Louisy, M; Bengtsson, S; Miranda, M; Maurtsson, J; Arnold, CL; Canton, SE; Gisselbrecht, M; Carette, T; Dahlstrom, JM; Lindroth, E; Maquet, A; Argenti, L (2016). Spectral phase measurement of a Fano resonance using tunable attosecond pulses. NATURE COMMUNICATIONS, 7, 10566
<https://doi.org/10.1038/ncomms10566>
- 32) Kroes, GJ; Díaz, C (2016). Quantum and classical dynamics of reactive scattering of H-2 from metal surfaces. CHEMICAL SOCIETY REVIEWS, 45(13), 3658-3700
<https://doi.org/10.1039/c5cs00336a>
- 33) Kuhn, M.; Renzler, M.; Postler, J.; Ralser, S.; Spieler, S.; Simpson, M.; Linnartz, H.; Tielens, A. G. G. M.; Cami, J.; Mauracher, A.; Wang, Y.; Alcamí, M.; Martín, F.; Beyer, M. K.; Wester, R.; Lindinger, A.; Scheier, P. (2016). Atomically resolved phase transition of fullerene cations solvated in helium droplets. NATURE COMMUNICATIONS, 7
<https://doi.org/10.1038/ncomms13550>
- 34) Kusevska, E; Montero-Campillo, MM; Mó, O; Yáñez, M (2016). Boron-Boron One-Electron Sigma Bonds versus B-X-B Bridged Structures. CHEMISTRY - A EUROPEAN JOURNAL, 22(38), 13697-13704
<https://doi.org/10.1002/chem.201600976>
- 35) Lamsabhi, AM; Vallejos, MM; Herrera, B; Mó, O; Yáñez, M (2016). Effect of beryllium bonds on the keto–enol tautomerism of formamide derivatives: a subtle basicity–acidity balance. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS, 135(6), 1-9
<https://doi.org/10.1007/s00214-016-1902-0>
- 36) Latrous, L; Salpin, JY; Haldys, V; León, E; Correia, C; Lamsabhi, AM (2016). Gas-phase interactions of organotin compounds with cysteine. JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY, 51(11), 1006-1015

<https://doi.org/10.1002/jms.3812>

37) Maclot, S.; Delaunay, R.; Piekarski, D. G.; Domaracka, A.; Huber, B. A.; Adoui, L.; Martín, F.; Alcamí, M.; Avaldi, L.; Bolognesi, P.; Díaz-Tendero, S. and Rousseau, P. (2016). Determination of Energy-Transfer Distributions in Ionizing Ion-Molecule Collisions. *PHYSICAL REVIEW LETTERS*, 117(7), 073201

<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.073201>

38) Mai, S; Pollum, M; Martínez-Fernández, L; Dunn, N; Marquetand, P; Corral, I; Crespo-Hernández, CE; González, L (2016). The origin of efficient triplet state population in sulfur-substituted nucleobases. *NATURE COMMUNICATIONS*, 7, 13077

<https://doi.org/10.1038/ncomms13077>

39) Marín-Luna, M; Alkorta, I; Elguero, J; Mó, O; Yáñez, M (2016). Fullerene and corannulene derivatives acting as insulators of Cl and BeH. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*, 18(8):6059-6068

<https://doi.org/10.1039/c5cp08046k>

40) Martín, F; Aguirre, N (2016). Tuning high-harmonic generation by controlled deposition of ultrathin ionic layers on metal surfaces. *PHYSICAL REVIEW B - CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS*, 94(24)

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.245423>

41) Martín, F; Meier, C; Riviere, P; Gubaydullin, A; Silva, R; Lara-Astiaso, M (2016). Enhancing High-Order Harmonic Generation in Light Molecules by Using Chirped Pulses. *PHYSICAL REVIEW LETTERS*, 117(9), 093003

<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.093003>

42) Martín, F; Palacios, A; Decleva, P; Tavernelli, I; Ayuso, D; Lara-Astiaso, M (2016). Decoherence, control and attosecond probing of XUV-induced charge migration in biomolecules. A theoretical outlook. *FARADAY DISCUSSIONS*, 194, 41-59

<https://doi.org/10.1039/c6fd00074f>

43) Martín-Somer, A; Yáñez, M; Hase, WL; Gageot, MP; Spezia, R (2016). Post-Transition State Dynamics in Gas Phase Reactivity: Importance of Bifurcations and Rotational Activation. *JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION*, 12(3), 974-982

