



DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

MEMORIA DE INVESTIGACIÓN

2020

MEMORIA DE INVESTIGACIÓN DEL DEPARTAMENTO DE QUÍMICA 2020

El presente documento tiene como objetivo recoger los resultados de la investigación realizada a lo largo de 2020 por los profesores e investigadores del Departamento de Química de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de Madrid. Recogiendo las publicaciones, las tesis doctorales, tanto dirigidas como tutorizadas por el PDI del Departamento, los proyectos de Investigación en los que participa, ayudas individuales, patentes, premios 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>496 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>~25</td> <td>~25</td> </tr> <tr> <td>55-64 AÑOS</td> <td>~40</td> <td>~40</td> </tr> <tr> <td>65 Ó + AÑOS</td> <td>~15</td> <td>~15</td> </tr> </tbody> </table>	Edad	HOMBRES	MUJERES	35-44 AÑOS	~10	~10	45-54 AÑOS	~25	~25	55-64 AÑOS	~40	~40	65 Ó + AÑOS	~15	~15	<p>119 CATEDRÁTICOS</p> <p>244 TITULARES</p> <p>133 CONTR. DOCTORES</p>
	Edad	HOMBRES	MUJERES															
	35-44 AÑOS	~10	~10															
45-54 AÑOS	~25	~25																
55-64 AÑOS	~40	~40																
65 Ó + AÑOS	~15	~15																
<p>571 PDI NO PERMANENTE</p>	<p>242 PDI Doctor no permanente</p> <p>307 Personal Investigador en Formación</p> <p>22 Profesores Eméritos</p>																	
<p>61 NUEVOS SEXENIOS DE INVESTIGACIÓN CONCEDIDOS EN 2020</p>																		
PROYECTOS	<p>FINANCIACIÓN</p>	<p>476 PROYECTOS VIGENTES</p>	<p>ENTIDADES FINANCIADORAS DE LOS PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN</p>															
TRANSFERENCIA	<p>11 PATENTES</p>	<p>7 EMPRESAS BASADAS EN EL CONOCIMIENTO ACTIVAS</p>																
TESIS DOCTORALES	<p>172 TESIS DOCTORALES</p>	<p>FACULTAD DE CIENCIAS 2020</p>																
PUBLICACIONES	<p>COLABORACIÓN EN LA AUTORÍA DE ARTÍCULOS</p>	<p>1.680 PUBLICACIONES</p> <p>1.524 ARTÍCULOS</p>	<p>61% ARTÍCULOS Q1 (JCR)</p>															

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>1</td> </tr> <tr> <td>55-64 AÑOS</td> <td>1</td> <td>1</td> </tr> <tr> <td>65 Ó + AÑOS</td> <td>1</td> <td>1</td> </tr> </tbody> </table>	Edad	Hombres	Mujeres	35-44 AÑOS	1	0	45-54 AÑOS	0	1	55-64 AÑOS	1	1	65 Ó + AÑOS	1	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	1																
55-64 AÑOS	1	1																
65 Ó + AÑOS	1	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>PÚBLICA 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>OTRAS</td> <td>8%</td> </tr> <tr> <td>UAM</td> <td>17%</td> </tr> <tr> <td>UE</td> <td>17%</td> </tr> <tr> <td>CAM</td> <td>4%</td> </tr> </tbody> </table>	Entidad	Porcentaje	MINISTERIO	54%	OTRAS	8%	UAM	17%	UE	17%	CAM	4%			
Entidad	Porcentaje																	
MINISTERIO	54%																	
OTRAS	8%																	
UAM	17%																	
UE	17%																	
CAM	4%																	
TESIS DOCTORALES	<p>5</p> <p>TESIS DOCTORALES</p>	<p>DEPARTAMENTO DE QUÍMICA</p> <p>2020</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>83</p> <p>ARTÍCULOS</p>	<p>63%</p> <p>ARTÍCULOS Q1 (JCR)</p>					
Categoría	Porcentaje																	
INTERNACIONAL	77%																	
NACIONAL	19%																	
UAM	2%																	
DEPARTAMENTO	2%																	

ÍNDICE

1. TABLAS
2. METODOLOGÍA Y FUENTES
3. PUBLICACIONES
4. TESIS DOCTORALES
5. PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y CONTRATOS CON EMPRESAS
6. AYUDAS INDIVIDUALES
7. GRUPOS DE INVESTIGACIÓN RECONOCIDOS DE LA UAM
8. PATENTES
9. SEXENIOS
10. 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					
2020	89	73	46	63,01%	5,93
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					
2020	1.680	1.524	926	60,76%	3,39
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	19	18	1	11	2	1	1	3
FACULTAD	476	429	47	239	61	54	39	36

1.3. Tabla de Tesis Doctorales

DEPARTAMENTO	2020				
	TESIS DEFENDIDAS			GÉNERO	
	Total	Dirigidas	Tutorizadas	HOMBRES	MUJERES
QUIMICA	1	0	1	1	0
FACULTAD	172	70	102	87	86

2. METODOLOGÍA Y FUENTES

La Biblioteca de Ciencias elabora la Memoria de Investigación de la Facultad de Ciencias, extrayendo la información de distintas herramientas, que se relacionan en el apartado Fuentes. El [Portal de Producción Científica](#) (PPC), donde está recogido todo el personal docente e investigador permanente y la mayoría del PDI no permanente, es nuestro principal proveedor de datos.

Tras un proceso de verificación y depuración de la información, generamos una primera versión de datos, que remitimos a los directores de los 17 departamentos para su revisión en junio de 2021.

Los Departamentos, nos envían modificaciones, correcciones o nuevas incorporaciones que son revisadas y validadas, añadiéndose a la versión final, junto con las nuevas publicaciones detectadas por la Biblioteca. Todas estas modificaciones, que aparecerán en la versión final de la Memoria de Investigación, se incluyen en el PPC de la UAM, lo que supone una mejora de la información contenida en los perfiles individuales del PDI de la Facultad.

Finalizada la revisión, analizamos los datos relativos a indicios de calidad de los artículos, incorporándolos al presente documento.

Hasta 2019, los indicios de calidad de los artículos procedían conjuntamente de las bases de datos Journal Citations Report (JCR) y de Scimago Journal Rank (SJR). En la presente Memoria de Investigación 2020, se nos han proporcionados los datos segregados de cada una de las plataformas, por lo que hemos seleccionado los indicadores de calidad JCR, al ser los más utilizados en los criterios de evaluación de Ciencias. Esto ha supuesto un descenso aparente en el número de artículos publicados en revistas correspondientes al primer cuartil Q1. También nos ha permitido incluir información sobre las publicaciones editadas en revistas dentro del primer decil D1.

A fin de facilitar la comprensión de los datos globales, acompañamos tablas y gráficos. Se incluyen tablas comparativas de los últimos años relativas a los distintos apartados, reflejando los datos de cada Departamento, y de la media de la Facultad.

Finalmente, se recoge un resumen en fichas, de la Facultad y de los distintos departamentos, con los principales hitos que recoge la presente Memoria.

