



DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

**MEMORIA DE INVESTIGACIÓN
2021**



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

MEMORIA DE INVESTIGACIÓN DEL DEPARTAMENTO DE QUÍMICA 2021

El presente documento tiene como objetivo recoger los resultados de la investigación realizada a lo largo de 2021 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>491 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>~5</td> </tr> <tr> <td>45-54 años</td> <td>~25</td> <td>~15</td> </tr> <tr> <td>55-64 años</td> <td>~35</td> <td>~20</td> </tr> <tr> <td>65 ó + años</td> <td>~10</td> <td>~5</td> </tr> </tbody> </table> | Edad | HOMBRES | MUJERES | 35-44 años | ~10 | ~5 | 45-54 años | ~25 | ~15 | 55-64 años | ~35 | ~20 | 65 ó + años | ~10 | ~5 | <p>106 CATEDRÁTICOS</p> <p>237 TITULARES</p> <p>148 CONTR. DOCTORES</p> |
|---|---|--|---|---------|---------|------------|-----|----|------------|-----|-----|------------|-----|-----|-------------|-----|----|--|
| | Edad | HOMBRES | MUJERES | | | | | | | | | | | | | | | |
| | 35-44 años | ~10 | ~5 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 45-54 años | ~25 | ~15 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 55-64 años | ~35 | ~20 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 65 ó + años | ~10 | ~5 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| <p>453 PDI NO PERMANENTE</p> | <p>180 PDI Doctor no permanente</p> <p>249 Personal Investigador en Formación</p> <p>24 Profesores Eméritos</p> | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| <p>96 NUEVOS SEXENIOS DE INVESTIGACIÓN CONCEDIDOS EN 2021</p> | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| PROYECTOS Y TRANSFERENCIA | <p>484 PROYECTOS DE I+D+I VIGENTES</p> | <p>24 PATENTES</p> | <p>5 EBC activas</p> | | | | | | | | | | | | | | | |
| TESIS DOCTORALES | <p>200 TESIS DOCTORALES</p> | <p>FACULTAD DE CIENCIAS 2021</p> | | | | | | | | | | | | | | | | |
| PUBLICACIONES | <p>COLABORACIÓN EN LA AUTORIA DE ARTÍCULOS</p> | <p>1.722 PUBLICACIONES</p> <p>1.554 ARTÍCULOS</p> | <p>66% ARTÍCULOS Q1 (ICR)</p> | | | | | | | | | | | | | | | |
| | <p>894 Artículos en OA</p> | <p>ARTÍCULOS EN ACCESO ABIERTO</p> | <p>71% Artículos OA en Repositorio Institucional</p> | | | | | | | | | | | | | | | |

| INVESTIGADORES | <p>14</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>1</td> </tr> <tr> <td>45-54 AÑOS</td> <td>2</td> <td>2</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 | 1 | 45-54 AÑOS | 2 | 2 | 55-64 AÑOS | 1 | 1 | 65 Ó + AÑOS | 1 | 1 | <p>5 CATEDRÁTICOS</p> <p>4 TITULARES</p> <p>5 CONTR. DOCTORES</p> |
|--|---|--|--|---------|---------|------------|---|---|------------|---|---|------------|---|---|-------------|---|---|--|
| | Edad | Hombres | Mujeres | | | | | | | | | | | | | | | |
| | 35-44 AÑOS | 1 | 1 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 45-54 AÑOS | 2 | 2 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 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> | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| <p>3 SEXENIOS DE INVESTIGACIÓN CONCEDIDOS EN 2021</p> | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| PROYECTOS | <p>23</p> <p>PROYECTOS I+D+I VIGENTES</p> | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| TESIS DOCTORALES | <p>3</p> <p>TESIS DOCTORALES</p> | <p>DEPARTAMENTO DE QUÍMICA</p> <p>2021</p> | | | | | | | | | | | | | | | | |
| PUBLICATIONES | <p>COLABORACIÓN EN LA AUTORIA DE ARTÍCULOS</p> | <p>76</p> <p>PUBLICACIONES</p> <p>72</p> <p>ARTÍCULOS</p> | <p>60%</p> <p>ARTÍCULOS Q1 (JCR)</p> | | | | | | | | | | | | | | | |
| | <p>36</p> <p>Artículos en OA</p> | <p>ARTÍCULOS EN ACCESO ABIERTO</p> <p>abierto 50%</p> <p>cerrado 50%</p> | <p>89%</p> <p>Artículos OA en Repositorio Institucional</p> | | | | | | | | | | | | | | | |

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. EMPRESAS BASADAS EN EL CONOCIMIENTO
10. SEXENIOS
11. PREMIOS
12. PERSONAL DOCENTE E INVESTIGADOR