<https://doi.org/10.1021/acs.jctc.5b01135>

44) Matías, AS; Havenith, RW; Alcamí, M; Ceulemans, A (2016). Is C50 a superaromat? Evidence from electronic structure and ring current calculations. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*, 18(17), 11653-11660

<https://doi.org/10.1039/c5cp04970a>

45) Milne, C.J.; Weber, P.M.; Kowalewski, M.; Marangos, J.P.; Johnson, A.S.; Forbes, R.; Wörner, H.J.; Rolles, D.; Townsend, D.; Schalk, O.; Mai, S.; Vacher, M.; Miller, R.J.D.; Centurion, M.; Vibók, Á.; Domcke, W.; Cireasa, R.; Ueda, K.; Bencivenga, F.; Neumark, D.M.; Stolow, A.; Rudenko, A.; Kirrander, A.; Doweck, D.; Martín, F.; Ivanov, M.; Dahlström, J.M.; Dudovich, N.; Mukamel, S.; Sánchez-González, A.; Minitti, M.P.; Austin, D.R.; Kimberg, V.; Masin, Z. Attosecond processes and X-ray spectroscopy: general discussion. *FARADAY DISCUSSIONS*, 194, 427-464

<https://doi.org/10.1039/c6fd90071b>

46) Montero-Campillo, MM; Lamsabhi, AM; M6, O; Y6ñez, M (2016). Photochemical Behavior of Beryllium Complexes with Subporphyrazines and Subphthalocyanines. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, 120(27), 4845-4852

<https://doi.org/10.1021/acs.jpca.5b12374>

47) Muzas, AS; Gatti, F; Mart6n, F; D6az, C (2016). Diffraction of H from LiF(001): From slow normal incidence to fast grazing incidence. NUCLEAR INSTRUMENTS AND METHODS IN PHYSICS RESEARCH, SECTION B: BEAM INTERACTIONS WITH MATERIALS AND ATOMS, 382, 49-53

<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2016.04.031>

48) Nandi, S; Plesiat, E; Patanen, M; Miron, C; Bozek, JD; Mart6n, F; Toffoli, D; Decleva, P (2016). Photoelectron diffraction in methane probed via vibrationally resolved inner-valence photoionization cross-section ratios. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 18(4), 3214-3222

<https://doi.org/10.1039/c5cp07017a>

49) Nihill, KJ; Hund, ZM; Muzas, A; D6az, C; del Cueto, M; Frankcombe, T; Plymale, NT; Lewis, NS; Martin, F; Sibener, SJ (2016). Experimental and theoretical study of rotationally inelastic diffraction of H-2(D-2) from methyl-terminated Si(111). JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 145(8)

<https://doi.org/10.1063/1.4961257>

50) Orr-Ewing, Andrew J.; Verlet, Jan R. R.; Penfold, Tom J.; Minns, Russell S.; Minitti, Michael P.; S6lling, Theis I.; Schalk, Oliver; Kowalewski, Markus; Marangos, Jon P.; Robb, Michael A.; Johnson, Allan S.; W6rner, Hans Jakob; Shalashilin, Dmitrii V.; Miller, R. J. Dwayne; Domcke, Wolfgang; Ueda, Kiyoshi; Weber, Peter M.; Cireasa, Raluca; Vacher, Morgane; Roberts, Gareth M.; Decleva, Piero; Bencivenga, Filippo; Neumark, Daniel M.; Gessner, Oliver; Stolow, Albert; Mishra, Pankaj Kumar; Polyak, Iakov; Koo Baeck, Kyoung; Kirrander, Adam; Dowek, Danielle; Jim6nez-Gal6n, 6lvaro; Mart6n, Fernando; Mukamel, Shaul; Sekikawa, Taro; Gelin, Maxim F.; Townsend, Dave; Makhov, Dmitry V. and Neville, Simon P. Electronic and non-adiabatic dynamics: general discussion. FARADAY DISCUSSIONS, 194, 209-257

<https://doi.org/10.1039/C6FD90070d>

51) Pisarra, M; Sindona, A; Gravina, M; Silkin, VM; Pitarke, JM (2016). Dielectric screening and plasmon resonances in bilayer graphene. PHYSICAL REVIEW B - CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS, 93(3), 035440

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.035440>

52) Revuelta, F; Vergini, E; Benito, RM; Borondo, F (2016). Scar Functions, Barriers for Chemical Reactivity, and Vibrational Basis Sets. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A