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 (WoS) y SJR (Scimago) del año 2020.

- 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
 - A petición de algunos Departamentos, se ha incorporado Personal Investigador en Formación no presente en el Portal de Producción Científica de la UAM
- 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
 - Los contratos con empresas son facilitados 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

- Para las Patentes, Empresas Basadas en el Conocimiento y Sexenios
 - Portal de Producción Científica de la UAM
 - Servicio de gestión integral de la investigación, Área de Investigación y Transferencia
 - Revisión facilitada por los Departamentos

3.PUBLICACIONES

El Departamento de Química, ha presentado 89 publicaciones, de las que 76 son artículos científicos. De éstos, un total de 46 se han publicado en revistas del primer cuartil, que corresponde al 63% de los artículos publicados. El 5% 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	8	Q1
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS	4	Q1
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A.	4	Q2
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS.	4	Q1
PHYSICAL REVIEW E.	4	Q1

Relación de Publicaciones de la Facultad, ordenadas alfabéticamente por autor

Leyenda de cuartiles de JCR ● Q1 ● Q2 ● Q3 ● Q4 ● sin factor de impacto

Artículos

- 1. Alkorta, I.; Elguero, J.; Del Bene, JE.; Mo, O.; Montero-Campillo, MM.; Yáñez, M. (2020). Mutual Influence of Pnictogen Bonds and Beryllium Bonds: Energies and Structures in the Spotlight. *Journal of Physical Chemistry A*. 124 (28): 5871-5878. DOI: 10.1021/acs.jpca.0c03689
- 2. Alkorta, Ibon; Elguero, Jose; Oliva-Enrich, Josep M; Yanez, Manuel; Mo, Otilia; Montero-Campillo, M Merced (2020). The Importance of Strain (Preorganization) in Beryllium Bonds. *Molecules*. 25 (24): 5876. DOI: 10.3390/molecules25245876
- 3. Arpa, EM.; Brister, MM.; Hoehn, SJ.; Crespo-Hernández, CE.; Corral, I. (2020). On the Origin of the Photostability of DNA and RNA Monomers: Excited State Relaxation Mechanism of the Pyrimidine Chromophore. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 11 (13): 5156-5161. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.0c00935
- 4. Arslançan, S.; Herrera, B.; Lamsabhi, AM. (2020). On the nature of the interaction of copper hydride and halide with substituted ethylene and acetylene. *Journal of Molecular Modeling*. 26 (3): 61. DOI: 10.1007/s00894-020-4320-0
- 5. Barzaga, R.; Hernández, MP.; Aguilar-Galindo, F.; Díaz-Tendero, S. (2020). Revealing the Interplay between Covalent and Non-Covalent Interactions Driving the Adsorption of

Monosubstituted Thiourea Derivatives on the Au(111) Surface. *Journal of Physical Chemistry C*. 124 (18): 9924-9939. DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c00729

- 6. Bastida, A.; Zúñiga, J.; Requena, A.; Miguel, B.; Cerezo, J. (2020). On the Role of Entropy in the Stabilization of $\hat{\pm}$ -Helices. *Journal of Chemical Information and Modeling*. 60 (12): 6523-6531. DOI: 10.1021/acs.jcim.0c01177
- 7. Behmand, B.; Balanikas, E.; Martínez-Fernández, L.; Improta, R.; Banyasz, A.; Baldacchino, G.; Markovitsi, D. (2020). Potassium Ions Enhance Guanine Radical Generation upon Absorption of Low-Energy Photons by G-Quadruplexes and Modify Their Reactivity. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 11 (4): 1305-1309. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.9b03667
- 8. Boll, DIR.; Martini, L.; Fojon, A.; Palacios, A. (2020). Off-resonance-enhanced polarization control in two-color atomic ionization. *Physical Review A*. 101 (1): 013428. DOI: 10.1103/PhysRevA.101.013428
- 9. Cárdenas, Gustavo; Nogueira, Juan J. (2020). An Algorithm to Correct for the CASSCF Active Space in Multiscale QM/MM Calculations Based on Geometry Ensembles. *International Journal of Quantum Chemistry*. 121 (6): e26533. DOI: 10.1002/qua.26533
- 10. Cárdenas, Gustavo; Nogueira, Juan J. (2020). Stacking Effects on Anthraquinone/DNA Charge-Transfer Electronically Excited States. *Molecules*. 25 (24): 5927. DOI: 10.3390/molecules25245927
- 11. Carlo, GG.; Borondo, F. (2020). Lagrangian descriptors for open maps. *Physical Review E*. 101 (2): 022208. DOI: 10.1103/PhysRevE.101.022208
- 12. Cerezo, J.; Aranda, D.; Ávila Ferrer, FJ.; Prampolini, G.; Santoro, F. (2020). Adiabatic-Molecular Dynamics Generalized Vertical Hessian Approach: A Mixed Quantum Classical Method to Compute Electronic Spectra of Flexible Molecules in the Condensed Phase. *Journal of Chemical Theory and Computation*. 16 (2): 1215-1231. DOI: 10.1021/acs.jctc.9b01009
- 13. Chacón, A.; Kim, D.; Zhu, W.; Kelly, SP.; Dauphin, A.; Pisanty, E.; Maxwell, AS.; Picón, A.; Ciappina, MF.; Kim, DE.; Ticknor, C.; Saxena, A.; Lewenstein, M. (2020). Circular dichroism in higher-order harmonic generation: heralding topological phases and transitions in Chern insulators. *Physical Review B*. 102 (13): 134115. DOI: 10.1103/PhysRevB.102.134115
- 14. Chacón, KN.; Espinal, JF.; Montero-Campillo, MM.; Yáñez, M.; Mejía, SM. (2020). Looking for the Azeotrope: A Computational Study of (Ethanol)₆-Water, (Methanol)₆-Water, (Ethanol)₇, and (Methanol)₇ Heptamers. *Journal of Physical Chemistry A*. 124 (35): 7080-7087. DOI: 10.1021/acs.jpca.0c05362
- 15. del Cueto, M.; Muzas, AS.; Martín, F.; Díaz, C. (2020). Accurate simulations of atomic diffractive scattering from KCl(0 0 1) under fast grazing incidence conditions. *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms*. 476: 1-9. DOI: 10.1016/j.nimb.2020.04.037
- 16. Didier, P.; Kuchlyan, J.; Martínez-Fernández, L.; Gosset, P.; Leonard, J.; Tor, Y.; Improta, R.; Mely, Y. (2020). Deciphering the pH-dependence of ground- and excited-state equilibria of thienoguanine. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 22 (14): 7381-7391. DOI: 10.1039/c9cp06931c