1. TABLAS

1.1. Tabla de Publicaciones

| AÑO | Total publicaciones | Nº Artículos | Q1 | % Q1 | Publicaciones/PDI permanente |
|--------------------------------|---------------------|--------------|-------|--------|------------------------------|
| Departamento de Química | | | | | |
| 2021 | 76 | 72 | 43 | 59,72% | 5,85 |
| 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 | | | | | |
| 2021 | 1.722 | 1.554 | 1.033 | 66,47% | 3,51 |
| 2020 | 1.680 | 1.524 | 926 | 60,76% | 3,40 |
| 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

| | Vigentes | TIPO DE FINANCIACIÓN | | ENTIDADES FINANCIADORAS | | | | |
|----------|----------|----------------------|---------|-------------------------|----|-----|-----|-------|
| | | PÚBLICA | PRIVADA | Ministerio | UE | CAM | UAM | otros |
| QUI | 23 | 23 | 0 | 12 | 4 | 3 | 3 | 1 |
| FACULTAD | 484 | 432 | 52 | 243 | 64 | 58 | 51 | 16 |

1.3. Tabla de Tesis Doctorales

| DEPARTAMENTO | 2021 | | | | |
|--------------|------------------|-----------|-------------|------------|-----------|
| | TESIS DEFENDIDAS | | | GÉNERO | |
| | Total | Dirigidas | Tutorizadas | HOMBRES | MUJERES |
| QUIMICA | 3 | 2 | 1 | 2 | 1 |
| TOTAL | 200 | 83 | 117 | 103 | 97 |

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 2022.

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.

Los indicios de calidad de los artículos Proceden de la base de datos Journal Citations Report (JCR).

Por primera vez, incluimos datos de acceso abierto a los artículos de investigación, el dato de acceso abierto en repositorio institucional corresponde a 31-10-2022, aunque la biblioteca continúa trabajando en su incorporación

En enero de 2022, la Agencia Nacional de Evaluación de la Calidad y Acreditación (ANECA), recomienda por primera vez, para la evaluación de la actividad investigadora, que los artículos sometidos a evaluación estén incluidos en los repositorios universitarios, como es el caso de [Biblos-e Archivo](#). Y lo reitera en el documento de "[Principios y directrices para la actualización de criterios de evaluación de la investigación de ANECA 2021](#)". Cuya directriz nº13 sobre los estándares e indicadores para la evaluación cualitativa de la producción científica, dice:

“Se recomienda que tanto las aportaciones presentadas para obtener el sexenio de investigación como las 4 aportaciones relevantes que deben identificarse en ACADEMIA estén depositadas en un repositorio con Green Open Access como los repositorios institucionales de los que disponen las universidades. En el futuro será obligatorio, salvo impedimento legal o imposibilidad técnica, este depósito para todas las aportaciones mencionadas.” Por este motivo, la Biblioteca de Ciencias ha hecho un gran esfuerzo de inclusión en el Repositorio institucional de artículos publicados por investigadores de Ciencias. Solo se han incluido artículos en los que los firmantes se indentifican como miembros de la Universidad Autónoma de Madrid.

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, Pubmed y Dialnet.
 - A petición de algunos Departamentos, se han incorporado publicaciones de profesores e investigadores no presentes en el Portal de Producción Científica de la UAM.
 - Repositorio institucional de la UAM [Biblos-e Archivo](#), para acompañar al artículo del enlace permanente (Handle), que nos sirve para confirmar que el artículo final o la versión aceptada y revisada por pares está en acceso abierto.
- Para los indicios de calidad.
 - Se utilizan los indicadores de factor de impacto de las publicaciones JCR (WoS) del año 2021.
- 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 ha presentado 76 publicaciones, de las que 72 son artículos científicos. De éstos, un total de 43 se han publicado en revistas del primer cuartil, que corresponde al 60% de los artículos publicados. Resaltar que este departamento ha firmado un artículo en la revista Science. El 4% de las publicaciones de la Facultad de Ciencias han sido firmadas por PDI del Departamento

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 |
| MOLECULES | 4 | Q2 |
| CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL | 3 | Q2 |
| FARADAY DISCUSSIONS | 3 | Q2 |
| PHYSICAL REVIEW E | 3 | Q1 |

Relación de Publicaciones de la Facultad, ordenadas alfabéticamente por autor

Leyenda de cuartiles de JCR 2021 [Q1] [Q2] [Q3] [Q4] [sin FI]

Artículos

1. Acheson, K.; Allum, F.; Das, R.; Dixit, G.; Doan, H.; Fasshauer, E.; Ge, L.; Grell, G.; Ivanov, M.; Kornilov, O.; Küpper, J.; Kuttner, C.; Martín, F.; Maxwell, A.; Mayer, N.; Palacios, A.; Pratt, S.; Röder, A.; Rohringer, N.; Rouzee, A.; Suzuki, T.; Titov, E.; Tremblay, J.C.; Yong, H.; Young.

