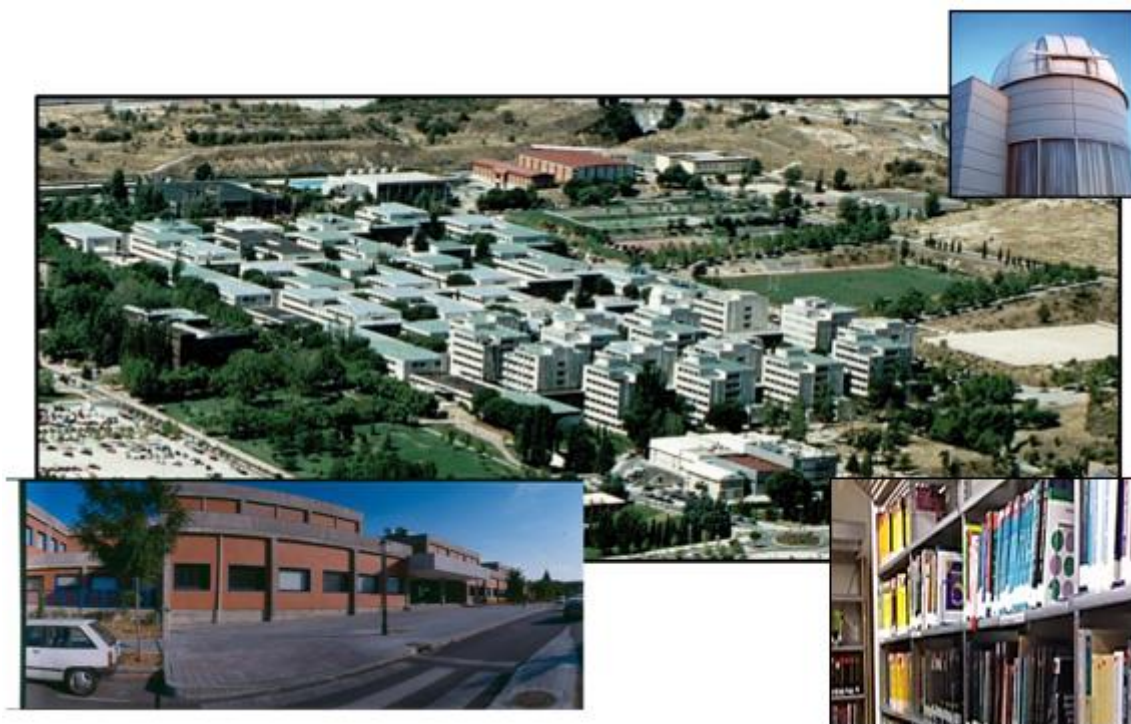




FACULTAD DE
CIENCIAS



Biblioteca de Ciencias
UAM_Biblioteca Universidad Autónoma de Madrid



DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

MEMORIA DE INVESTIGACIÓN

2019

MEMORIA DE INVESTIGACIÓN DEL DEPARTAMENTO DE QUÍMICA 2019

El presente documento tiene como objetivo recoger los resultados de la investigación realizada a lo largo de 2019 por los profesores e investigadores del Departamento de Química de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de Madrid. Recogiendo las publicaciones, los proyectos de Investigación en los que participa, las tesis doctorales, tanto dirigidas como tutorizadas por el PDI del Departamento y los grupos de investigación reconocidos por la UAM en los que participan.

La Memoria se basa en los perfiles personales del PDI del Departamento, que figuran en el Portal de producción científica de la UAM, al tiempo que se verifica esta información, la Biblioteca actualiza y completa dichos perfiles individuales.

Esta memoria ha sido realizada por la Biblioteca de Ciencias contando con las aportaciones facilitadas por los integrantes del departamento, Coordinadores de los grupos de investigación y por el Decanato de la Facultad, a quienes agradecemos enormemente sus valiosas aportaciones.

INVESTIGADORES	<p>490 PDI PERMANENTE</p>	<p>EDAD Y GÉNERO DEL PDI</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Edad</th> <th>Hombres</th> <th>Mujeres</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>35-44 AÑOS</td> <td>~10</td> <td>~10</td> </tr> <tr> <td>45-54 AÑOS</td> <td>~15</td> <td>~15</td> </tr> <tr> <td>55-64 AÑOS</td> <td>~25</td> <td>~25</td> </tr> <tr> <td>65 Ó + AÑOS</td> <td>~10</td> <td>~10</td> </tr> </tbody> </table>	Edad	Hombres	Mujeres	35-44 AÑOS	~10	~10	45-54 AÑOS	~15	~15	55-64 AÑOS	~25	~25	65 Ó + AÑOS	~10	~10	<p>119 CATEDRÁTICOS</p> <p>244 TITULARES</p> <p>127 CONTR. DOCTORES</p>			
	Edad	Hombres	Mujeres																		
35-44 AÑOS	~10	~10																			
45-54 AÑOS	~15	~15																			
55-64 AÑOS	~25	~25																			
65 Ó + AÑOS	~10	~10																			
<p>547 PDI NO PERMANENTE</p>	<p>237 PDI Doctor no permanente</p> <p>288 Personal Investigador en Formación</p> <p>22 Profesores Eméritos</p>																				
PROYECTOS	<p>FINANCIACIÓN</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Financiación</th> <th>Porcentaje</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>PÚBLICA</td> <td>92%</td> </tr> <tr> <td>PRIVADA</td> <td>8%</td> </tr> </tbody> </table>	Financiación	Porcentaje	PÚBLICA	92%	PRIVADA	8%	<p>435 PROYECTOS VIGENTES</p>	<p>ENTIDADES FINANCIADORAS</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Entidad</th> <th>Porcentaje</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>MINISTERIO</td> <td>44%</td> </tr> <tr> <td>UE</td> <td>17%</td> </tr> <tr> <td>UAM</td> <td>14%</td> </tr> <tr> <td>CAM</td> <td>13%</td> </tr> <tr> <td>OTRAS</td> <td>12%</td> </tr> </tbody> </table>	Entidad	Porcentaje	MINISTERIO	44%	UE	17%	UAM	14%	CAM	13%	OTRAS	12%
Financiación	Porcentaje																				
PÚBLICA	92%																				
PRIVADA	8%																				
Entidad	Porcentaje																				
MINISTERIO	44%																				
UE	17%																				
UAM	14%																				
CAM	13%																				
OTRAS	12%																				
TESIS DOCTORALES	<p>233 TESIS DOCTORALES</p>	<p>FACULTAD DE CIENCIAS 2019</p>																			
PUBLICACIONES	<p>COLABORACIÓN EN LA AUTORÍA</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Colaboración</th> <th>Porcentaje</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>INTERNACIONAL</td> <td>67%</td> </tr> <tr> <td>NACIONAL</td> <td>23%</td> </tr> <tr> <td>DEPARTAMENTO</td> <td>6%</td> </tr> <tr> <td>UAM</td> <td>4%</td> </tr> </tbody> </table>	Colaboración	Porcentaje	INTERNACIONAL	67%	NACIONAL	23%	DEPARTAMENTO	6%	UAM	4%	<p>1.648 PUBLICACIONES</p> <p>1.445 ARTÍCULOS</p>	<p>82% ARTÍCULOS Q1</p>								
Colaboración	Porcentaje																				
INTERNACIONAL	67%																				
NACIONAL	23%																				
DEPARTAMENTO	6%																				
UAM	4%																				

INVESTIGADORES	<p>12</p> <p>PDI PERMANENTE</p>	<p>EDAD Y GÉNERO DEL PDI</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Edad</th> <th>Hombres</th> <th>Mujeres</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>35-44 AÑOS</td> <td>1</td> <td>0</td> </tr> <tr> <td>45-54 AÑOS</td> <td>0</td> <td>4</td> </tr> <tr> <td>55-64 AÑOS</td> <td>1</td> <td>1</td> </tr> <tr> <td>65 Ó + AÑOS</td> <td>0</td> <td>1</td> </tr> </tbody> </table>	Edad	Hombres	Mujeres	35-44 AÑOS	1	0	45-54 AÑOS	0	4	55-64 AÑOS	1	1	65 Ó + AÑOS	0	1	<p>5 CATEDRÁTICOS</p> <p>4 TITULARES</p> <p>3 CONTR. DOCTORES</p>
	Edad	Hombres	Mujeres															
35-44 AÑOS	1	0																
45-54 AÑOS	0	4																
55-64 AÑOS	1	1																
65 Ó + AÑOS	0	1																
<p>21</p> <p>PDI NO PERMANENTE</p>	<p>11 PDI Doctor no permanente</p> <p>8 Personal Investigador en Formación</p> <p>2 Profesores Eméritos</p>																	
PROYECTOS	<p>FINANCIACIÓN</p> <p>PÚBLICO 100%</p>	<p>24</p> <p>PROYECTOS VIGENTES</p>	<p>ENTIDADES FINANCIADORAS</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Entidad</th> <th>Porcentaje</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>MINISTERIO</td> <td>54%</td> </tr> <tr> <td>UE</td> <td>17%</td> </tr> <tr> <td>UAM</td> <td>17%</td> </tr> <tr> <td>CAM</td> <td>4%</td> </tr> <tr> <td>OTROS</td> <td>8%</td> </tr> </tbody> </table>	Entidad	Porcentaje	MINISTERIO	54%	UE	17%	UAM	17%	CAM	4%	OTROS	8%			
Entidad	Porcentaje																	
MINISTERIO	54%																	
UE	17%																	
UAM	17%																	
CAM	4%																	
OTROS	8%																	
TESIS DOCTORALES	<p>5</p> <p>TESIS DOCTORALES</p>	<p>DEPARTAMENTO DE QUÍMICA</p> <p>2019</p>																
PUBLICACIONES	<p>COLABORACIÓN EN LA AUTORÍA</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Categoría</th> <th>Porcentaje</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>INTERNACIONAL</td> <td>77%</td> </tr> <tr> <td>NACIONAL</td> <td>19%</td> </tr> <tr> <td>UAM</td> <td>2%</td> </tr> <tr> <td>DEPARTAMENTO</td> <td>2%</td> </tr> </tbody> </table>	Categoría	Porcentaje	INTERNACIONAL	77%	NACIONAL	19%	UAM	2%	DEPARTAMENTO	2%	<p>92</p> <p>PUBLICACIONES</p>	<p>76%</p> <p>ARTÍCULOS Q1</p>					
Categoría	Porcentaje																	
INTERNACIONAL	77%																	
NACIONAL	19%																	
UAM	2%																	
DEPARTAMENTO	2%																	
		<p>83</p> <p>ARTÍCULOS</p>																