<https://doi.org/10.1021/acs.jpca.5b12541>

53) Robledo, M; D6az-Tendero, S; Mart6n, F; Alcam6, M (2016). Theoretical study of the interaction between molecular hydrogen and [MC60]⁺ complexes. RSC ADVANCES, 6(33), 27447-27451

<https://doi.org/10.1039/c6ra00501b>

- 54) Rodríguez-Fernández, J; Wang, Y; Alcamí, M; Martín, F; Otero, R; Gallego, JM; Miranda, R (2016). Thermal transition from a disordered, 2D network to a regular, 1D, Fe(II)-DCNQI coordination network. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C*, 120(30), 16712-16721
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b04288>
- 55) Sánchez Muzas, Alberto Pablo (2016). Scattering of H(D) from LiF(1 0 0) under fast grazing incidence conditions: To what extent is classical dynamics a useful tool?. *NUCLEAR INSTRUMENTS AND METHODS IN PHYSICS RESEARCH, SECTION B: BEAM INTERACTIONS WITH MATERIALS AND ATOMS*, 382, 49-53
<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2014.11.009>
- 56) Sánchez, JP; Aguirre, NF; Díaz-Tendero, S; Martín, F; Alcamí, M (2016). Structure, Ionization, and Fragmentation of Neutral and Positively Charged Hydrogenated Carbon Clusters: $C_nH_m^{q+}$ ($n = 1-5$, $m = 1-4$, $q = 0-3$). *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A*, 120(4), 588-605
<https://doi.org/10.1021/acs.jpca.5b10143>
- 57) Seijo, L; Barandiarán, Z (2016). Red shifts of the yellow emission of YAG:Ce³⁺ due to tetragonal fields induced by cationic substitutions. *RSC ADVANCES*, 6(31), 25741-25743
<https://doi.org/10.1039/c6ra02611g>
- 58) Silva, REF; Riviere, P; Morales, F; Smirnova, O; Ivanov, M; Martín, F (2016). Even harmonic generation in isotropic media of dissociating homonuclear molecules. *SCIENTIFIC REPORTS*, 6, 32653
<https://doi.org/10.1038/srep32653>
- 59) Stradi, Daniele; Borca, Bogdana; Barja, Sara; Garnica, Manuela; Díaz, Cristina; Rodríguez-García, Josefa M.; Alcamí, Manuel; Vázquez de Parga, Amadeo L.; Miranda, Rodolfo; Martín, Fernando (2016). Understanding the self-assembly of TCNQ on Cu(111): a combined study based on scanning tunnelling microscopy experiments and density functional theory simulations. *RSC ADVANCES*, 6(18), 15071-15079
<https://doi.org/10.1039/C5RA26320D>
- 60) Streck, W.; Tomala, R.; Marciniak, L.; Lukaszewicz, M.; Cichy, B.; Stefanski, M.; Hreniak, D.; Kedzior, A.; Krosnicki, M.; Seijo, L. Broadband anti-Stokes white emission of Sr₂CeO₄ nanocrystals induced by IR laser irradiation. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*, 18(40), 27921-27927
<https://doi.org/10.1039/c6cp04904d>
- 61) Waitz, M.; Metz, D.; Lower, J.; Schober, C.; Keiling, M.; Pitzer, M.; Mertens, K.; Martins, M.; Viehhaus, J.; Klumpp, S.; Weber, T.; Schmidt-Böcking, H.; Schmidt, L.P.H.; Morales, F.; Miyabe, S.; Rescigno, T.N.; McCurdy, C.W.; Martín, F.; Williams, J.B.; Schöffler, M.S.; Jahnke, T.; Dörner, R. Two-particle interference of electron pairs on a molecular level. *PHYSICAL REVIEW LETTERS* 117 (8) : 083002
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.083002>
- 62) Wang, Y; Díaz-Tendero, S; Martín, F; Alcamí, M (2016). Key Structural Motifs To Predict the Cage Topology in Endohedral Metallofullerenes. *JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY*, 138(5), 1551-1560
<https://doi.org/10.1021/jacs.5b10591>

63) Yáñez, M; Mó, O; Montero-Campillo, M (2016). Beryllium subphthalocyanines self-assembling properties. CANADIAN JOURNAL OF CHEMISTRY, 94(12), 1015-1021
<https://doi.org/10.1139/cjc-2016-0283>