- **17.** Elsayed, RH.; Kamel, EM.; Mahmoud, AM.; El-Bassuony, AA.; Bin-Jumah, M.; Lamsabhi, AM.; Ahmed, SA. (2020). Rumex dentatus L. phenolics ameliorate hyperglycemia by modulating hepatic key enzymes of carbohydrate metabolism, oxidative stress and PPAR γ in diabetic rats. *Food and Chemical Toxicology*. 138: 111202. DOI: 10.1016/j.fct.2020.111202
- **18.** Eskandari, M.; Roldao, JC.; Cerezo, J.; Milián-Medina, B.; Gierschner, J. (2020). Counterion-Mediated Crossing of the Cyanine Limit in Crystals and Fluid Solution: Bond Length Alternation and Spectral Broadening Unveiled by Quantum Chemistry. *Journal of the American Chemical Society*. 142 (6): 2835-2843. DOI: 10.1021/jacs.9b10686
- **19.** Feldmaier, M.; Reiff, J.; Benito, RM.; Borondo, F.; Main, J.; Hernández, R. (2020). Influence of external driving on decays in the geometry of the LiCN isomerization. *Journal of Chemical Physics*. 153 (8): 084115. DOI: 10.1063/5.0015509
- **20.** Ferrer, M.; Montero-Campillo, MM.; Mo, O.; Yáñez, M.; Alkorta, I.; Elguero, J. (2020). Bonding between electron-deficient atoms: strong Lewis-acid character preserved in X-Y-X (X = B, Al; Y = Be, Mg) bridges. *New Journal of Chemistry*. 44 (27): 11870-11878. DOI: 10.1039/d0nj01803a
- **21.** Fuchs, J.; Douguet, N.; Donsa, S.; Martín, F.; Burgdorfer, J.; Argenti, L.; Cattaneo, L.; Keller, U. (2020). Time delays from one-photon transitions in the continuum. *Optica*. 7 (2): 154-161. DOI: 10.1364/OPTICA.378639
- **22.** Gini, A.; Rigotti, T.; Pérez-Ruiz, R.; Uygur, M.; Más-Ballesté, R.; Corral, I.; Martínez-Fernández, L.; de la Pena O'Shea, VA.; García Mancheno, O.; Aleman, J. (2020). Mesityl or Imide Acridinium Photocatalysts: Accessible Versus Inaccessible Charge-Transfer States in Photoredox Catalysis. *Chemphotochem*. 3 (8): 609-612. DOI: 10.1002/cptc.201900116
- **23.** González Montoya, F.; Borondo, F.; Jung, C. (2020). Atom scattering off a vibrating surface: An example of chaotic scattering with three degrees of freedom. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 90: 105282. DOI: 10.1016/j.cnsns.2020.105282
- **24.** González-Castrillo, A.; Martín, F.; Palacios, A. (2020). Quantum state holography to reconstruct the molecular wave packet using an attosecond XUV-XUV pump-probe technique. *Scientific Reports*. 10 (1): 12981. DOI: 10.1038/s41598-020-69733-1
- **25.** Humeniuk, A.; Buzancic, M.; Hoche, J.; Cerezo, J.; Mitric, R.; Santoro, F.; Bonacic-Koutecky, V. (2020). Predicting fluorescence quantum yields for molecules in solution: A critical assessment of the harmonic approximation and the choice of the lineshape function. *Journal of Chemical Physics*. 152 (5): 054107. DOI: 10.1063/1.5143212
- **26.** Ibele, Lea M.; Sánchez-Murcia, Pedro A.; Mai, Sebastian; Nogueira, Juan J.; González, Leticia (2020). Excimers Intermediates en Route to Long-Lived Charge Transfer States in Single-Stranded Adenine DNA Revealed by Nonadiabatic Dynamics. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 11 (18): 7483-7488. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.0c02193
- **27.** Iglesias, S.; Gamonal, A.; Abudulimu, A.; Picón, A.; Carrasco, E.; Écija, D.; Liu, C.; Luer, L.; Zhang, X.; Sánchez Costa, J.; Moonshiram, D. (2020). Tracking the Light-Induced Excited-State Dynamics and Structural Configurations of an Extraordinarily Long-Lived Metastable State at Room Temperature. *Chemistry-A European Journal*. 26 (47): 10801-10810. DOI: 10.1002/chem.202001393

- **28.** Illescas, C.; Lombana, MA.; Méndez, L.; Rabadán, I.; Suárez, J. (2020). A classical and semiclassical study of collisions between Xq+ ions and water molecules. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 22 (35): 19573-19584. DOI: 10.1039/d0cp02839h
- **29.** Joos, JJ.; Smet, PF.; Seijo, L.; Barandiarán, Z. (2020). Insights into the complexity of the excited states of Eu-doped luminescent materials. *Inorganic Chemistry Frontiers*. 7 (4): 871-888. DOI: 10.1039/c9qi01455a
- **30.** Joos, JJ.; Van der Heggen, D.; Martín, LIDJ.; Amidani, L.; Smet, PF.; Barandiaran, Z.; Seijo, L. (2020). Broadband infrared LEDs based on europium-to-terbium charge transfer luminescence. *Nature Communications*. 11 (1): 3647. DOI: 10.1038/s41467-020-17469-x
- **31.** Kamel, EM.; Lamsabhi, AM. (2020). The quasi-irreversible inactivation of cytochrome P450 enzymes by paroxetine: a computational approach. *Organic & Biomolecular Chemistry*. 18 (17): 3334-3345. DOI: 10.1039/d0ob00529k
- **32.** Kohl, FR.; Zhang, Y.; Charnay, AP.; Martínez-Fernández, L.; Kohler, B. (2020). Ultrafast excited state dynamics of silver ion-mediated cytosine-cytosine base pairs in metallo-DNA. *Journal of Chemical Physics*. 153 (10): 105104. DOI: 10.1063/5.0020463
- **33.** Kuchlyan, J.; Martínez-Fernández, L.; Mori, M.; Gavvala, K.; Ciaco, S.; Boudier, C.; Richert, L.; Didier, P.; Tor, Y.; Improta, R.; Mely, Y. (2020). What Makes Thienoguanosine an Outstanding Fluorescent DNA Probe?. *Journal of the American Chemical Society*. 142 (40): 16999-17014. DOI: 10.1021/jacs.0c06165
- **34.** Laplaza, R.; Boto, RA.; Contreras-García, J.; Montero-Campillo, MM. (2020). Steric clash in real space: biphenyl revisited. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 22 (37): 21251-21256. DOI: 10.1039/d0cp03359f
- **35.** Legina, Maria S.; Nogueira, Juan J.; Kandioller, Wolfgang; Jakupec, Michael A.; González, Leticia; Keppler, Bernhard K. (2020). Biological evaluation of novel thiomaltol-based organometallic complexes as topoisomerase II α inhibitors. *Journal of Biological Inorganic Chemistry*. 25 (3): 451-465. DOI: 10.1007/s00775-020-01775-2.
- **36.** Lorient, V.; Marciniak, A.; Nandi, S.; Karras, G.; Hervé, M.; Constant, E.; Plésiat, E.; Palacios, AM.; Martín, F.; Lépine, F. (2020). High harmonic generation-2 ω attosecond stereo-photoionization interferometry in N₂. *Journal of Physics: Photonics*. 2 (2): 024003. DOI: 10.1088/2515-7647/ab7b10
- **37.** Lüdde, HJ.; Jorge, A.; Horbatsch, M.; Kirchner, T. (2020). Net electron capture in collisions of multiply charged projectiles with biologically relevant molecules. *Atoms*. 8 (3): 59. DOI: 10.3390/ATOMS8030059
- **38.** Maclot, S.; Lahl, J.; Peschel, J.; Wikmark, H.; Rudawski, P.; Brunner, F.; Coudert-Alteirac, H.; Indrajith, S.; Huber, BA.; Díaz-Tendero, S.; Aguirre, NF.; Rousseau, P.; Johnsson, P. (2020). Dissociation dynamics of the diamondoid adamantane upon photoionization by XUV femtosecond pulses. *Scientific Reports*. 10 (1): 2884. DOI: 10.1038/s41598-020-59649-1
- **39.** Maldonado, N.; Perles, J.; Martínez, JI.; Gómez-García, CJ.; Marcos, ML.; Amo-Ochoa, P. (2020). Experimental and Theoretical Study of Dynamic Structural Transformations between Sensing Copper(II)-Uracil Antiferromagnetic and Metamagnetic Coordination Compounds. *Crystal Growth & Design*. 20 (8): 5097-5107. DOI: 10.1021/acs.cgd.0c00268