ÍNDICE

1. TABLAS Y GRÁFICOS
2. METODOLOGÍA Y FUENTES
3. PUBLICACIONES
4. PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y CONTRATOS CON EMPRESAS
5. TESIS DOCTORALES
6. GRUPOS DE INVESTIGACIÓN RECONOCIDOS DE LA UAM
7. PERSONAL DOCENTE E INVESTIGADOR

1. TABLAS Y GRÁFICOS

1.1. Tabla de Publicaciones

AÑO	Total publicaciones	Nº Artículos	Q1	% Q1	Publicaciones/PDI permanente
Departamento de Química					
2019	92	83	63	75,90%	6,13
2018	93	86	71	82,56%	6,20
2017	61	54	50	92,59%	4,36
2016	70	64	57	89,06%	5,38
FACULTAD DE CIENCIAS					
2019	1.648	1.445	1.188	82,21%	3,36
2018	1.504	1.292	1.056	82,00%	2,86
2017	1.104	1.104	807	73,10%	2,19
2016	1.598	1.403	1.025	73,06%	3,12

1.2. Tabla de Proyectos de Investigación y Contratos con empresas

DEPARTAMENTO	VIGENTES	TIPO DE FINANCIACION		ENTIDADES FINANCIADORAS				
		PÚBLICA	PRIVADA	MINISTERIO	UE	CAM	UAM	OTRAS
QUI	24	24	0	13	4	1	4	2
FACULTAD	435	399	36	224	66	29	50	76

1.3. Tabla de Tesis Doctorales

DEPARTAMENTO	2019		
	TESIS DEFENDIDAS		
	Total	Dirigidas	Tutorizadas
QUIMICA	5	5	0
TOTAL	233	105	128

2. METODOLOGÍA

La presente Memoria de Investigación del Departamento, extrae la información de distintas herramientas, que se relacionan a continuación en las Fuentes.

Tras un proceso de verificación y depuración se generó una primera versión de datos que se remitió al departamento para su revisión en mayo de 2020.

Una vez recibidas las propuestas de modificación o inclusión, se revisan y validan, añadiéndose a la versión final, junto con las nuevas incorporaciones detectadas por la biblioteca.

Finalizada la revisión, se analizan los datos relativos a indicios de calidad de los artículos, incorporándose al presente documento.

Se acompañan a esta relación de la memoria, tablas y gráficos a fin de facilitar la comprensión de los datos globales.

Se incluyen tablas comparativas (2016-2019) del departamento, tanto con sus resultados como con la media de la Facultad, en lo referente a: Publicaciones: artículos con factor de impacto, porcentaje de artículos publicados en revistas del primer cuartil, ratios de publicación.

FUENTES UTILIZADAS

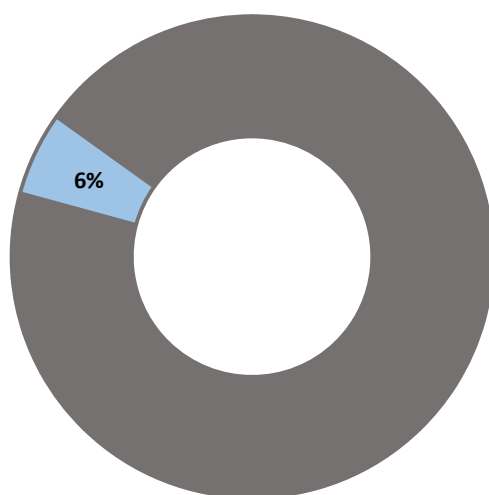
- Para las publicaciones
 - Portal de Producción Científica de la UAM [IMarina]
 - Revisión facilitada por los Departamentos
 - Bases de datos: WoS, Scopus y Pubmed.
 - A petición de algunos Departamentos, se han incorporado publicaciones de profesores e investigadores no presentes en el Portal de Producción Científica de la UAM.
- Para los indicios de calidad.
 - Se utilizan los indicadores de factor de impacto de las publicaciones JCR y SJR (Scimago) del año 2019.
- Para los investigadores
 - Portal de Producción Científica de la UAM, con datos procedentes de la base de datos HOMINIS.
 - La identificación del PDI permanente se ha hecho atendiendo a las categorías seleccionadas por el Decanato de la Facultad de Ciencias: Catedrático, Profesor Titular y Profesor Contratado Doctor.
 - Para PDI no permanente, Doctor y En Formación, se ha utilizado la información procedente del Portal de Producción Científica. Organizado de la siguiente manera
 - PDI Doctor no permanente:
 - Profesor Contratado Doctor Interino
 - Profesor Titular de Universidad Interino

- Profesor Ayudante Doctor
- Ramón y Cajal
- Otros Contratos Postdoctorales: Atracción de Talento modalidades CAM 1 y 2, postdoc CAM, Juan de la Cierva (incorporación/formación)
 - Personal Investigador en Formación (PIF)
 - Ayudantes
 - Contratados predoctorales (Ley de la Ciencia artículo 21): FPI, FPU, FPI-UAM
 - Otros contratados predoctorales: predoctorales CAM, Ayudantes de Investigación.
 - Para los Profesores eméritos se ha utilizado la información procedente del Vicerrectorado de Personal Docente e Investigador
- Para los Proyectos de investigación y contratos con empresas
 - Portal de Producción Científica de la UAM
 - Cotejo con los distintos boletines oficiales: BOE, BOCAM
 - Revisión facilitada por los Departamentos
- Para las Tesis Doctorales
 - Sistema integrado de Gestión Bibliotecaria, al ser la Biblioteca de Ciencias depositaria de todas las tesis doctorales leídas en la Facultad de Ciencias.
 - Escuela de Doctorado, para completar información relativa a los planes de los programas de doctorado
 - Repositorio Institucional que aporta enlace permanente (handle)
 - Revisión facilitada por los Departamentos, para tesis no leídas en la UAM.
- Para los Grupos de Investigación
 - Página Web de la UAM
 - Revisión facilitada por los Coordinadores de los Grupos de Investigación

3.PUBLICACIONES

El Departamento de Química, ha generado 92 publicaciones, de las que 83 son artículos científicos. De éstos, un total de 63 se han publicado en revistas del primer cuartil, que corresponde al 76% de los artículos publicados.

% de Publicaciones por Departamento



El 6% de las publicaciones de la Facultad de Ciencias han sido firmadas por PDI del Departamento de Química

Dónde publica el Departamento

Las revistas en que se han publicado un mayor número de artículos son:

TÍTULO DE REVISTAS	Nº ART.	CUARTILES
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS	14	Q1; Q2
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A.	6	Q2; Q3
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS.	6	Q1; Q2
CHEMPHOTOCHEM	4	Q3
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS.	4	Q1; Q2
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C.	4	Q1; Q2
COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY.	3	Q3; Q4
PHYSICAL REVIEW A.	3	Q1; Q2
PHYSICAL REVIEW E.	3	Q1; Q2

Relación de Publicaciones del Departamento, ordenadas alfabéticamente por autor

Artículos

1. Aguilar-Galindo, F.; Díaz-Tendero, S. (2019). Outstanding Energy Exchange between Organic Molecules and Metal Surfaces: Decomposition Kinetics of Excited Vinyl Derivatives Driven by the Interaction with a Cu(111) Surface. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. (ISSN: 19327447). 123(32): 19625-19636. DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b04898