L. (2021). Strong-field physics: general discussion. *Faraday Discussions* 228: 470-487. DOI: 10.1039/D1FD90025K

[Q2]

2. Aguilar-Galindo, F.; Borisov, AG.; Díaz-Tendero, S. (2021). Ultrafast Dynamics of Electronic Resonances in Molecules Adsorbed on Metal Surfaces: A Wave Packet Propagation Approach. *Journal of Chemical Theory and Computation*. 17 (2): 639-654. DOI: 10.1021/acs.jctc.0c01031 <http://hdl.handle.net/10486/700463> *Open Access [Q1]

3. Aguilar-Galindo, F.; Borisov, AG.; Díaz-Tendero, S. (2021). Unveiling the anisotropic behavior of ultrafast electron transfer at the metal/organic interface. *Applied Surface Science*. 554: 149311. DOI: 10.1016/j.apsusc.2021.149311 <http://hdl.handle.net/10486/700483> *Open Access [Q1]

4. Aguilar-Galindo, F.; Rodríguez, RI.; Mollari, L.; Alemán, J.; Díaz-Tendero, S. (2021). Visible-Light Radical-Radical Coupling vs. Radical Addition: Disentangling a Mechanistic Knot. *Catalysts*. 11 (8): 922. DOI: 10.3390/catal11080922 *Open Access [Q2]

5. Aguilar-Galindo, F.; Zapata-Herrera, M.; Díaz-Tendero, S.; Aizpurua, J.; Borisov, A.G. (2021). Effect of a Dielectric Spacer on Electronic and Electromagnetic Interactions at Play in Molecular Exciton Decay at Surfaces and in Plasmonic Gaps. *ACS Photonics*. 8 (12): 3495-3505. DOI: 10.1021/acsp Photonics.1c00791 [Q1]

6. Aguirre, NF.; Díaz-Tendero, S.; Hervieux, PA.; Alcamí, M.; Chabot, M.; Beroff, K.; Martín, F. (2021). Charge and energy sharing in the fragmentation of astrophysically relevant carbon clusters. *Theoretical Chemistry Accounts*. 140 (3): 22. DOI: 10.1007/s00214-020-02702-z [Q4]

7. Arranz, FJ.; Benito, RM.; Borondo, F. (2021). Correspondence between classical and quantum resonances. *Physical Review E*. 103 (6): 062207. DOI: 10.1103/PhysRevE.103.062207 [Q1]

8. Asha, H.; Green, JA.; Martínez-Fernández, L.; Espósito, L.; Improta, R. (2021). Electronic Circular Dichroism Spectra of DNA Quadruple Helices Studied by Molecular Dynamics Simulations and Excitonic Calculations including Charge Transfer States. *Molecules*. 26(16): 4789. DOI: 10.3390/molecules26164789 [Q2]

9. Ayani, CG.; Pizarra, M.; Urgel, JI.; Navarro, JJ.; Díaz, C.; Hayashi, H.; Yamada, H.; Calleja, F.; Miranda, R.; Fasel, R.; Martín, F.; Vázquez de Parga, AL. (2021). Efficient photogeneration of nonacene on nanostructured graphene. *Nanoscale Horizons*. 6 (9): 744-750. DOI: 10.1039/d1nh00184a [Q1]