- **40.** Martín Somer, A.; Macaluso, V.; Barnes, GL.; Yang, L.; Pratihari, S.; Song, K.; Hase, WL.; Spezia, R. (2020). Role of Chemical Dynamics Simulations in Mass Spectrometry Studies of Collision-Induced Dissociation and Collisions of Biological Ions with Organic Surfaces. *Journal of the American Society for Mass Spectrometry*. 31 (1): 2-24. DOI: 10.1021/jasms.9b00062
- **41.** Martínez-Fernández, L.; Espósito, L.; Improta, R. (2020). Studying the excited electronic states of guanine rich DNA quadruplexes by quantum mechanical methods: Main achievements and perspectives. *Photochemical & Photobiological Sciences*. 19 (4): 436-444. DOI: 10.1039/d0pp00065e
- **42.** Martínez-Fernández, L.; Gustavsson, T.; Diederichsen, U.; Improta, R. (2020). Excited state dynamics of 8-vinyldeoxyguanosine in aqueous solution studied by time-resolved fluorescence spectroscopy and quantum mechanical calculations. *Molecules*. 25 (4): 824. DOI: 10.3390/molecules25040824
- **43.** McDonnell, M.; LaForge, AC.; Reino-González, J.; Disla, M.; Kling, NG.; Mishra, D.; Obaid, R.; Sundberg, M.; Svoboda, V.; Díaz-Tendero, S.; Martín, F.; Berrah, N. (2020). Ultrafast Laser-Induced Isomerization Dynamics in Acetonitrile. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 11 (16): 6724-6729. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.0c01344
- **44.** Mó, O. (2020). Some interesting features of the rich chemistry around electron-deficient systems. *Pure and Applied Chemistry*. 92 (5): 773-787. DOI: 10.1515/pac-2019-0814/html
- **45.** Mó, O.; Montero-Campillo, MM.; Yáñez, M.; Alkorta, I.; Elguero, J. (2020). Are Anions of Cyclobutane Beryllium Derivatives Stabilized through Four-Center One-Electron Bonds?. *Journal of Physical Chemistry A*. 124 (8): 1515-1521. DOI: 10.1021/acs.jpca.9b10187
- **46.** Mó, O.; Yáñez, M. (2020). The Periodic Table. The power of systematization. The importance of precision. Celebration of the 150th Anniversary of the Periodic Table. *Real Academia Portuguesa*. 2020.
- **47.** Molina, A.; Díaz-Tendero, S.; Adrio, J.; Carretero, JC. (2020). Catalytic asymmetric synthesis of diazabicyclo[3.1.0]hexanes by 1,3-dipolar cycloaddition of azomethine ylides with azirines. *Chemical Communications*. 56 (37): 5050-5053. DOI: 10.1039/d0cc01061h
- **48.** Murillo-Sánchez, ML.; González-Vázquez, J.; Corrales, ME.; de Nelda, R.; Martínez-Núñez, E.; García-Vela, A.; Bañares, L. (2020). Femtochemistry under scrutiny: Clocking state-resolved channels in the photodissociation of CH₃I in the A-band. *Journal of Chemical Physics*. 152 (1): 014304. DOI: 10.1063/1.5134473
- **49.** Murillo-Sánchez, ML.; Zanchet, A.; Marggi Poullain, S.; González-Vázquez, J.; Bañares, L. (2020). Structural dynamics effects on the electronic predissociation of alkyl iodides. *Scientific Reports*. 10 (1): 6700. DOI: 10.1038/s41598-020-62982-0
- **50.** Nagahata, Y.; Borondo, F.; Benito, RM.; Hernández, R. (2020). Identifying reaction pathways in phase space via asymptotic trajectories. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 22 (18): 10087-10105. DOI: 10.1039/c9cp06610a
- **51.** Nandi, S.; Plesiat, E.; Zhong, S.; Palacios, A.; Busto, D.; Isinger, M.; Neoricic, L.; Arnold, CL.; Squibb, RJ.; Feifel, R.; Declava, P.; L'Huillier, A.; Martín, F.; Gisselbrecht, M. (2020). Attosecond timing of electron emission from a molecular shape resonance. *Science Advances*. 6 (31): eaba7762. DOI: 10.1126/sciadv.aba7762