2. Aguilar-Galindo, F.; Díaz-Tendero, S.; Borisov, AG. (2019). Electronic Structure Effects in the Coupling of a Single Molecule with a Plasmonic Antenna. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C*. (ISSN: 19327447). 123(7): 4446-4456. DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b11872
3. Aguilar-Galindo, F.; Tuñón, AM.; Fraile, A.; Alemán, J.; Díaz-Tendero, S. (2019). Role of intramolecular hydrogen bonds and electron withdrawing groups in the acidity of aldimines and ketimines: a density functional theory study. *THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS*. (ISSN: 1432881X). 138(4): 59. DOI: 10.1007/s00214-019-2451-0
4. Aguilera-Porta, N.; Corral, I.; Muñoz-Muriedas, J.; Granucci, G. (2019). Excited state dynamics of some nonsteroidal anti-inflammatory drugs: A surface-hopping investigation. *COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY*. (ISSN: 2210271X). 1152: 20-27. DOI: 10.1016/j.comptc.2019.02.009
5. Aguilera-Porta, N.; Granucci, G.; Muñoz-Muriedas, J.; Corral, I. (2019). Unveiling the photophysics of thiourea from CASPT2/CASSCF potential energy surfaces and singlet/triplet excited state molecular dynamics simulations. *COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY*. (ISSN: 2210271X). 1151: 36-42. DOI: 10.1016/j.comptc.2019.01.026
6. Aguirre, N.; Díaz-Tendero, S.; IdBarkach, T.; Chabot, M.; Béroff, K.; Alcamí, M.; Martín, F. (2019). Fully versus constrained statistical fragmentation of carbon clusters and their heteronuclear derivatives. *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*. (ISSN: 00219606). 150(14): 144301. DOI: 10.1063/1.5083864
7. Alkorta, I.; Elguero, J.; Yáñez, M.; Mó, O.; Montero-Campillo, M. (2019). Relativistic effects on NMR parameters of halogen-bonded complexes. *MOLECULES*. (ISSN: 14203049). 24(23): 4399. DOI: 10.3390/molecules24234399
8. Alkorta, I.; Montero-Campillo, M.; Elguero, J.; Yáñez, M.; Mó, O. (2019). Complexes between H₂ and neutral oxyacid beryllium derivatives. The role of angular strain. *MOLECULAR PHYSICS*. (ISSN: 00268976). 117(9-12): 1142-1150. DOI: 10.1080/00268976.2018.1521012
9. Alkorta, I.; Montero-Campillo, MM.; Mo, O.; Elguero, J.; Yáñez, M. (2019). Weak Interactions Get Strong: Synergy between Tetrel and Alkaline-Earth Bonds. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A*. (ISSN: 10895639). 123(32): 7124-7132. DOI: 10.1021/acs.jpca.9b06051
10. Amini, K.; Biegert, J.; Calegari, F.; Chacón, A.; Ciappina, MF.; Dauphin, A.; Efimov, DK.; Figueira de Morisson Faria, C.; Giergiel, K.; Gniewek, P.; Landsman, AS.; Lesiuk, M.; Mandrysz, M.; Maxwell, AS.; Moszynski, R.; Ortmann, L.; Pérez-Hernández, JA.; (2019). Symphony on strong field approximation. *REPORTS ON PROGRESS IN PHYSICS*. (ISSN: 00344885). 82(11): 116001. DOI: 10.1088/1361-6633/ab2bb1
11. Ares, P.; Pisarra, M.; Segovia, P.; Díaz, C.; Martín, F.; Michel, E.; Zamora, F.; Gómez-Navarro, C.; Gómez-Herrero, J. (2019). Tunable Graphene Electronics with Local Ultrahigh Pressure. *ADVANCED FUNCTIONAL MATERIALS* (ISSN: 10579257). 29(8): 1806715. DOI: 10.1002/adfm.201806715
12. Arranz, F.; Benito, R.; Borondo, F. (2019). Shannon entropy at avoided crossings in the quantum transition from order to chaos. *PHYSICAL REVIEW E*. (ISSN: 24700045). 99(6): 062209. DOI: 10.1103/PhysRevE.99.062209
13. Avila Ferrer, F. J.; Angeli, C.; Cerezo, J.; Coriani, S.; Ferretti, A. & Santoro, F. (2019). The Intriguing Case of the One-Photon and Two-Photon Absorption of a Prototypical Symmetric

Squaraine: Comparison of TDDFT and Wave-Function Methods. CHEMPHOTOCHEM (ISSN:23670932). 3 (9): 778-793. DOI: 10.1002/cptc.201900121

14. Banyasz, A.; Balanikas, E.; Martínez-Fernández, L.; Baldacchino, G.; Douki, T.; Improta, R.; Markovitsi, D. (2019). Radicals Generated in Tetramolecular Guanine Quadruplexes by Photoionization: Spectral and Dynamical Features. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. (ISSN: 15206106). 123(23): 4950-4957. DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b02637

15. Barreau, L.; Petersson, C.; León, M.; Klinker, M.; Camper, A.; Marante, C.; Gorman, T.; Kiesewetter, D.; Argenti, L.; Agostini, P.; González-Vázquez, J.; Salieres, P.; DiMauro, LF.; Martín, F. (2019). Disentangling Spectral Phases of Interfering Autoionizing States from Attosecond Interferometric Measurements. PHYSICAL REVIEW LETTERS. (ISSN: 00319007). 122(25): 253203. DOI: 10.1103/PhysRevLett.122.253203

16. Bartsch, T.; Revuelta, F.; Benito, R.; Borondo, F. (2019). Finite-barrier corrections for multidimensional barriers in colored noise. PHYSICAL REVIEW E. (ISSN: 24700045). 99(5): 052211. DOI: 10.1103/PhysRevE.99.052211

17. Bastida, A.; Carmona-García, J.; Zúñiga, J.; Requena, A.; Cerezo, J. (2019). Intraresidual Correlated Motions in Peptide Chains. JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND MODELING. (ISSN: 15499596). 59(11):4524-4527. DOI: 10.1021/acs.jcim.9b00842

18. Boll, D.; Fojón, O.; McCurdy, C.; Palacios, A. (2019). Angularly resolved two-photon above-threshold ionization of helium. PHYSICAL REVIEW A. (ISSN: 24699926). 99(2): 023416. DOI: 10.1103/PhysRevA.99.023416

19. Casado-Sánchez, A.; Uygur, M.; González-Muñoz, D.; Aguilar-Galindo, F.; Nova-Fernández, J.; Arranz-Plaza, J.; Díaz-Tendero, S.; Cabrera, S.; Mancheño, O.; Alemán, J. (2019). 8-Mercaptoquinoline as a Ligand for Enhancing the Photocatalytic Activity of Pt(II) Coordination Complexes: Reactions and Mechanistic Insights. JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY. (ISSN: 00223263). 84(10): 6437-6447. DOI: 10.1021/acs.joc.9b00520

20. Chang, B.; Shin, S.; González-Vázquez, J.; Martín, F.; Malinovsky, V.; Sola, I. (2019). Control defeasance by anti-alignment in the excited state. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. (ISSN: 14639076). 21(42): 23620-23625. DOI: 10.1039/c9cp04427b

21. Chicharro, D.; Marggi Poullain, S.; Rubio-Lago, L.; Bañares, L. (2019). Photodissociation Dynamics and Stereodynamics of Methyl Mercaptan and Dimethyl Sulfide from the Second Absorption Band at 201 and 210 nm. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. (ISSN: 10895639). 123(40): 8552-8561. DOI: 10.1021/acs.jpca.9b07242

22. Chicharro, D.; Poullain, S.; Bañares, L.; Hrodmarsson, H.; García, G.; Loison, J. (2019). Threshold photoelectron spectrum of the CH₂OO Criegee intermediate. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. (ISSN: 14639076). 21(24): 12763-12766. DOI: 10.1039/c9cp02538c

23. Chicharro, D.; Poullain, S.; Zanchet, A.; Bouallagui, A.; García-Vela, A.; Senent, M.; Rubio-Lago, L.; Bañares, L. (2019). Site-specific hydrogen-atom elimination in photoexcited ethyl radical. CHEMICAL SCIENCE. (ISSN: 20416520). 10(26): 6494-6502. DOI: 10.1039/c9sc02140j

24. Corrales, M.; González-Vázquez, J.; De Nalda, R.; Bañares, L. (2019). Coulomb Explosion Imaging for the Visualization of a Conical Intersection. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS. (ISSN: 19487185). 10(2): 138-143. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.8b03726

- 25.** De Vetta, M.; Corral, I. (2019). Insight into the optical properties of meso-pentafluorophenyl(PFP)-BODIPY: An attractive platform for functionalization of BODIPY dyes. *COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY*. (ISSN: 2210271X). 1150: 110-120. DOI: 10.1016/j.comptc.2019.01.014
- 26.** De Vetta, M.; González, L.; Corral, I. (2019). The Role of Electronic Triplet States and High-Lying Singlet States in the Deactivation Mechanism of the Parent BODIPY: An ADC(2) and CASPT2 Study. *CHEMPHOTOCHEM*. (ISSN: 23670932). 3(9): 727-738. DOI: 10.1002/cptc.201800169
- 27.** Del Cueto, M.; Maurer, R.J.; Al Taleb, A., Farías, D.; Martín, F.; Díaz, C. (2019). Performance of van der Waals DFT approaches for helium diffraction on metal surfaces. *JOURNAL OF PHYSICS CONDENSED MATTER*. (ISSN: 09538984). 31(13): 135901-135901. DOI: 10.1088/1361-648X/aafcfcd
- 28.** Del Cueto, M.; Muzas, A.; Frankcombe, T.; Martín, F.; Díaz, C. (2019). Prominent out-of-plane diffraction in helium scattering from a methyl-terminated Si(111) surface. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*. (ISSN: 14639076). 21(28): 15879-15887. DOI: 10.1039/c9cp02141h
- 29.** Del Cueto, M.; Zhou, X.; Muzas, AS.; Díaz, C.; Martín, F.; Jiang, B.; Guo, H. (2019). Quantum Stereodynamics of H-2 Scattering from Co(0001): Influence of Reaction Channels. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C*. (ISSN: 19327447). 123(26): 16223-16231. DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b03470
- 30.** Dorney, K.; Rego, L.; Brooks, N.; San Román, J.; Liao, C.; Ellis, J.; Zusin, D.; Gentry, C.; Nguyen, Q.; Shaw, J.; Picón, A.; Plaja, L.; Kapteyn, H.; Murnane, M.; Hernández-García, C. (2019). Controlling the polarization and vortex charge of attosecond high-harmonic beams via simultaneous spin-orbit momentum conservation. *NATURE PHOTONICS*. (ISSN: 17494885). 13(2): 123-130. DOI: 10.1038/s41566-018-0304-3
- 31.** Engin, S.; González-Vázquez, J.; Maliyar, G.; Milosavljevic, A.; Ono, T.; Nandi, S.; Iablonskyi, D.; Kooser, K.; Bozek, J.; Decleva, P.; Kukk, E.; Ueda, K.; Martín, F. (2019). Full-dimensional theoretical description of vibrationally resolved valence-shell photoionization of H₂O. *STRUCTURAL DYNAMICS-US*. (ISSN: 23297778). 6(5): 054101. DOI: 10.1063/1.5106431
- 32.** Frati, F.; De Groot, F.; Cerezo, J.; Santoro, F.; Cheng, L.; Faber, R.; Coriani, S. (2019). Coupled cluster study of the x-ray absorption spectra of formaldehyde derivatives at the oxygen, carbon, and fluorine K-edges. *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*. (ISSN: 00219606). 151(6): 064107. DOI: 10.1063/1.5097650
- 33.** Gal, JF.; María, PC.; Yáñez, M.; Mó, O. (2019). On the Lewis basicity of phosphoramides: A critical examination of their Donor Number through the comparison of Enthalpies of adduct formation with SbCl₅ and BF₃. *CHEMPHYSICHEM*. (ISSN: 14394235). 20(19): 2566-2576. DOI: 10.1002/cphc.201900691
- 34.** Giacomozzi, L.; D'Ángelo, G.; Díaz-Tendero, S.; De Ruelle, N.; Stockett, M.; Alcamí, M.; Cederquist, H.; Schmidt, H.; Zettergren, H. (2019). Decay pathways for protonated and deprotonated adenine molecules. *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*. (ISSN: 00219606). 151(4): 044306. DOI: 10.1063/1.5109963
- 35.** Gini, A.; Rigotti, T.; Pérez-Ruiz, R.; Uygur, M.; Mas-Ballesté, R.; Corral, I.; Martínez-Fernández, L.; de la Peña O'Shea, V.A.; García Mancheño, O.; Alemán, J. (2019). Mesityl or Imide Acridinium Photocatalysts: Accessible Versus Inaccessible Charge-Transfer States in