64) Yáñez, M; Montero-Campillo, MM; Mó, O; Benidar, A; Rouxel, C; Kerisit, N; Trolez, Y; Guillemin, JC (2016). Gas Phase Infrared Spectroscopy of Substituted Cyanobutadiynes. The Role Played by Bromine Atom and Methyl Group as Substituents. CHEMPHYSICHEM, 17(7), 1018-1024
<https://doi.org/10.1002/cphc.201501153>

OTRAS PUBLICACIONES

Se incluyen monografías, capítulos de libros, conferencias publicadas, correcciones, editoriales, letters, notas, libro de actas, meeting-abstracts y working papers

Capítulos de libro

1) Mykolayivna-Lemishko, Kateryna; Bistoni, Giovanni; Belpassi, Leonardo; Tarantelli, Francesco; Montero Campillo, M. Merced and Yáñez, Manuel (2016). Charge Transfer in Beryllium Bonds and Cooperativity of Beryllium and Halogen Bonds. A New Perspective. EN: APPLICATIONS OF TOPOLOGICAL METHODS IN MOLECULAR CHEMISTRY, Pages 461-489, ISBN: 978-3-3-319-29022-5

2) Seijo, L., Barandiarán, Z. Ab Initio Calculations on Excited States of Lanthanide Containing Materials. HANDBOOK ON THE PHYSICS AND CHEMISTRY OF RARE EARTHS, Vol. 50, 2016, pp. 65- 89

3) Sindona, Antonello; Pisarra, Michele; Mencarelli, Davide; Pierantoni, Luca; Bellucci, Stefano (2016). Plasmon Modes in Extrinsic Graphene: Ab initio Simulations vs Semi-classical Models. FUNDAMENTAL AND APPLIED NANO-ELECTROMAGNETICS, 125-144
https://doi.org/10.1007/978-94-017-7478-9_7

Editoriales, Notas, Letters

4) Ares, P; Aguilar-Galindo, F; Rodríguez-San-Miguel, D; Aldave, DA; Díaz-Tendero, S; Alcamí, M; Martín, F; Gómez-Herrero, J; Zamora, F (2016). Antimonene: Mechanical Isolation of Highly Stable Antimonene under Ambient Conditions (Adv. Mater. 30/2016). ADVANCED MATERIALS, 28(30), 6515
<https://doi.org/10.1002/adma.201670209>

5) Jorge, A.; Errea, LF.; Illescas, C.; Méndez, L. (2016). Comment on Classical description of H(1s) and H*(n=2) for cross-section calculations relevant to charge-exchange diagnostics. PHYSICAL REVIEW A, 93(6), 066701
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.93.066701>

Meeting-Abstract

6) Nisoli, M; Martín, F; Greenwood, J; Declava, P; Palacios, A; Poletto, L; Frassetto, F; de Camillis, S; Ayuso, D; Trabattoni, A; Mansson, E; Galli, M; Castrovilli, M; Calegari, F (2016). Ultrafast charge

dynamics induced by XUV attosecond pulses in bio-relevant molecules. OPTICS INFOBASE CONFERENCE PAPERS, Part F20-UP 2016
<https://doi.org/10.1364/UP.2016.UM1A.1>

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

	Proyectos en ejecución	En colaboración
QUIMICA	22	1
TOTAL FACULTAD CIENCIAS	399	80

1) Cálculo de datos atómicos y moleculares fundamentales para la modelización del borde del plasma en iter

Referencia: ENE2014-52432-R

A desarrollar entre: 2015 - 2017

Investigadores UAM: Méndez Ambrosio, Luis / Luis F. Errea Ruiz, Ismanuel Rabadán Romero, Clara Illescas Rojas, Alba M^a Jorge Palacios, Jaime Suárez Corujo

2) Caos cuántico y clásico en sistemas dinámicos y complejidad

Referencia: MTM2015-

A desarrollar entre: 2016 - 2018

Investigadores UAM: Borondo Rodríguez, Florentino

3) Cátedra UAM-FUJITSU en Computación Científica y Big Data

Referencia: FUAM 120600

A desarrollar entre: 2014 - 2018

Investigadores UAM: Martín García, Fernando

4) Computación en Ciencia de Attosegundos y de materiales: afrontando los nuevos retos de la física y la química actuales

Referencia: FIS2016-77889-R

A desarrollar entre: 2016 - 2020

Investigadores UAM: Díaz Blanco, Cristina / González Vázquez, Jesús / Wang, Yang/ Palacios Cañas, Alicia / Corral Pérez, Inés / Martín García, Fernando

5) Computación en ciencia de attosegundos y de materiales: derribando la frontera entre la física y la química