- **52.** Neefjes, I.; Joos, J.J.; Barandiarán, Z.; Seijo, L. (2020). Mixed-Valence Lanthanide-Activated Phosphors: Invariance of the Intervalence Charge Transfer (IVCT) Absorption Onset across the Series. *Journal of Physical Chemistry C*. 124 (4): 2619-2626. DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b11084
- **53.** O'Neal, Jordan T; Champenois, Elio G; Oberli, Solene; Obaid, Razib; Al-Haddad, Andre; Barnard, Jonathan; Berrah, Nora; Coffee, Ryan; Duris, Joseph; Galinis, Gediminas; Garratt, Douglas; Glownia, James M; Haxton, Daniel; Ho, Phay; Li, Siqi; Li, Xiang; MacA (2020). Electronic Population Transfer via Impulsive Stimulated X-Ray Raman Scattering with Attosecond Soft-X-Ray Pulses. *Physical Review Letters*. 125 (7): 073203. DOI: 10.1103/PhysRevLett.125.073203
- **54.** O'Neal, J.T.; ... Oberli, S.; Picón, A. (2020). Electronic Population Transfer via Impulsive Stimulated X-Ray Raman Scattering with Attosecond Soft-X-Ray Pulses. *Physical Review Letters*. 125 (7): 073203. DOI: 10.1103/PhysRevLett.125.073203
- **55.** Palacios, A.; Martín, F. (2020). The quantum chemistry of attosecond molecular science. *Wiley Interdisciplinary Reviews-Computational Molecular Science*. 10 (1): e1430. DOI: 10.1002/wcms.1430
- **56.** Palmisano, V.F.; Gómez-Rodellar, C.; Pollak, H.; Cárdenas, G.; Corry, B.; Faraji, S.; Nogueira, J.J. (2020). Binding of Azobenzene and p-Diaminoazobenzene to the Human Voltage-Gated Sodium Channel NaV1.4. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 23 (4): 3552-3564. DOI: 10.1039/D0CP06140A
- **57.** Parraga, H.; Arranz, F.J.; Benito, R.M.; Borondo, F. (2020). Using correlation diagrams to study the vibrational spectrum of highly nonlinear floppy molecules: The K-CN case. *Physical Review E*. 101 (6): 062215. DOI: 10.1103/PhysRevE.101.062215
- **58.** Pizarra, M.; Díaz, C.; Martín, F. (2020). Defect formation in a graphene overlayer on ruthenium under high pressure. *Physical Review B*. 102 (7): 075406. DOI: 10.1103/PhysRevB.102.075406
- **59.** Pla, P.; Wang, Y.; Alcamí, M. (2020). When is the Bell-Evans-Polanyi principle fulfilled in Diels-Alder reactions of fullerenes? *Physical Chemistry Chemical Physics*. 22 (16): 8846-8852. DOI: 10.1039/c9cp06977a
- **60.** Pla, P.; Wang, Y.; Martín, F.; Alcamí, M. (2020). Hydrogenated polycyclic aromatic hydrocarbons: isomerism and aromaticity. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 22 (38): 21968-21976. DOI: 10.1039/d0cp04177g
- **61.** Pla, P.; Wang, Y.; Martín, F.; Alcamí, M. (2020). Isomers of Hydrogenated Polycyclic Aromatic Hydrocarbons Explain the Presence of Infrared Bands in the 3 μ m Region. *Astrophysical Journal*. 899 (1): 18. DOI: 10.3847/1538-4357/ab9cb4
- **62.** Rego, L.; Hernández-García, C.; Picón, A.; Plaja, L. (2020). Site-specific tunnel-ionization in high harmonic generation in molecules. *New Journal of Physics*. 22 (4): 043012. DOI: 10.1088/1367-2630/ab7dde
- **63.** Revuelta, F.; Vergini, E.; Benito, R.M.; Borondo, F. (2020). Short-periodic-orbit method for excited chaotic eigenfunctions. *Physical Review E*. 102 (4): 042210. DOI: 10.1103/PhysRevE.102.042210
- **64.** Rigotti, T.; Asenjo-Pascual, J.; Martín-Somer, A.; Milán Rois, P.; Cordani, M.; Díaz-Tendero, S.; Somoza, Á.; Fraile, A.; Alemán, J. (2020). Boron Dipyrromethene (BODIPY) as Electron-

Withdrawing Group in Asymmetric Copper-Catalyzed [3+2] Cycloadditions for the Synthesis of Pyrrolidine-Based Biological Sensors. *Advanced Synthesis & Catalysis*. 362 (6): 1345-1355. DOI: 10.1002/adsc.201901465

- 65. Rousseau, P.; Piekarski, DG.; Capron, M.; Domaracka, A.; Adoui, L.; Martín, F.; Alcamí, M.; Díaz-Tendero, S.; Huber, BA. (2020). Polypeptide formation in clusters of β -alanine amino acids by single ion impact. *Nature Communications*. 11 (1): 3818. DOI: 10.1038/s41467-020-17653-z
- 66. Sánchez-Murcia, P.A.; Nogueira, J.J.; Plasser, J.J.; González, L. (2020). Orbital-Free Photophysical Descriptors to Predict Directional Excitations in Metal-Based Photosensitizers. *Chemical Science*. 11 (29): 7685-7693. DOI: 10.1039/D0SC01684E
- 67. Segalina, A.; Cerezo, J.; Prampolini, G.; Santoro, F.; Pastore, M. (2020). Accounting for Vibronic Features through a Mixed Quantum-Classical Scheme: Structure, Dynamics, and Absorption Spectra of a Perylene Diimide Dye in Solution. *Journal of Chemical Theory and Computation*. 16 (11): 7061-7077. DOI: 10.1021/acs.jctc.0c00919
- 68. Sicignano, M.; Rodríguez, RI.; Capaccio, V.; Borello, F.; Cano, R.; De Riccardis, F.; Bernardi, L.; Díaz-Tendero, S.; Della Sala, G.; Alemán, J. (2020). Asymmetric trifluoromethylthiolation of azlactones under chiral phase transfer catalysis. *Organic & Biomolecular Chemistry*. 18 (15): 2914-2920. DOI: 10.1039/d0ob00476f
- 69. Turconi, M.; Barreau, L.; Busto, D.; Isinger, M.; Alexandridi, C.; Harth, A.; Squibb, RJ.; Kroon, D.; Arnold, CL.; Feifel, R.; Gisselbrecht, M.; Argenti, L.; Martín, F.; Huillier, AL.; Salieres, P. (2020). Spin-orbit-resolved spectral phase measurements around a Fano resonance. *Journal of Physics B-Atomic Molecular and Optical Physics*. 53 (18): 184003. DOI: 10.1088/1361-6455/ab9f0b
- 70. Valverde, AM.; Angulo, LD.; Cabello, MR.; García, SG.; Omiste, JJ.; Luo, J. (2020). Numerical simulation of knotted solutions for Maxwell equations. *Physical Review E*. 101 (6): 063305. DOI: 10.1103/PhysRevE.101.063305
- 71. Vos, E.; Montero-Campillo, MM.; Corral, I.; Yáñez, M.; Alkorta, I.; Elguero, J. (2020). From Very Strong to Inexistent Be-Be Bonds in the Interactions of Be₂ with π -Systems. *Chemphyschem*. 21 (24): 2701-2708. DOI: 10.1002/cphc.202000412
- 72. Vos, E.; Scott, TR.; González-Vázquez, J.; Corral, I.; Truhlar, DG.; Gagliardi, L. (2020). Intrastrand Photolesion Formation in Thio-Substituted DNA: A Case Study including Single-Reference and Multireference Methods. *Journal of Physical Chemistry A*. 124 (50): 10422-10433. DOI: 10.1021/acs.jpca.0c06814
- 73. Zanchet, A.; García, GA.; Nahon, L.; Bañares, L.; Marggi Poullain, S. (2020). Signature of a conical intersection in the dissociative photoionization of formaldehyde. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 22 (23): 12886-12893. DOI: 10.1039/d0cp01267j

OTRAS PUBLICACIONES

Conferencias Publicadas

1. Aguilar-Galindo, F.; Díaz-Tendero, S.; Borisov, AG. (2020). Resonant anionic states of organic molecules adsorbed on metal surfaces. *Journal of Physics: Conference Series*. 1412 (20): 202015. DOI: 10.1088/1742-6596/1412/20/202015