Photoredox Catalysis. CHEMPHOTOCHEM (ISSN:23670932). 3 (8): 609-612. DOI: 10.1002/cptc.201900116

36. Guerrero-Corella, A.; Asenjo-Pascual, J.; Pawar, T.; Díaz-Tendero, S.; Martín-Sómer, A.; Gómez, C.; Belmonte-Vázquez, J.; Ramírez-Ornelas, D.; Peña-Cabrera, E.; Fraile, A.; Cruz, D.; Alemán, J. (2019). BODIPY as electron withdrawing group for the activation of double bonds in asymmetric cycloaddition reactions. CHEMICAL SCIENCE. (ISSN: 20416520). 10(15): 4346-4351. DOI: 10.1039/C9SC00959K

37. IdBarkach, T.; Chabot, M.; Beroff, K.; Della Negras, S.; Lesrel, J.; Geslin, F.; Le Padellec, A.; Mahajan, T.; Díaz-Tendero, S. (2019). Breakdown curves of CH₂(+), CH₃(+), and CH₄(+) molecules. ASTRONOMY & ASTROPHYSICS. (ISSN: 14320746). 628: A75. DOI: 10.1051/0004-6361/201935760

38. Iribarren, I.; Montero-Campillo, M.; Alkorta, I.; Elguero, J.; Quiñonero, D. (2019). Cations brought together by hydrogen bonds: The protonated pyridine-boronic acid dimer explained. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. (ISSN: 14639076). 21(10): 5796-5802. DOI: 10.1039/c8cp07542e

39. Itälä, E.; Myllynen, H.; Niskanen, J.; González-Vázquez, J.; Wang, Y.; Ha, D.; Denifl, S.; Kukk, E. (2019). Controlling NO Production Upon Valence Ionization of Nitroimidazoles. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. (ISSN: 00223654). 123(14): 3074-3079. DOI: 10.1021/acs.jpca.8b11342

40. Joos, J.; Seijo, L.; Barandiarán, Z. (2019). Direct Evidence of Intervalence Charge-Transfer States of Eu-Doped Luminescent Materials. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS. (ISSN: 19487185). 10(7): 1581-1586. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.9b00342

41. Jorge, A.; Horbatsch, M.; Illescas, C.; Kirchner, T. (2019). Classical-trajectory Monte Carlo calculations of differential electron-emission cross sections in fast heavy-ion collisions with water molecules. PHYSICAL REVIEW A. (ISSN: 24699926). 99(6): 062701. DOI: 10.1103/PhysRevA.99.062701

42. Kling, N.; Díaz-Tendero, S.; Obaid, R.; Disla, M.; Xiong, H.; Sundberg, M.; Khosravi, S.; Davino, M.; Drach, P.; Carroll, A.; Osipov, T.; Martín, F.; Berrah, N. (2019). Time-resolved molecular dynamics of single and double hydrogen migration in ethanol. NATURE COMMUNICATIONS. (ISSN: 20411723). 10(1): 2813. DOI: 10.1038/s41467-019-10571-9

43. Lamsabhi, AM.; Mó, O.; Yáñez, M.; Salpin, JY. (2019). Combined Experimental and Theoretical Survey of the Gas-Phase Reactions of Serine-Ca²⁺ Adducts. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. (ISSN: 10895639). 123(29): 6241-6250. DOI: 10.1021/acs.jpca.9b03977

44. Lan, J.; Wang, Y.; Alcamí, M.; Martín, F. (2019). Theoretical Study of NO Dissociation on an Open Flat Ru(1011) Surface. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. (ISSN: 19327447). 123(9): 5488-5494. DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b11710

45. Mahajan, T.; Beroff, K.; Pons, B.; Illescas, C.; Chabot, M.; IdBarkach, T.; Launoy, T.; Le Padellec, A.; Jallat, A.; Jorge, A.; Aguirre, NF.; Díaz-Tendero, S. (2019). Excitation, ionization, neutralization and anionic production in collisions of C⁺, N⁺ and C_nN⁺ (n=1-3) with He atoms at 2.2 a.u. velocity; cross sections and dissociation branching ratios. JOURNAL OF PHYSICS B-ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS. (ISSN: 09534075). 52(19): 195204. DOI: 10.1088/1361-6455/ab3625

46. Marggi Poullain, S.; Chicharro, D.; Zanchet, A.; Rubio-Lago, L.; García-Vela, A.; Bañares, L. (2019). The 3s versus 3p Rydberg state photodissociation dynamics of the ethyl radical. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*. (ISSN: 14639076). 21(41): 23017-23025. DOI: 10.1039/c9cp04273c
47. Marggi Poullain, S.; Klinker, M.; González-Vázquez, J.; Martín, F. (2019). Resonant photoionization of O-2 up to the fourth ionization threshold. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*. (ISSN: 14639076). 21(30): 16497-16504. DOI: 10.1039/c9cp02150g
48. Marggi Poullain, S.; Recio, P.; Chicharro, D.; Rubio-Lago, L.; González-Vázquez, J.; Bañares, L. (2019). Dynamics of the photodissociation of ethyl iodide from the origin of the B band. A slice imaging study. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*. (ISSN: 14639076). 21(26): 14250-14260. DOI: 10.1039/c8cp06482b
49. Martín García, F. (2019). El nacimiento de la attoquímica. *INVESTIGACIÓN Y CIENCIA*. (ISSN: 0210-136X). (508): 48-58.
50. Martínez-Fernández, L.; Arslançan, S.; Ivashchenko, D.; Crespo-Hernández, C. E.; Corral, I. (2019). Tracking the origin of photostability in purine nucleobases: the photophysics of 2-oxopurine. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS* (ISSN: 14639076). 21 (25): 13467-13473. DOI: 10.1039/C9CP00879A
51. Martínez-Fernández, L.; Cerezo, J.; Asha, H.; Santoro, F.; Coriani, S. & Improta, R. (2019). The Absorption Spectrum of Guanine Based Radicals: a Comparative Computational Analysis. *CHEMPHOTOCHEM* (ISSN:23670932). 3 (9): 846-855. DOI: 10.1002/cptc.201900107
52. Martínez-Fernández, L.; Changenet, P.; Banyasz, A.; Gustavsson, T.; Markovitsi, D.; Improta, R. (2019). Comprehensive Study of Guanine Excited State Relaxation and Photoreactivity in G-quadruplexes. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS*. (ISSN: 19487185). 10(21): 6873-6877. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.9b02740
53. Martínez-Fernández, L.; Gavvala, K.; Sharma, R.; Didier, P.; Richert, L.; Segarra Martí, J.; Mori, M.; Mely, Y.; Improta, R. (2019). Excited-State Dynamics of Thienoguanosine, an Isomorphous Highly Fluorescent Analogue of Guanosine. *CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL*. (ISSN: 09476539). 25(30): 7375-7386. DOI: 10.1002/chem.201900677
54. Martín-Sómer, A.; Arpa, E.; Díaz-Tendero, S.; Alemán, J. (2019). Intramolecular Hydrogen Bond Activation of Aza-Methylene Imines in Hydrogen Bond Bifunctional Catalysis – A Density Functional Theory Study. *EUROPEAN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY. SPECIAL ISSUE: ORGANIC REACTION MECHANISMS*. (ISSN: 1434193X). 219(2-3): 574-581. DOI: 10.1002/ejoc.201801208
55. Mó, O.; Montero-Campillo, M.; Alkorta, I.; Elguero, J.; Yáñez, M. (2019). Ternary Complexes Stabilized by Chalcogen and Alkaline-Earth Bonds: Crucial Role of Cooperativity and Secondary Noncovalent Interactions. *CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL*. (ISSN: 09476539). 25(50): 11688-11695. DOI: 10.1002/chem.201901641
56. Montero-Campillo, M.; Brea, O.; Mó, O.; Alkorta, I.; Elguero, J.; Yáñez, M. (2019). Gas-phase reactivity tuned through the interaction with alkaline-earth derivatives. *THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS*. (ISSN: 1432881X). 138(5): 62. DOI: 10.1007/s00214-019-2424-3