Referencia: FIS2013-42002-R

A desarrollar entre: 2014 - 2017

Investigadores UAM: Gonzalez Vázquez, Jesús; Martín García, Fernando; Riviere Herrera, Paula; Luca Argenti ; Díaz Blanco, Cristina ; Corral Pérez, Inés ; Palacios Cañas, Alicia

6) Dinámicas a diferentes escalas: desde moléculas pequeñas aisladas a nanodispositivos complejos

Referencia: CTQ2013-43698-P

A desarrollar entre: 2014 - 2017

Investigadores UAM: Mó Romero, Otilia / Díaz-Tendero Victoria, Sergio / Alcamí Pertejo, Manuel / Luna Fernández, Alberto

7) Diseño de nuevos compuestos por medio de métodos teóricos

Referencia: 900T002684

A desarrollar entre: 2014 - 2016

Investigadores UAM: Alcamí Pertejo, Manuel

8) Disociación homolítica de enlaces O-H: Aplicaciones prácticas e implicaciones en Química, Física y Bioquímica

Referencia: FQM790

A desarrollar entre: 2014 - 2019

Investigadores UAM: Marcos Laguna, M^a Luisa

9) Erasmus+ Master "Theoretical Chemistry and Computational Modelling"

Referencia: H2020-MSCA-ITN-2014

A desarrollar entre: 2015 - 2019

Investigadores UAM: Yáñez Montero, Manuel

10) Estudio teórico y computacional de procesos atómicos en plasmas

Referencia: Proyecto de Cooperación Interuniversitaria UAM-Santander con Asia

A desarrollar entre: 2015 - 2016

Investigadores UAM: Rabadán Romero, Ismanuel / Méndez Ambrosio, Luis

11) European Joint Doctorate "Theoretical Chemistry and Computational Modelling"

Referencia: ITN-EJD GA 642294-TCCM

A desarrollar entre: 2015 - 2018

Investigadores UAM: Yáñez Montero, Manuel / Alcamí Pertejo, Manuel / Corral Pérez, Inés

12) Interacciones no covalentes y quiralidad en nuevos materiales

Referencia: CTQ2012-35513-02-01

A desarrollar entre: 2013 - 2016

Investigadores UAM: Yáñez Montero, Manuel / Lamsabhi, Al Mokhtar / Montero Campillo, M. de La Merced / Mó Romero, Otilia / Hurtado Ocampo, Sandra Marcela / Martín Sómer, Ana / Martínez Fernández, Lara / Brea Noriega, Oriana / Pablo Sanz Mercado / Inés Corral Pérez

13) Laboratorio Internacional Asociado. (LIA) Fragmentation DYNAMics of complex Molecular systems - DYNAMICS

Referencia: LIA-DYNAMICS

A desarrollar entre: 2013 - 2016

Investigadores UAM: Fernando Martín García, Manuel Alcamí Pertejo, Sergio Díaz-Tendero Victoria, Yang Wang

14) Luminiscencia y transferencia de energía en materiales fosforescentes y de centelleo con lantánidos, útiles en iluminación e imágenes médicas. Estudios ab initio

Referencia: MAT2014-54395-P

A desarrollar entre: 2015 - 2017

Investigadores UAM: Barandiarán Piedra, Zoila / Luis Seijo Loché

15) Materiales avanzados de carbono para fotovoltaica molecular (FOTOCARBON)

Referencia: S2013/MIT-2841

A desarrollar entre: 2014 - 2018

Investigadores UAM: Trukhina, Olga / Martínez Díaz, Victoria / Torre Ponce, Gema De La / Bottari, Giovanni / Pardo Rodríguez, Virtudes / Vazquez Bueno, Purificación / Urbani, Maxence

Raphael / Garcia Iglesias, Miguel / Caballero Calvo, Maria Esmeralda / Rodriguez Morgade, M / Yáñez, M / Mó, O / Lamsabhi, A.M / Corral, I / Montero-Campillo, MM
En colaboración: Departamento de Química Orgánica de la Universidad Complutense. Instituto de Ciencia Médica

16) Modificación de la reactividad y diseño de nuevos materiales mediante enlaces de Berilio y otras interacciones no-covalentes

Referencia: CTQ2015-63997-C2-1-P

A desarrollar entre: 2016 - 2018

Investigadores UAM: Manuel Yáñez Montero, Otilia Mó Romero, Al Mokhtar Lamsabhi, Inés Corral Pérez, Oriana Brea Noriega, Serra Arlanscan