2. Barreiro, D.; Oostenrijk, B.; Walsh, N.; Sankari, A.; Månsson, EP.; Maclot, S.; Sorensen, S.; Díaz-Tendero, S.; Gisselbrecht, M. (2020). Deepening into the nucleation and fission processes of nano-hydrated ammonia clusters - A combined theoretical and experimental study. *Journal of Physics: Conference Series*. 1412 (20): 202030. DOI: 10.1088/1742-6596/1412/20/202030
3. Borrás, VJ.; González-Vázquez, J.; Klinker, M.; Martín, F. (2020). UV-pump/UV-probe spectroscopy of N₂. *Journal of Physics: Conference Series*. 1412 (7): 072037. DOI: 10.1088/1742-6596/1412/7/072037
4. Erdmann, E.; Indrajith, S.; Chiarinelli, J.; Díaz-Tendero, S.; Aguirre, NF.; Alcamí, M.; Domaracka, A.; Rousseau, P.; Huber, BA.; Bolognesi, P.; Avaldi, L.; Łabuda, M. (2020). Understanding the formation of metastable furan dication in collisions with ions. *Journal of Physics: Conference Series*. 1412 (13): 132002. DOI: 10.1088/1742-6596/1412/13/132002
5. Fernández-Milán, P.; Klinker, M.; González-Vázquez, J.; Martín, F. (2020). A look into the photoionization of medium-sized molecular systems from an XCHEM perspective. *Journal of Physics: Conference Series*. 1412 (15): 152049. DOI: 10.1088/1742-6596/1412/15/152049
6. Fuchs, J.; Douguet, N.; Donsa, S.; Martín, F.; Burgdorfer, J.; Argenti, L.; Cattaneo, L.; Keller, U. (2020). Time Delays from One-Photon Transitions in the Continuum. *Conference Proceedings - Lasers and Electro-Optics Society Annual Meeting-LEOS*. 2020-May.
7. Illescas, C.; Lombana, MA.; Méndez, L.; Rabadan, I.; Suárez, J. (2020). Ionization and electron capture in Li³⁺ + H₂O collisions. *Journal of Physics: Conference Series*. 1412 (16): 162006. DOI: 10.1088/1742-6596/1412/16/162006
8. Jorge, A.; Horbatsch, M.; Illescas, C. and Kirchner, T. (2020). Classical calculations of differential electron emission in fast heavy-ion collisions with water molecules. *Confereencia: 31st International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC)*. *Journal of Physics Conference Series*.
9. Lara-Astiaso, M.; Palacios, A.; Delgado, J.; González-Vázquez, J.; Decleva, P.; Martín, F. (2020). Attosecond XUV-pump/XUV-probe spectroscopy of glycine. *Journal of Physics: Conference Series*. 1412 (7): 072036. DOI: 10.1088/1742-6596/1412/7/072036
10. Mahajan, T.; Béroff, K.; Pons, B.; Illescas, C.; Chabot, M.; Idbarkach, T.; Jorge, A.; Aguirre, NF.; Díaz-Tendero, S. (2020). Energy deposit by electron excitation in C_nN⁺ projectiles (n=1-3) colliding at intermediate velocity with He atoms : semi-empirical estimates and calculations. *Journal of Physics: Conference Series*. 1412 (14): 142026. DOI: 10.1088/1742-6596/1412/14/142026
11. Petersson, CLM.; Barreau, L.; Klinker, M.; Camper, A.; Marante, C.; Gorman, T.; Kiesewetter, D.; Argenti, L.; Agostini, P.; González-Vázquez, J.; Dimauro, LF.; Salières, P.; Martín, F. (2020). Disentangling spectral phases of interfering autoionizing states from attosecond interferometric measurements. *Journal of Physics: Conference Series*. 1412 (7): 072010. DOI: 10.1088/1742-6596/1412/7/072010
12. Schneider, BI.; Bartschat, K.; Zatsarinny, O.; Hamilton, KR.; Bray, I.; Scrinzi, A.; Martín, F.; González Vázquez, J.; Tennyson, J.; Gorfinkiel, JD.; Lucchesse, R.; Pamidighantam, S. (2020). Atomic and Molecular Scattering Applications in an Apache Airavata Science Gateway. *ACM International Conference Proceeding Series*. 270-277. DOI: 10.1145/3311790.3397342

13. Sopena, A.; Palacios, A.; Martín, F.; Catoire, F.; Bachau, H. (2020). H2 photoionization induced by XUV pulses and X-ray free electron lasers. *Journal of Physics: Conference Series*. 1412 (7): 072042. DOI: 10.1088/1742-6596/1412/7/072042

Correcciones

1. Behmand, B.; Balanikas, E.; Martínez-Fernández, L.; Improta, R.; Banyasz, A.; Baldacchino, G.; Markovitsi, D. (2020). Erratum: Potassium Ions Enhance Guanine Radical Generation upon Absorption of Low-Energy Photons by G-Quadruplexes and Modify Their Reactivity (*The Journal of Physical Chemistry Letters* (2020) 11:4 (1305–1309) DOI: 10.1021/acs.jpcllett.9b03667). *Journal of Physical Chemistry Letters*. 11 (7): 2742. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.0c00815

2. IdBarkach, T.; Chabot, M.; Beroff, K.; Della Negra, S.; Lesrel, J.; Geslin, F.; Le Padellec, A.; Mahajan, T.; Díaz-Tendero, S. (2020). Breakdown curves of CH₂(+), CH₃(+), and CH₄(+) molecules I. Construction and application to electron collisions and UV photo-dissociation (vol 628, A75, 2019). *Astronomy & Astrophysics*. 636: C2. DOI: 10.1051/0004-6361/201935760e

Editorial

1. Ruiz-López, MF.; Alcami, M. (2020). Foreword to the special issue on the "Electronic structure: principles and applications (ESPA 2018)" conference". *Theoretical Chemistry Accounts*. 139 (4): 86. DOI: 10.1007/s00214-020-02600-4

4.TESIS DOCTORALES

En 2020, se han defendido 15 tesis doctorales en el departamento

Plan	Tesis defendidas
Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional	1
Total	1

Relación de Tesis doctorales - Ordenación alfabética por título

1. Fotofísica y fotoquímica de pequeñas biomoléculas.

Autoría: Arpa González, Enrique Manuel

Fecha de lectura: 18/12/2020

Dirigida por: Corral Pérez, Inés

Tutorizada por: Martín García, Fernando

<http://hdl.handle.net/10486/694105>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional
Departamento de Química

5.PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y CONTRATOS CON EMPRESAS

El Departamento para 2020 ha tenido vigentes 19 proyectos de investigación.

Relación de Proyectos de Investigación vigentes en 2020. Ordenación alfabética de título

1. Attosecond Chemistry- attochem

Referencia: CA18222

Vigencia: 10/25/2019 - 10/24/2023

Investigadores: Martín García, Fernando

Entidades participantes: Departamento de Química. Grupo Física Atómica y Molecular de Sistemas No Ligados.

Financiador: Comisión Europea

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: 1/1/2017 - 9/22/2020

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

Entidades participantes: Departamento de Química. Grupo Molecular Structure and Reactivity. Grupo Física Atómica y Molecular de Sistemas no Ligados. Grupo Ab Initio Simulations of Electron-Nuclear Dynamics: from Atoms to Surfaces.