57. Montero-Campillo, MM.; Brea, O.; Mó, O.; Alkorta, I.; Elguero, J.; Yáñez, M. (2019). Modulating the intrinsic reactivity of molecules through non-covalent interactions. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*. (ISSN: 14639076). 21(5): 2222-2233. DOI: 10.1039/c8cp06908e
58. Montes, J.; Revuelta, F.; Borondo, F. (2019). Quantization Scheme for the Experiments with Walking Droplets. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A*. (ISSN: 00223654). 123(8): 1622-1629. DOI: 10.1021/acs.jpca.8b12043
59. Murillo-Sánchez M.; Marggi Poullain, S.; Loriot, V.; Corrales, M.; Banãres, L. (2019). Femtosecond predissociation dynamics of ethyl iodide in the B-band. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*. (ISSN: 14639076). 21(28): 15695-15704. DOI: 10.1039/c9cp02992c
60. Oberli, S.; González-Vázquez, J.; Rodríguez-Perelló, E.; Sodupe, M.; Martín, F.; Picón, A. (2019). Site-selective-induced isomerization of formamide. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*. (ISSN: 14639076). 21(46): 25626-25634. DOI: 10.1039/c9cp04441h
61. Oostenrijk, B.; Barreiro, D.; Walsh, N.; Sankari, A.; Månsson, E.; Maclot, S.; Sorensen, S.; Díaz-Tendero, S.; Gisselbrecht, M. (2019). Fission of charged nano-hydrated ammonia clusters-microscopic insights into the nucleation processes. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*. (ISSN: 14639076). 21(46): 25749-25762. DOI: 10.1039/c9cp04221k
62. Pellicer-Castell, E.; Belenguer-Sapiña, C.; Borràs, V.; Amorós, P.; El Haskouri, J.; Herrero-Martínez, J.; Mauri-Aucejo, A. (2019). Extraction of aflatoxins by using mesoporous silica (type UVM-7), and their quantitation by HPLC-MS. *MICROCHIMICA ACTA*. (ISSN: 00263672). 186(12): 792. DOI: 10.1007/s00604-019-3958-8
63. Picón, A.; Plaja, L.; Biegert, J. (2019). Attosecond x-ray transient absorption in condensed-matter: A core-state-resolved Bloch model. *NEW JOURNAL OF PHYSICS*. (ISSN: 13672630). 21(4): 043029. DOI: 10.1088/1367-2630/ab1311
64. Pisanty, E.; Machado, G.; Vicuña-Hernández, V.; Picón, A.; Celi, A.; Torres, J.; Lewenstein, M. (2019). Knotting fractional-order knots with the polarization state of light. *NATURE PHOTONICS*. (ISSN: 17494885). 13(8): 569-574. DOI: 10.1038/s41566-019-0450-2
65. Pisanty, E.; Rego, L.; SanRomán, J.; Picón, A.; Dorney, KM.; Kapteyn, HC.; Murnane, MM.; Plaja, L.; Lewenstein, M.; Hernández-García, C. (2019). Conservation of Torus-knot Angular Momentum in High-order Harmonic Generation. *PHYSICAL REVIEW LETTERS*. (ISSN: 00319007). 122(20): 203201. DOI: 10.1103/PhysRevLett.122.203201
66. Plésiat, E.; Cantón, SE.; Bozek, JD.; Decleva, P.; Martín, F. (2019). Resonant Photoelectron Confinement in the SF₆ Molecule. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A*. (ISSN: 00223654). 123(5): 1062-1068. DOI: 10.1021/acs.jpca.8b12237
67. Prampolini, G.; Ingrosso, F.; Cerezo, J.; Iagatti, A.; Foggi, P.; Pastore, M. (2019). Short- and Long-Range Solvation Effects on the Transient UV-Vis Absorption Spectra of a Ru(II)-Polypyridine Complex Disentangled by Nonequilibrium Molecular Dynamics. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS*. (ISSN: 19487185). 10(11): 2885-2891. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.9b00944
68. Resa, S.; Millán, A.; Fuentes, N.; Crovetto, L.; Luisa Marcos, M.; Lezama, L.; Choquesillo-Lazarte, D.; Blanco, V.; Campaña, AG.; Cárdenas, DJ.; Cuerva, JM. (2019). O-H and (CO)N-H bond weakening by coordination to Fe(II). *DALTON TRANSACTIONS*. (ISSN: 14779226). 48(6): 2179-2189. DOI: 10.1039/c8dt04689a

- 69.** Revuelta, F.; Benito, RM.; Borondo, F. (2019). Unveiling the chaotic structure in phase space of molecular systems using Lagrangian descriptors. *PHYSICAL REVIEW E*. (ISSN: 1063651X). 99(3): 032221. DOI: 10.1103/PhysRevE.99.032221
- 70.** Richter, M.; González-Vázquez, J.; Mašín, Z.; Brambila, D.; Harvey, A.; Morales, F.; Martín, F. (2019). Ultrafast imaging of laser-controlled non-adiabatic dynamics in NO₂ from time-resolved photoelectron emission. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*. (ISSN: 14639076). 21(19): 10038-10051. DOI: 10.1039/c9cp00649d
- 71.** Robertson, C.; González-Vázquez, J.; Corral, I.; Díaz-Tendero, S.; Díaz, C. (2019). Nonadiabatic scattering of NO off Au₃ clusters: A simple and robust diabatic state manifold generation method for multiconfigurational wavefunctions. *JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY*. (ISSN: 01928651). 40(6): 794-810. DOI: 10.1002/jcc.25764
- 72.** Salpin, J.; Haldys, V.; Latrous, L.; Guillemin, J.; Tortajada, J.; León, E.; Mó, O.; Yáñez, M.; Montero-Campillo, M. (2019). Alkylation of uracil and thymine in the gas phase through interaction with alkylmercury compounds. *INTERNATIONAL JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY*. (ISSN: 13873806). 436: 153-165. DOI: 10.1016/j.ijms.2018.12.003
- 73.** Schmid, M.; Martínez-Fernández, L.; Markovitsi, D.; Santoro, F.; Hache, F.; Improtta, R.; Changuenet, P. (2019). Unveiling Excited-State Chirality of Binaphthols by Femtosecond Circular Dichroism and Quantum Chemical Calculations. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS*. (ISSN: 19487185). 10(14): 4089-4094. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.9b00948
- 74.** Seijo, L.; Feofilov, S.; Barandiarán, Z. (2019). Fine-Tuning the Cr³⁺ R₁-Line by Controlling Pauli Antisymmetry Strength. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS*. (ISSN: 19487185). 10(11): 3176-3180. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.9b00858
- 75.** Silva, REF.; Martín, F.; Ivanov, M. (2019). High harmonic generation in crystals using maximally localized Wannier functions. *PHYSICAL REVIEW B*. (ISSN: 24699950). 100(19): 195201. DOI: 10.1103/PhysRevB.100.195201
- 76.** Sindona, A.; Pisarra, M.; Bellucci, S.; Tene, T.; Guevara, M.; Vacacela Gómez, C. (2019). Plasmon oscillations in two-dimensional arrays of ultranarrow graphene nanoribbons. *PHYSICAL REVIEW B*. (ISSN: 24699950). 100(23): 235422. DOI: 10.1103/PhysRevB.100.235422
- 77.** Southworth, SH.; Dunford, RW.; Ray, D.; Kanter, EP.; Doumy, G.; March, AM.; Ho, PJ.; Krassig, B.; Gao, Y.; Lehmann, CS.; Picón, A.; Young, L.; Walko, DA.; Cheng, L. (2019). Observing pre-edge K-shell resonances in Kr, Xe, and XeF₂. *PHYSICAL REVIEW A*. (ISSN: 24699926). 100(2): 022507. DOI: 10.1103/PhysRevA.100.022507
- 78.** Trabatttoni, A.; Galli, M.; Lara-Astiaso, M.; Palacios, A.; Greenwood, J.; Tavernelli, I.; Decleva, P.; Nisoli, M.; Martín, F.; Calegari, F. (2019). Charge migration in photo-ionized aromatic amino acids. *PHILOSOPHICAL TRANSACTIONS OF THE ROYAL SOCIETY A: MATHEMATICAL, PHYSICAL AND ENGINEERING SCIENCES*. (ISSN: 1364503X). 377(2145): 20170472. DOI: 10.1098/rsta.2017.0472
- 79.** Ueda, K.; Sokell, E.; Schippers, S.; Aumayr, F.; Sadeghpour, H.; Burgdoerfer, J.; Lemell, C.; Tong, XM.; Pfeifer, T.; Calegari, F.; Palacios, A.; Martín, F.; Corkum, P.; Sansone, G.; Gryzlova, EV.; Grum-Grzhimailo, AN.; Piancastelli, MN.; Weber, PM.; Stei (2019). Roadmap on photonic, electronic and atomic collision physics: I. Light-matter interaction. *JOURNAL OF PHYSICS B-*

ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS. (ISSN: 09534075). 52(17): 171001. DOI: 10.1088/1361-6455/ab26d7

80. Veyrinas, K.; Saquet, N.; Poullain SM.; Lebech, M.; Houver, J.; Lucchese, R.; Doweck, D. (2019). Dissociative photoionization of NO across a shape resonance in the XUV range using circularly polarized synchrotron radiation. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. (ISSN: 00219606). 151(17): 174305. DOI: 10.1063/1.5121620

81. Villablanca, D.; Durán, R.; Lamsabhi, A.; Herrera, B. (2019). Reaction Mechanism of Li and Mg Carbenoid Cyclopropanations: Metal- π and σ Interactions. ACS OMEGA. (ISSN: 24701343). 4(21): 19452-19461. DOI: 10.1021/acsomega.9b02905

82. Wang, Y.; Díaz-Tendero, S.; Alcamí, M.; Martín, F. (2019). Aromaticity, Coulomb repulsion, π delocalization or strain: who is who in endohedral metallofullerene stability? PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. (ISSN: 14639076). 21(1): 124-131. DOI: 10.1039/c8cp06707d

83. Zurrón-Cifuentes, O.; Boyero-García, R.; Hernández-García, C.; Picón, A.; Plaja, L. (2019). Optical anisotropy of non-perturbative high-order harmonic generation in gapless graphene. OPTICS EXPRESS. (ISSN: 10944087). 27(5): 7776-7786. DOI: 10.1364/OE.27.007776