17) Nuevas fronteras del nanomagnetismo fundamental y aplicado (NANOFRONTMAG-CM, Grupo Teórico de la UAM)

Referencia: S2013/MIT-2850

A desarrollar entre: 2014 - 2018

Investigadores UAM: Aliev Kazanski, Farkhad / Martin Garcia, Fernando / Ramos Ruiz, Miguel Angel / Suderow, Hermann Jesus / Agrait De La Puente, Mario Nicolas / Miranda Soriano, Rodolfo / Alcamí Pertejo, Manuel / Diaz-Tendero, Sergio / Wang, Yang
Departamento de Física de la Materia Condensada

18) Simulaciones atómicas de primeros principios metodología y aplicaciones sistemas complejos.

Referencia: FIS2012-37549-C05-03

A desarrollar entre: 2013 - 2016

Investigadores UAM: Soler Torroja, Jose Maria / Yndurain Muñoz, Felix / Gomez Santos, Guillermo / Alvarez Carrera, Jose Vicente / Mori Sanchez, Paula / Fritz, Michelle Marie / Fernandez Serra, Maria Victoria / Silva Alexandre, Simone
Departamento de Física de la Materia Condensada

19) Sistemas moleculares complejos en condiciones atípicas: ionización y excitación de moléculas, agregados y materiales híbridos

Referencia: CTQ2016-76061-P

A desarrollar entre: 2016 - 2019

Investigadores UAM: Alcamí Pertejo, Manuel

20) Transgrediendo la aproximación Born-Oppenheimer en colisiones molécula-superficie en tiempo real

Referencia: CTQ2013-50150-EXP

A desarrollar entre: 2014 - 2016

Investigadores UAM: Díaz Blanco, Cristina / González Vázquez, Jesús / Corral Pérez, Inés

21) XUV/X ray lasers for ultrafast electronic control in chemistry - XCHEM

Referencia: ERC-AdG-2011-GA 290853-XCHEM

A desarrollar entre: 2012 - 2017

Investigadores UAM: Martín García, Fernando / Cristina Díaz Blanco, Jesús González Vázquez, Luca Argenti, Alicia Palacios Cañas, Paula Riviere, Inés Corral Pérez, Manuel Alcamí Pertejo, Sergio Díaz-Tendero Victoria

22) XUV/X-ray light and fast ions for ultrafast chemistry (XLIC)

Referencia: COST Action CM1204

A desarrollar entre: 2013 - 2017

Investigadores UAM: Manuel Alcamí Pertejo, Manuel Yáñez Montero, Otilia Mó Romero, Sergio Díaz-Tendero Victoria, Fernando Martín García, Inés Corral Pérez, Cristina Díaz Blanco, Jesús Gonzalez Vázquez, Clara Illescas Rojas, Luis Mendez Ambrosio, Alicia Palacios Cañas,

AYUDAS INDIVIDUALES

	Contratos Predoc	Juan de la Cierva	Ramón y Cajal	Otras	TOTAL
QUIMICA	3	0	2	0	5
TOTAL FACULTAD CIENCIAS	64	8	19	7	98

Dotación adicional Ayudas para Contratos Predoctorales para la formación de Doctores

AGUILAR-GALINDO RODRIGUEZ, FERNANDO. Referencia: BES-2014-069545 (2015-2018).

ARSLANCAN, SERRA. Referencia: BES-2013-065420 (2014-2017).

CUETO CORDONES, MARCOS DEL. Referencia: BES-2014-069544 (2015-2018).

Dotación Adicional Ramón y Cajal

DIAZ-TENDERO VICTORIA, SERGIO. Referencia: RYC-2010-07019 (2011-2017)

MORI SANCHEZ, PAULA. Referencia RYC-2009-04762 (2010-2016)

DIAZ BLANCO, CRISTINA. Referencia: RYC-2013-14586 (2014-2018).

PALACIOS CAÑAS, ALICIA. Referencia: RYC-2014-16706 (2015-2019)

TESIS DOCTORALES 2016

Tesis leídas	Dirigidas
2	2

Programa de Doctorado: Química Teórica y Modelización Computacional (2)

Scattering of atoms and diatomic molecules from non-metal surfaces / Sánchez Muzas, Alberto Pablo

Dirigida por: Martín García, Fernando; Díaz Blanco, Cristina

Study of diatomic molecules under short intense laser pulses / Ferreira Da Silva, Rui Enmanuel

Dirigida por: Riviere Herrera, Paula; Martín García, Fernando