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

3. Data for atomic processes related to neutral beams in fusion plasmas. IAEA Co-ordinated Research Project (CRP) F43023

Referencia: CRP-F43023

Vigencia: 3/1/2017 - 12/31/2021

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

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

Financiador:

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

Referencia: FIS2017-84684-R

Vigencia: 1/1/2018 - 12/31/2020

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

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

Financiador: Ministerio de Economía y Competitividad

5. Descripción teórica precisa de procesos elementales molécula-superficie relevantes para el desarrollo de nuevos materiales y nanodispositivos

Referencia: PID2019-106732GB-I00

Vigencia: 6/1/2020 - 5/31/2023

Investigadores: González Vázquez, Jesús (IP); Díaz Blanco, Cristina (IP); Rodríguez González, Sandra

Entidades participantes: Departamento de Química. Grupo Física Atómica y Molecular de Sistemas No Ligados. Grupo Ab Initio Simulations of Electron-Nuclear Dynamics: from Atoms to Surfaces.

Financiador: Agencia Estatal de Investigación

6. Disentangling the electronic and structural dynamics in functional molecular dyads using ultrafast X-ray spectroscopies

Referencia: SI2/PBG/2020-00003

Vigencia: 4/21/2020 - 12/31/2023

Investigadores: Gawelda, Wojciech Milosz (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química.

Financiador: Comunidad Autónoma de Madrid

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

Referencia: PGC2018-094644-B-C21

Vigencia: 1/1/2019 - 12/31/2021

Investigadores: Cuadrado Sánchez, Isabel (IP); Corral Pérez, Ines (IP); Yáñez Montero, Manuel; Mó Romero, Otilia; Montero Campillo, M^a Merced; Sanz Mercado, Pablo; Hernández Vizcaino, M^a Elisa; González Vadillo, Ana M^a

Entidades participantes: Departamento de Química. Departamento de Química Inorgánica. Grupo Molecular Structure and Reactivity. Grupo Estudios Feministas y de Género.

Financiador: Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades. Programa Estatal de Generación de Conocimiento y Fortalecimiento Científico y Tecnológico del Sistema de I+D+i

8. EMJMD Theoretical Chemistry and Computational Modelling

Referencia: 2019-1539/001-001

Vigencia: 9/1/2019 - 8/31/2025

Investigadores: Alcami Pertejo, Manuel

Entidades participantes: Departamento de Química. Grupo Molecular Processes Modeling Group.

Financiador: Agencia Ejecutiva de Educación Visual y Cultura

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

Referencia: RTI2018-097355-A-I00

Vigencia: 1/1/2019 - 12/31/2021

Investigadores: Marzo Puerta, Leyre; Maestro Rubio, Carmen; Fraile Carrasco, Alberto; Cano Monserrat, Rafael; Picón Álvarez, A. (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química. Departamento de Química Orgánica. Grupo Frontiers in Catalysis. Grupo Física Atómica y Molecular de Sistemas No Ligados.

Financiador: Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades. Programa Estatal de I+D+i Orientada a los Retos de la Sociedad

10. Extendiendo los límites de la física de Attosegundos: visualización y control de procesos de transferencia electrónica en sistemas de interés químico y biológico

Referencia: PID2019-105458RB-I00

Vigencia: 1/1/2019 - 12/31/2021

Investigadores: Martín García, Fernando (IP); Boll, Diego Iván René; González Castrillo, Alberto; Pisarra, Michele; Borrás De Llano, Josep Vicent; Palacios Cañas, Alicia (IP); Plesiat, Etienne; Martín Llorente, Beatriz; Sopena Moros, Arturo; Omiste Romero, Juan José; Arg

Entidades participantes: Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada. Departamento de Química. Grupo Física Atómica y Molecular de Sistemas No Ligados. Grupo Ab Initio Simulations of Electron-Nuclear Dynamics: from Atoms to Surfaces.

Financiador: Agencia Estatal de Investigación

11. Flujo de carga y energía en procesos químicos complejos

Referencia: PID2019-110091GB-I00

Vigencia: 6/1/2020 - 5/31/2023

Investigadores: Martín Somer, Ana; Barreiro Lage, Dario; Lamsabhi, Al Mokhtar; Martínez Fernández, Lara; Mo Romero, Otilia; Díaz-Tendero Victoria, Sergio (IP); Pla Terrada, Paula; Cerezo Bastida, Javier; Alcami Pertejo, Manuel (IP); Luna Fernández, Alberto

Entidades participantes: Departamento de Química. Departamento de Química Física Aplicada. Grupo Molecular Structure and Reactivity. Grupo Molecular Processes Modeling Group. Grupo Estudios Feministas y de Género.

Financiador: Agencia Estatal de Investigación

12. IMDEA Nanociencia. Apoyo a centros de excelencia Severo Ochoa

Referencia: SEV-2016-0686

Vigencia: 1/1/2017 - 12/31/2021

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

Entidades participantes: Departamento de Química. Grupo Física Atómica y Molecular de Sistemas No Ligados.

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

13. Impacto del cambio climático sobre el microbioma de suelos y lagos árticos = Climate change impacts on Arctic soil and lake microbiomes

Referencia: PCIN-2016-001

Vigencia: 12/1/2016 - 12/31/2020

Investigadores: Rico Eguizábal, Eugenio; Quesada del Corral, Antonio; Justel Eusebio, Ana María; Fernández Valiente, Eduardo; Perona Urizar, Elvira; Alcamí Pertejo, Antonio

Entidades participantes: Departamento de Ecología. Grupo Ecología Básica y Aplicada de Ecosistemas Acuáticos Continentales, Departamento de Matemáticas. Departamento de Química. Departamento de Biología. Grupo Molecular Processes Modeling Group. Grupo Cianobacterias: Diversidad y

Financiador: BIODIVERSA3 (UE). Ministerio de Economía, Industria y Competitividad

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

Referencia: LIA-DYNAMICS

Vigencia: 1/1/2013 - 12/31/2020

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

Entidades participantes: Departamento de Química. Grupo Molecular Processes Modeling Group. Grupo Física Atómica y Molecular de Sistemas No Ligados.

Financiador: Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS)

15. Métodos teóricos en ciencia de attosegundos

Referencia: UAM/128

Vigencia: 3/1/2019 - 2/28/2022

Investigadores: Martín García, Fernando (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química. Grupo Física Atómica y Molecular de Sistemas No Ligados.

Financiador: Universidad Autónoma de Madrid

16. Nanomateriales metal-orgánicos bio-inspirados fortalecidos para la creación de sensores

Referencia: PID2019-108028GB-C22

Vigencia: 1/1/2020 - 12/31/2022

Investigadores: Marcos Laguna, María Luisa; Amo Ochoa, María Pilar; Perles Hernández, Josefina

Entidades participantes: Departamento de Química. Departamento de Química Inorgánica. Grupo Materiales de Baja Dimensionalidad.

Financiador: Agencia Estatal de Investigación

17. Resolviendo la dinámica electrónica y estructural en fotocatalizadores moleculares con la espectroscopia ultrarrápida de rayos X

Referencia: PID2019-108678GB-I00

Vigencia: 6/1/2020 - 5/31/2023

Investigadores: Gawelda, Wojciech Milosz (IP); Picón Álvarez, Antonio

Entidades participantes: Departamento de Química. Grupo Física Atómica y Molecular de Sistemas No Ligados.