OTRAS PUBLICACIONES

Capítulos de Libro

1. Montero-Campillo M.; Mó O.; Yáñez M.; Alkorta I.; Elguero J. (2019). The beryllium bond. ADVANCES IN INORGANIC CHEMISTRY. (ISSN: 08988838). 73: 73-121. DOI: 10.1016/bs.adioch.2018.10.003

Corrección

2. Martínez-Fernández, L.; Gavvala, K.; Sharma, R.; Didier, P.; Richert, L.; Segarra Martí, J.; Mori, M.; Mely, Y.; Improta, R. (2019). Corrigendum to: Excited-State Dynamics of Thienoguanosine, an Isomorphous Highly Fluorescent Analogue of Guanosine (Chemistry – A European Journal, (2019), 25, 30, (7375-7386), 10.1002/chem.201900677). CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. (ISSN: 09476539). 25(59): 13648-13648. DOI: 10.1002/chem.201904278

Meeting-Abstract

3. Boyero-García, R.; Zurrón-Cifuentes, O.; Hernández-García, C.; Picón, A.; Plaja, L. (2019). Polarization control of high-harmonic pulses generated in gapless graphene. 2019 CONFERENCE ON LASERS AND ELECTRO-OPTICS EUROPE AND EUROPEAN QUANTUM ELECTRONICS CONFERENCE, CLEO/EUROPE-EQEC 2019. (ISBN: 978-1-7281-0469-0): paper cg_p_31. DOI: 10.1109/CLEOE-EQEC.2019.8871805

4. Buades, B.; León, I.; Di Palo, N.; Rivas, D.; Sidiropoulos, T.; Severino, S.; Reduzzi, M.; Cousin, S.; Hemmer, M.; Cocchi, C.; Pellegrin, E.; Martín, J.; Manas-Valero, S.; Coronado, E.; Danz, T.; Draxl, C.; Uemoto, M.; Yabana, K.; Schultze, M.; Wall, S.; Picón, A.; Biegert, J. (2019). Attosecond soft-X-ray spectroscopy in a transition metal dichalcogenide. 2019 CONFERENCE ON LASERS AND ELECTRO-OPTICS EUROPE AND EUROPEAN QUANTUM ELECTRONICS CONFERENCE, CLEO/EUROPE-EQEC 2019. (ISBN: 9781728104690). DOI: 10.1109/CLEOE-EQEC.2019.8872837

5. Dorney, K.; Rego, L.; Brooks, N.; Román, J.; Liao, C.; Ellis, J.; Zusin, D.; Gentry, C.; Nguyen, Q.; Shaw, J.; Picón, A.; Plaja, L.; Kapteyn, H.; Murnane, M.; Hernández-García, C. (2019). Helicity in a twist: Attosecond, extreme ultraviolet vortex beams with designer spin and orbital angular

momenta. OPTICS INFOBASE CONFERENCE PAPERS. CONFERENCE ON LASER AND ELECTRO-OPTICS: QUELS FUNDAMENTAL SCIENCE 2019. (ISSN: 9781943580576).: Paper FF2C.6. DOI: 10.1364/CLEO-QELS.2019.FF2C.6

6. Dorney, K.; Rego, L.; Brooks, N.; Román, J.; Liao, C.; Ellis, J.; Zusin, D.; Gentry, C.; Nguyen, Q.; Shaw, J.; Picón, A.; Plaja, L.; Kapteyn, H.; Murnane, M.; Hernández-García, C. (2019). Helicity in a Twist: Attosecond, Extreme Ultraviolet Vortex Beams with Designer Spin and Orbital Angular Momenta. OSA TECHNICAL DIGEST. CONFERENCE ON LASERS AND ELECTRO-OPTICS. (ISBN: 978-1-943580-57-6). Paper FF2C.6. DOI: 10.23919/CLEO.2019.8749379

7. Dorney, K.; Rego, L.; Brooks, N.; Román, J.; Pisanty, E.; Liao, C.; Ellis, J.; Zusin, D.; Gentry, C.; Nguyen, Q.; Shaw, J.; Picón, A.; Plaja, L.; Lewenstein, M.; Kapteyn, H.; Murnane, M.; Hernández-García, C. (2019). Attosecond, high-harmonic optical vortices with tailored spin and orbital angular momentum. OPTICS INFOBASE CONFERENCE PAPERS. NONLINEAR OPTICS 2019. (ISSN: 9781943580620). Paper NW2A.2. DOI: 10.1364/NLO.2019.NW2A.2

8. Dorney, K.; Rego, L.; Pisanty, E.; Brooks, N.; Román, J.; Liao, C.; Ellis, J.; Zusin, D.; Gentry, C.; Nguyen, Q.; Shaw, J.; Lewenstein, M.; Picón, A.; Plaja, L.; Kapteyn, H.; Murnane, M.; Hernández-García, C. (2019). Polarization and vortex control of extreme-ultraviolet attosecond pulses through simultaneous control of spin and orbital angular momentum. 2019 CONFERENCE ON LASERS AND ELECTRO-OPTICS EUROPE AND EUROPEAN QUANTUM ELECTRONICS CONFERENCE, CLEO/EUROPE-EQEC 2019. (ISBN: 978-1728104690). DOI: 10.1109/CLEOE-EQEC.2019.8871613

9. Martín García, F. (2019). Attosecond coupled electron and nuclear dynamics in molecules. ACS NATIONAL MEETING BOOK OF ABSTRACTS. (ISSN: 0065-7727). 257.

4.PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y CONTRATOS CON EMPRESAS

El Departamento para 2019 ha tenido vigentes 24 proyectos de investigación.

Relación de Proyectos de Investigación vigentes en 2019. Ordenación alfabética de título

1. Captura de la dinámica electrónica correlacionada usando pulsos de attosegundos de frecuencia instantánea variable: una nueva estrategia

Referencia: FIS2017-92382-EXP

Vigencia: 2018 - 2019

Investigadores: Palacios Cañas, Alicia (IP); Feist, Johannes Maximilian (IP); Boll, Diego I. R.

Entidades participantes: Departamento de Física de la Materia Condensada. Departamento de Química

Financiador: Universidad Autónoma de Madrid

2. Computación en Ciencia de Attosegundos y de materiales: Afrontando los nuevos retos de la física y la química actuales

Referencia: FIS2016-77889-R

Vigencia: 2016 - 2019

Investigadores: Wang, Yang ; Corral Pérez, Inés ; Palacios Cañas, Alicia (IP) ; González Vázquez, Jesús ; Díaz Blanco, Cristina ; Martín García, Fernando (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química.

Financiador: Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO). AEI, FEDER

3. Computación en ciencia de attosegundos y de materiales: afrontando los nuevos retos de la física y la química actuales

Referencia: Universidad Autónoma de Madrid/086

Vigencia: 2017 - 2020

Investigadores: Corral Pérez, Inés ; Palacios Cañas, Alicia ; González Vázquez, Jesús ; Díaz Blanco, Cristina ; Martín García, Fernando (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química.

Financiador: Universidad Autónoma de Madrid

4. Desarrollos teóricos y computación avanzada para el estudio de procesos atómicos en plasmas de fusión

Referencia: FIS2017-84684-R

Vigencia: 2018 - 2020

Investigadores: Méndez Ambrosio, Luis (IP); Rabadán Romero, Ismanuel ; Illescas Rojas, Clara Matilde (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química. Teoría de Colisiones Atómicas y Moleculares (Grupo).

Financiador: Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

5. Diseño y caracterización de nuevos materiales moleculares y optimización de fármacos: sinergia experimento y teoría

Referencia: PGC2018-094644-B-C21

Vigencia: 2019 - 2021

Investigadores: Cuadrado Sánchez, Isabel (IP); Yáñez Montero, Manuel (IP); Corral Perez, Inés; Hernández Vizcaíno, Elisa; Mo Romero, Otilia, Montero Campillo, María Merced, Sanz Mercado, Pablo

Entidades participantes: Departamento de Química Inorgánica. Departamento de Química.

Financiador: MICIU/AEI, FEDER

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

Referencia: P12-FQM-790

Vigencia: 2014 - 2019

Investigadores: Marcos Laguna, María Luisa

Entidades participantes: Departamento de Química.

Financiador: Universidad de Granada

7. Erasmus+ Master “Theoretical Chemistry and Computational Modelling”

Referencia: H2020-MSCA-ITN-2014

Vigencia: 2015 - 2019

Investigadores: Yáñez Montero, Manuel (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química. Estructura Molecular y Reactividad Química (Grupo)

Financiador: Comisión Europea. H2020

8. Espectroscopía ultrarápida de rayos-x en sistemas de materia condensada

Referencia: RTI2018-097355-A-I00

Vigencia: 2019 - 2021

Investigadores: Picón Álvarez, Antonio (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química.

Financiador: MICIU/AEI, FEDER

9. Espectroscopía ultrarápida de rayos-x para la transferencia de carga y energía.

Referencia: 2017-T1/IND-5432.

Vigencia: 2018 - 2022

Investigadores: Picón Álvarez, Antonio

Entidades participantes: Departamento de Química.