Financiador: Agencia Estatal de Investigación

18. Stability and transitions in physical processes - TRAX

Referencia: GA 734557

Vigencia: 3/1/2017 - 2/28/2021

Investigadores: Borondo Rodríguez, Florentino (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química.

Financiador: Comisión Europea

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

Referencia: MAT2017-83553-P

Vigencia: 1/1/2018 - 12/31/2021

Investigadores: Barandiaran Piedra, Zoila ; Pascual Robledo, José Luis ; Seijo Loche, Luis Ignacio (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química. Departamento de Química Física Aplicada.

Financiador: Ministerio de Economía y Competitividad

6. AYUDAS INDIVIDUALES

Ayudas individuales	Nº
Ayudas para la Formación del Personal Investigador (FPI)	1
Dotación adicional Ayudas para Contratos Predoctorales para la Formación de Doctores	3
Dotación Adicional Captación de Talentos Comunidad de Madrid	2
Dotación Adicional CONVENIO UAM LA CAIXA - INPHINIT. L	2
Dotación Adicional Juan de la Cierva	1
Dotación Adicional Programa Ramón y Cajal	1
Excelencia profesorado universitario Profesor Contratado Doctor	2
Total	12

7. GRUPOS DE INVESTIGACIÓN RECONOCIDOS POR LA UAM

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.

Materia ANEP: FI Física y ciencias del espacio; QMC Química

Participantes: Boll, Diego Iván René; Díaz Blanco, Cristina; Lara Astiaso, Manuel; Palacios Cañas, Alicia (coord.)

Departamentos con miembros del grupo: 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

Materia ANEP: CS Ciencias sociales

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 (coord.); 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; Historia Moderna; Medicina Preventiva y Salud Pública y Microbiología; Prehistoria y Arqueología; Psicología Biológica y de la Salud; Psicología Evolutiva y de la Educación; Química; Sociología

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.

Materia ANEP: FI Física y ciencias del espacio; MUL Multidisciplinar; QMC Química

Participantes: Borrás De Llano, Josép Vicent; Cueto Cordones, Marcos Del; Fernández Milán, Pedro; González Vázquez, Jesús; Klinker, Markus; Marggi Poullain, Sonia; Martín García, Fernando (coord.); Petersson, Carl Leon Mikael; Picón Álvarez, Antonio; Pisarra, Michele; Plesiat, Etienne; Sopena Moros, Arturo; Wang, Yang

Departamentos con miembros del grupo: Química

URL: <https://www.xchem.uam.es/xchem/>

4. Molecular processes modeling group

Acrónimo: MoIPM

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 fulerenos y PAH. Autoensamblado de moléculas en superficies. Estructura y reactividad de moléculas de interés en astroquímica. Estudio teórico del impacto medioambiental de plaguicidas

Materia ANEP: QMC Química

Participantes: Aguilar-Galindo Rodríguez, Fernando; Alcami Pertejo, Manuel (coord.); 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.

Materia ANEP: QMC Química

Participantes: Aguilera Porta, Neus; Alkorta Osoro, Ibon; Arpa González, Enrique Manuel; Corral Pérez, Inés; Iribarren Aguirre, Íñigo (Colaborador); Ivashchenko, Dmytro; Lamsabhi, Al Mokhtar; Mo Romero, Otilia; Montero Campillo, M. De La Merced; Sanz Mercado, Pablo; Tsai, I-Ting (Colaborador); Vetta, Martina De; Vos Esteban, Eva; Yáñez Montero, Manuel (coord.)

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.

Materia ANEP: FI Física y ciencias del espacio; QMC Química

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

Departamentos con miembros del grupo: Química

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

8. PREMIOS

ERC Synergy Grant.

Premiado: Fernando Martín García

Departamento: Departamento de Química

Concedido por: Consejo Europeo de Investigación (ERC)

Mildred Dresselhaus en categoría junior

Premiado: Alicia Palacios

Departamento: Departamento de Química

Concedido por: Cluster de Excelencia CUI Advanced Imaging of Matter de la Universidad de Hamburgo

9. PDI DEL DEPARTAMENTO Y ENLACE A SU PERFIL PÚBLICO EN EL PORTAL DE PRODUCCIÓN CIENTÍFICA DE LA UAM [PPC]

9.1. PDI PERMANENTE

[ALCAMI PERTEJO, MANUEL](#)

[MARCOS LAGUNA, M^a LUISA](#)

[BARANDIARAN PIEDRA, ZOILA](#)

[MARTIN GARCIA, FERNANDO](#)

[BORONDO RODRIGUEZ, FLORENTINO](#)

[MENDEZ AMBROSIO, LUIS](#)

[DIAZ-TENDERO VICTORIA, SERGIO](#)

[MORI SANCHEZ, PAULA](#)

[ILLESCAS ROJAS, CLARA MATILDE](#)

[RABADAN ROMERO, ISMANUEL](#)

[LAMSABHI, AL MOKHTAR](#)

[SEIJO LOCHE, LUIS IGNACIO](#)

9.2. PDI NO PERMANENTE

9.2.1 PDI EMÉRITO

[MO ROMERO, OTILIA](#)

[YAÑEZ MONTERO, MANUEL](#)

9.2.2 PDI DOCTOR NO PERMANENTE

[CEREZO BASTIDA, JAVIER](#)

[MONTERO CAMPILLO, M^a. MERCED](#)

[CORRAL PEREZ, INES](#)

[NOGUEIRA PEREZ, JUAN JOSE](#)

[GAWELDA, WOJCIECH MILOSZ](#)

[NORIEGA PÉREZ, JUAN JOSÉ](#)

[GONZALEZ VAZQUEZ, JESUS](#)

[OMISTE ROMERO, JUAN JOSE](#)

[MARTIN SOMER, ANA](#)

[PALACIOS CAÑAS, ALICIA](#)

[MARTINEZ FERNANDEZ, LARA](#)

[PICON ALVAREZ, ANTONIO](#)

9.2.3. PERSONAL INVESTIGADOR EN FORMACIÓN

[ARPA GONZALEZ, ENRIQUE MANUEL](#)

[LUCÍA TAMUDO, JESÚS](#)

[BARREIRO LAGE, DARIO](#)

[MALAKHOV , MIKHAIL](#)

[BORRAS DE LLANO, JOSEP VICENT](#)

[ORTÍN FERNÁNDEZ, FRANCISCO JAVIER](#)

[CISTARO , GIOVANNI CONSALVO](#)

[PLA TERRADA, PAULA](#)

[DOMINGO COLOMER, LAIA](#)

[ROMEO GELLA, FERNANDO](#)

[ERDMANN , EWA KATARZYNA](#)

[SUÑER RUBIO, ADRIAN JESÚS](#)

[FERNANDEZ MILAN, PEDRO](#)

[VOS ESTEBAN, EVA](#)



This work is licensed under a [Creative Commons Attribution 4.0 International License](#).