Financiador: Comunidad Autónoma de Madrid. Programa de Atracción de Talento

10. Evaluación de la sucesión de comunidades microbianas antárticas desde suelos recientemente deglaciados mediante nuevos métodos para 'big data'

Referencia: CTM2016-79741-R

Vigencia: 2016 - 2020

Investigadores: Sanz Mercado, Pablo ; González Herrero, Sergi ; Almela Gómez, Pablo ; Cires Gómez, Samuel ; Luna Fernández, Alberto ; Rodríguez Puerta, Julio ; Rico Eguizabal, Eugenio ; Justel Eusebio, Ana María (IP); Quesada del Corral, Antonio (IP)

Entidades participantes: Departamento de Ecología. Departamento de Matemática. Departamento de Biología. Departamento de Química. Facultad de Ciencias Económicas y Empresariales. Análisis Económico: Economía Cuantitativa. AEMET (Agencia Estatal de Meteorología)

Financiador: Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

11. Imaging-XChem: A computational package for ultrafast electronic control in chemistry

Referencia: ERC-2017-PoC. 780284 – Imaging-XChem

Vigencia: 2017 - 2019

Investigadores: Marante Valdés, Carlos Antonio ; Argenti, Luca ; Corral Pérez, Inés ; Plesiat, Etienne ; Klinker, Markus ; González Vázquez, Jesús ; Martín García, Fernando (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química. Física Atómica y Molecular de Sistemas no Ligados (Grupo)

Financiador: European Research Council

12. IMDEA Nanociencia. Apoyo a Centros de Excelencia Severo Ochoa

Referencia: SEV-2016-0686

Vigencia: 2017 - 2021

Investigadores: Guinea, F. (IP); Martín García, Fernando

Entidades participantes: Departamento de Química. Física Atómica y Molecular de Sistemas no Ligados (Grupo). Instituto Madrileño de Estudios Avanzados en Nanociencia

Financiador: Secretaría de Estado de Investigación, Desarrollo e Innovación. Ministerio de Economía y Competitividad

13. International Associated Laboratory on Fragmentation dynamics of complex molecular systems (DYNAMICS)

Referencia: LIA-DYNAMICS

Vigencia: 2013 - 2020

Investigadores: Wang, Yang ; Díaz-Tendero Victoria, Sergio ; Alcamí Pertejo, Manuel ; Martín García, Fernando (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química. Física Atómica y Molecular de Sistemas no Ligados (Grupo). International Associated Laboratory (LIA). Centre National de la Recherche Scientifique. Research and International Cooperation Office.

Financiador: Centre National de la Recherche Scientifique (France)

14. Materiales metal-orgánicos bioinspirados e inteligentes con comportamiento estímulo-respuesta

Referencia: MAT2016-75883-C2-2-P

Vigencia: 2016 - 2019

Investigadores: García Vegas, Verónica ; Conesa Egea, Javier ; Moreno Barahona, Consuelo ; Marcos Laguna, María Luisa ; Delgado Gil, Salomé ; Amo Ochoa, María Pilar (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química. Departamento de Química Inorgánica. Nanomateriales de Baja Dimensionalidad (Grupo); Metales de Transición en Química de Clusters y Supramolecular (Grupo)

Financiador: Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

15. Métodos teóricos en ciencia de attosegundos

Referencia: UAM/128

Vigencia: 2019 - 2022

Investigadores: Martín García, Fernando (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química.

Financiador: Universidad Autónoma de Madrid

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

Vigencia: 2016 - 2019

Investigadores: Arlanscan, Serra ; Brea Noriega, Oriana ; Corral Pérez, Inés ; Lamsabhi, Al Mokhtar ; Mo Romero, Otilia ; Yáñez Montero, Manuel (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química. Estructura Molecular y Reactividad Química (Grupo)

Financiador: Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

17. Molecular Electron Dynamics investigated by Intense Fields and Attosecond Pulses (MEDEA)

Referencia: MSCA-ITN-ETN, GA 641789

Vigencia: 2015 - 2019

Investigadores: Sansone, G. (IP); Martín García, Fernando

Entidades participantes: Departamento de Química. Física Atómica y Molecular de Sistemas no Ligados (Grupo)

Financiador: European Commission. Innovative Training Network (ITN). Programme Horizon 2020.

18. Photonic tailoring of nanomaterials: extraordinary light harvesting in excitonic systems

Referencia: PGC2018-097236-A-I00

Vigencia: 2019 - 2022

Investigadores: Montero Campillo, M^a. de la Merced ; Sanz Mercado, Pablo ; Hernández Vizcaíno, María Elisa ; Corral Pérez, Inés ; Mo Romero, Otilia ; González Vadillo, Ana María; Prins, Ferry (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química. Departamento de Química Inorgánica. Departamento de Física de la Materia Condensada

Financiador: MICIU/AEI, FEDER

19. Red temática sobre Dinámica, Tractores, No lineal, Caos y estabilidad

Referencia: MTM2016-81902-REDT

Vigencia: 2017 - 2019

Investigadores: Borondo Rodríguez, Florentino

Entidades participantes: Departamento de Química.

Financiador: Ministerio de Economía y Competitividad

20. Siesta y la teoría de inestabilidades y transporte en materiales funcionales y baja dimensionalidad UAM

Referencia: FIS2015-64886-C5-5-P

Vigencia: 2016 - 2019

Investigadores: Ynduráin Muñoz, Félix ; Mori Sánchez, Paula ; Gómez Santos, Guillermo ; Álvarez Carrera, José Vicente ; Soler Torroja, José María (IP)

Entidades participantes: Departamento de Física de la Materia Condensada. Departamento de Química.

Financiador: Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

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

Referencia: CTQ2016-76061-P

Vigencia: 2016 - 2019

Investigadores: Luna Fernández, Alberto ; Díaz-Tendero Victoria, Sergio (IP); Alcamí Pertejo, Manuel (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química. Modelización de Procesos Moleculares (Grupo)

Financiador: Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

22. Stability and transitions in physical processes - TRAX

Referencia: GA 734557

Vigencia: 2017 - 2021

Investigadores: Borondo Rodríguez, Florentino (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química. Caos Cuántico (Grupo)

Financiador: Comisión Europea

23. Transferencia de energía y electrones en materiales sólidos luminiscentes activados por lantánidos multivalentes

Referencia: MAT2017-83553-P

Vigencia: 2018 - 2021

Investigadores: Barandiarán Piedra, Zoila ; Pascual Robledo, José Luis ; Seijo Loché, Luis Ignacio (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química Física Aplicada. Departamento de Química. Química Cuántica de Estado Sólido (Grupo)

Financiador: Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

24. Ultrahigh pressure chemistry at the nanoscale

Referencia: MDM-2014-0377.

Vigencia: 2017 - 2019

Investigadores: Segovia Cabrero, María Pilar ; Farias Tejerina, Daniel ; García Michel, Enrique ; Martín García, Fernando ; Zamora Abánades, Félix Juan ; Gómez Herrero, Julio (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química. Departamento de Química Inorgánica. Departamento de Física de la Materia Condensada. Nanomateriales de Baja Dimensionalidad (Grupo); Física Atómica y Molecular de Sistemas no Ligados (Grupo); Estructura Electrónica de Superficies e Interfases (Grupo)

Financiador: Universidad Autónoma de Madrid

5. TESIS DOCTORALES

En 2019, se han defendido 5 tesis doctorales en el departamento

Plan	Tesis defendidas
Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional	5
Total	5

Relación de Tesis doctorales - Ordenación alfabética por título

1. A Theoretical Study of Ultrafast Phenomena in Complex Atoms

Autoría: Petersson , Carl Leon Mikael

Dirigida por: Martín García, Fernando

<http://hdl.handle.net/10486/690437>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

2. Computational models of photosensitizers to be used in photodynamic therapy: from assisted delivery to light activation

Autoría: De Vetta , Martina

Dirigida por: Corral Pérez, Inés; González, Leticia

Desarrollada en: cotutelada por la Universität de Wien

<http://hdl.handle.net/10486/687648>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

3. Diffraction studies of atoms and molecules from surfaces using DFT-based potential energy surfaces

Autoría: Cueto Cordones, Marcos del

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

<http://hdl.handle.net/10486/686802>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

4. Drugs and Light: A computational approach to predict phototoxicity

Autoría: Aguilera Porta, Neus

Dirigida por: Corral Pérez, Inés; Granucci, Giovanni

Desarrollada en: Università di Pisa

<http://hdl.handle.net/10486/687680>

Departamento de Química

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

5. Theoretical study of adsorption, excitation and resonant charge transfer of organic molecules on metal surfaces

Autoría: Aguilar-Galindo Rodríguez, Fernando

Dirigida por: Díaz-Tendero Victoria, Sergio

<http://hdl.handle.net/10486/690551>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

6. GRUPOS DE INVESTIGACIÓN RECONOCIDOS POR LA UAM ORDENADOS POR ÁREA ANEP (Áreas Temáticas de la Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva).

CS Ciencias sociales

- * [Estudios feministas y de género](#)

FI Física y ciencias del espacio

- * [Ab initio simulations of electron-nuclear dynamics: from atoms to surfaces](#)
- * [Física atómica y molecular de sistemas no ligados](#)
- * [Teoría de colisiones atómicas y moleculares](#)

QMC Química

- * [Ab initio simulations of electron-nuclear dynamics: from atoms to surfaces](#)
- * [Física atómica y molecular de sistemas no ligados](#)
- * [Molecular processes modeling group](#)

- * [Molecular structure and reactivity](#)
- * [Teoría de colisiones atómicas y moleculares](#)

Relación de Grupos de Investigación reconocidos por la UAM con participación de investigadores del departamento. Ordenados alfabéticamente por nombre del grupo

1. Ab initio simulations of electron-nuclear dynamics: from atoms to surfaces

Acrónimo: ATOSUR

Tipo de grupo: Grupo emergente

Líneas de investigación: Attosecond electron dynamics in atoms and small molecules. Molecular dynamics on surfaces: sticking and diffraction effects.

Participantes: Díaz Blanco, Cristina; Palacios Cañas, Alicia (coordinadora); Arteaga Gutiérrez, Kilian; Suñer Rubio, Adrián; Cebreiro, Antonio

Departamentos con miembros del grupo: Física Teórica de la Materia Condensada; Química

URL: <http://atosur.qui.uam.es>

2. Estudios feministas y de género

Acrónimo: FEMGEN

Tipo de grupo: Grupo consolidado

Líneas de investigación: Este grupo se centra en los Estudios Interdisciplinarios de Género y en la Teoría Feminista. Fomenta y desarrolla un espacio de investigación y docencia multidisciplinar en feminismo y género, en todas las áreas de conocimiento. Entre sus líneas de investigación se encuentran: Historia de las mujeres. Ciudadanía, género y políticas públicas. Globalización, género y derechos humanos. Salud y género. Género y desarrollo evolutivo. Educación para la igualdad. Economía, trabajo y empleo. Teoría feminista contemporánea. Género y producción cultural

Participantes: Álvarez Medina, Silvina; Beltrán Pedreira, Elena; Bernis Carro, Cristina; Espín Saez, Maravillas; Espinosa Bayal, María Ángeles; Fernández Montraveta, Carmen; Folguera Crespo, Pilar; García Sainz, Cristina; Guardia Herrero, Carmen de la; Guerrero Navarrete, Yolanda; Heredero de Pablos, M. Isabel; López Giménez, Rosario; Maquieira D'Ángelo, Virginia; Martínez Ramírez, Mariam; Mo Romero, Esperanza; Mo Romero, Otilia; Moreno Hernández, Amparo; Pérez Canto, Pilar; Pérez Ortiz, Laura María; Prados Torreira, Lourdes; Rodríguez García, Margarita Eva; Sánchez Muñoz, Cristina (coordinadora); Toboso Sánchez, María Pilar; Vara Miranda, María Jesús; Vera Martín, Violeta de

Departamentos con miembros del grupo: Antropología Social y Pensamiento Filosófico Español; Ciencia Política y Relaciones Internacionales; Derecho Público y Filosofía Jurídica; Estructura Económica y Economía del Desarrollo; Historia Antigua, Medieval, Paleografía y Diplomática; Historia Contemporánea; Biología; Química

URL: <https://www.uam.es/UAM/Grupos-de-investigaci%C3%B3n/Ficha/1446755836600.htm?idGrupo=408&language=es&nombreGrupo=Estudios%20feministas%20y%20de%20g%C3%A9nero&site=UniversidadAutonomaMadrid>

3. Física atómica y molecular de sistemas no ligados

Acrónimo: Campus

Tipo de grupo: Grupo consolidado

Líneas de investigación: The Campus group develops and applies theoretical tools to investigate electron and nuclear dynamics resulting from the interaction of atoms, molecules, clusters and

solids with laser pulses, synchrotron radiation and a variety of atomic and molecular projectiles. Therefore, the research covers a wide range of problems and systems, from the simplest ones, as in the case of atoms or molecules interacting with ultrashort laser pulses, to very extended ones, as in the case of molecular layers grown on surfaces. Our aim is to make theoretical predictions that can lead to a better understanding of the dynamics in these systems, in close collaboration with the most prestigious experimental groups, as well as to propose new experimental situations. Our tools comprise both home-made and commercial computational packages that include time-dependent grid, ab initio and density functional theory methods.

Participantes: Borrás de Llano, Josep Vicent; Fallaque Najar, Joel; Fernandez Milan, Pedro; Fernández Villoria, Francisco; González Castrillo, Alberto; González Vázquez, Jesús; Grell, Gilbert; Martín García, Fernando (coordinador); Omiste Romero, Juan; Pissarra, Michele; Plesiat, Etienne; Sopena Moros, Arturo; Suñer Rubio, Adrián

Departamentos con miembros del grupo: Química

URL: <https://campusys.qui.uam.es/>

4. Molecular processes modeling group

Acrónimo: MolPM

Tipo de grupo: Grupo consolidado

Líneas de investigación: Simulación de procesos dinámicos en sistemas moleculares complejos. Dinámica de fragmentación de agregados moleculares y moléculas de interés biológico en condiciones atípicas (altamente excitados e ionizados). Excitación electrónica y vibracional en moléculas y nanoestructuras adsorbidas en superficies metálicas. Descripción teórica de reactividad y catálisis en química orgánica. Reactividad en fase gas. Estructura, estabilidad y reactividad de fullerenos y PAH. Autoensamblado de moléculas en superficies. Estructura y reactividad de moléculas de interés en astroquímica. Estudio teórico del impacto medioambiental de plaguicidas

Participantes: Aguilar-Galindo Rodríguez, Fernando; Alcamí Pertejo, Manuel (coordinador); Bargaza Guzmán, Ransel; D'Ángelo, Giovanna; Díaz-Tendero Victoria, Sergio; Luna Fernández, Alberto; Martín Somer, Ana; Pla Terrada, Paula

Departamentos con miembros del grupo: Química

URL: <https://molpm.qui.uam.es/>

5. Molecular structure and reactivity

Acrónimo: MolesS-ReaC

Tipo de grupo: Grupo consolidado

Líneas de investigación: New non-covalent interactions arising when B and P is replaced by Al and/or Ga in amineboranes and phosphineboranes. The so-called "beryllium bonds" whose existence was proposed recently by our two teams and which exhibit several common features with the conventional hydrogen bonds. Very strong non-covalent interactions leading to the formation of metallocycles and which can be somehow related with metal-organic-frameworks (MOFs) used in gas-storage. Non-covalent interactions involved in the building up of metal-organic-frameworks (MOF) or covalent organic frameworks (COFs) systems with gas-storage (Hydrogen, CO₂,...) capacity. Non-covalent interactions associated with ditopic systems as possible building blocks of new materials. Frustrated Lewis pairs, some of which may exhibit also gas-storage capacity.

Participantes: Aguilera Porta, Neus; Alkorta Osoro, Ibon; Arpa González, Enrique Manuel; Corral Pérez, Inés; Iribarren Aguirre, Íñigo; Ivashchenko, Dmytro; Lamsabhi, Al Mokhtar; Mo Romero,

Otilia; Montero Campillo, M. de la Merced; Sanz Mercado, Pablo; Tsai, I-Ting; Vetta, Martina de; Vos Esteban, Eva; Yáñez Montero, Manuel (coordinador)

Departamentos con miembros del grupo: Química

URL: <https://www.uam.es/UAM/Grupos-de-investigaci%C3%B3n/Ficha/1446755836600.htm?idGrupo=222&language=en&nombreGrupo=Molecular%20Structure%20and%20Reactivity&site=UniversidadAutonomaMadrid>

6. Teoría de colisiones atómicas y moleculares

Acrónimo: TCAM

Tipo de grupo: Grupo consolidado

Líneas de investigación: Colisiones ion-átomo. Colisiones ion-molécula. Dinámica no-adiabática de fragmentación molecular. Desarrollos metodológicos para cálculo secciones eficaces. Aplicaciones en astrofísica, fusión termonuclear y hadronterapia.

Participantes: Illescas Rojas, Clara Matilde (coordinadora); Méndez Ambrosio, Luis; Rabadán Romero, Ismanuel (coordinador)

Departamentos con miembros del grupo: Química

URL: <https://sites.google.com/view/tcam/home>

7. PDI DEL DEPARTAMENTO Y ENLACE A SU PERFIL PÚBLICO EN EL PORTAL DE PRODUCCIÓN CIENTÍFICA DE LA UAM

7.1. PERMANENTE DEL DEPARTAMENTO Y ENLACE A SU PERFIL PÚBLICO EN EL PORTAL DE PRODUCCIÓN CIENTÍFICA DE LA UAM

ALCAMI PERTEJO, MANUEL	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-259527
BARANDIARAN PIEDRA, ZOILA	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-259553
BORONDO RODRIGUEZ, FLORENTINO	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-260097
DIAZ-TENDERO VICTORIA, SERGIO	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-262857
ILLESCAS ROJAS, CLARA MATILDE	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-258663
LAMSABHI, AL MOKHTAR	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-279708
MARCOS LAGUNA, MARIA LUISA	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-261507
MARTIN GARCIA, FERNANDO	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-260298
MENDEZ AMBROSIO, LUIS	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-261510
MORI SANCHEZ, PAULA	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-264490
RABADAN ROMERO, ISMANUEL	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-260037
SEIJO LOCHE, LUIS IGNACIO	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-261529

7.2. PDI NO PERMANENTE DEL DEPARTAMENTO Y ENLACE A SU PERFIL PÚBLICO EN EL PORTAL DE PRODUCCIÓN CIENTÍFICA DE LA UAM

7.2.1. PROFESORES EMÉRITOS

MO ROMERO, OTILIA	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-259182
YÁÑEZ MONTERO, MANUEL	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-258992

7.2.2. PDI DOCTOR NO PERMANENTE

CEREZO BASTIDA, JAVIER	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-314071
CORRAL PEREZ, INES	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-262023
MARTINEZ FERNANDEZ, LARA	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-264577
MONTERO CAMPILLO, M ^a . MERCED	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-264786
NORIEGA PÉREZ, JUAN JOSÉ	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-319303
OMISTE ROMERO, JUAN JOSE	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-328095
PALACIOS CAÑAS, ALICIA	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-260065
PICON ALVAREZ, ANTONIO	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-314181

7.2.3. PERSONAL INVESTIGADOR EN FORMACIÓN

ARPA GONZALEZ, ENRIQUE MANUEL	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-278886
BARREIRO LAGE, DARIO	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-314172
BORRAS DE LLANO, JOSEP VICENT	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-314135
CISTARO , GIOVANNI CONSALVO	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-314205
ERDMANN , EWA KATARZYNA	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-328096
FERNANDEZ MILAN, PEDRO	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-281304
GONZALEZ VAZQUEZ, JESUS	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-264892
MALAKHOV , MIKHAIL	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-328097
MARTIN SOMER, ANA	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-264814
PLA TERRADA, PAULA	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-278909
VOS ESTEBAN, EVA	https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinalD/04-281292



This work is licensed under a [Creative Commons Attribution 4.0 International License](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).