- 10.** Balanikas, E.; Martínez-Fernández, L.; Baldacchino, G.; Markovitsi, D. (2021). Electron holes in g-quadruplexes: the role of adenine ending groups. *International Journal of Molecular Sciences*. 22 (24): 13436. DOI: 10.3390/ijms222413436
<http://hdl.handle.net/10486/704468> [Q1]
- 11.** Balanikas, E.; Martínez-Fernández, L.; Improta, R.; Podbevšek, P.; Baldacchino, G.; Markovitsi, D. (2021). The Structural Duality of Nucleobases in Guanine Quadruplexes Controls Their Low-Energy Photoionization. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 12 (34): 8309-8313. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.1c01846
[Q1]
- 12.** Baptista, FA.; Krizsan, D.; Stitch, M.; Sazanovich, IV.; Clark, IP.; Towrie, M.; Long, C.; Martínez-Fernández, L.; Improta, R.; Kane-Maguire, NAP.; Kelly, JM.; Quinn, SJ. (2021). Adenine Radical Cation Formation by a Ligand-Centered Excited State of an Intercalated Chromium Polypyridyl Complex Leads to Enhanced DNA Photo-oxidation. *Journal of the American Chemical Society*. 143 (36): 14766-14779. DOI: 10.1021/jacs.1c06658
[Q1]
- 13.** Barreiro-Lage, D.; Bolognesi, P.; Chiarinelli, J.; Richter, R.; Zettergren, H.; Stockett, MH.; Carlini, L.; Díaz-Tendero, S.; Avaldi, L. (2021). "Smart Decomposition" of Cyclic Alanine-Alanine Dipeptide by VUV Radiation: A Seed for the Synthesis of Biologically Relevant Species. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 12 (30): 7379-7386. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.1c01788
<http://hdl.handle.net/10486/699059> *Open Access [Q1]
- 14.** Barzaga, R.; Lestón-Sánchez, L.; Aguilar-Galindo, F.; Estévez-Hernández, O.; Díaz-Tendero, S. (2021). Synergy Effects in Heavy Metal Ion Chelation with Aryl- and Aroyl-Substituted Thiourea Derivatives. *Inorganic Chemistry*. 60 (16): 11984-12000. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.1c01068
<http://hdl.handle.net/10486/700424> *Open Access [Q1]
- 15.** Bello, RY.; Martín, F.; Palacios, A. (2021). Attosecond laser control of photoelectron angular distributions in XUV-induced ionization of H₂. *Faraday Discussions*. 228: 378-393. DOI: 10.1039/d0fd00114g
[Q2]
- 16.** Borrás, VJ.; González-Vázquez, J.; Argenti, L.; Martín, F. (2021). Molecular-Frame Photoelectron Angular Distributions of CO in the Vicinity of Feshbach Resonances: An XCHEM Approach. *Journal of Chemical Theory and Computation*. 17 (10): 6330-6339. DOI: 10.1021/acs.jctc.1c00480
<http://hdl.handle.net/10486/700285> *Open Access [Q1]
- 17.** Britz, A.; Bokarev, SI.; Assefa, TA.; Bajnóczi, ÈG.; Németh, Z.; Vankó, G.; Rockstroh, N.; Junge, H.; Beller, M.; Doumy, G.; March, AM.; Southworth, SH.; Lochbrunner, S.; Kühn, O.; Bressler, C.; Gawelda, W. (2021). Site-Selective Real-Time Observation of Bimolecular Electron Transfer in a Photocatalytic System Using L-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy**. *Chemphyschem*. 22 (7): 693-700. DOI: 10.1002/cphc.202000845
<http://hdl.handle.net/10486/701452> *Open Access [Q2]

- 18.** Buades, B.; Picón, A.; Berger, E.; León, I.; Di Palo, N.; Cousin, S.L.; Cocchi, C.; Pellegrin, E.; Herrero Martín, J.; Manas-Valero, S.; Coronado, E.; Danz, T.; Draxl, C.; Uemoto, M.; Yabana, K.; Schultze, M.; Wall, S.; Zuerch, M.; Biegert, J. (2021). Attosecond state-resolved carrier motion in quantum materials probed by soft x-ray XANES. *Applied Physics Reviews*. 8 (1): 011408. DOI: 10.1063/5.0020649
<http://hdl.handle.net/10486/701089> *Open Access [Q1]
- 19.** Cárdenas, G.; Trentin, I.; Schwiedrzik, L.; Hernández-Castillo, D.; Lowe, G.A.; Kund, J.; Kranz, C.; Klinger, S.; Stach, R.; Mizaikoff, B.; Marquetand, P.; Nogueira, J.J.; Streb, C.; González, L. (2021). Activation by Oxidation and Ligand Exchange in a Molecular Manganese Vanadium Oxide Water Oxidation Catalyst. *Chemical Science*. 12: (39): 12918-12927. DOI: 10.1039/D1SC03239A
[Q1]
- 20.** Cárdenas, G.; Pérez-Barcia, A.; Mandado, M.; Nogueira, J.J. (2021). Characterization of Cisplatin/Membrane Interactions by QM/MM Energy Decomposition Analysis. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 23: 20533-20540. DOI: 10.1039/D1CP03382D
[Q1]
- 21.** Cistaro, G.; Plaja, L.; Martín, F.; Picón, A. (2021). Attosecond x-ray transient absorption spectroscopy in graphene. *Physical Review Research*. 3 (1): 013144. DOI: 10.1103/PhysRevResearch.3.013144
<http://hdl.handle.net/10486/702288> *Open Access [sin FI]
- 22.** Delgado, J.; Lara-Astiaso, M.; González-Vázquez, J.; Decleva, P.; Palacios, A.; Martín, F. (2021). Molecular fragmentation as a way to reveal early electron dynamics induced by attosecond pulses. *Faraday Discussions*. 228: 349-377. DOI: 10.1039/d0fd00121j
[Q2]
- 23.** Domingo, L.; Borondo, F. (2021). Deep learning methods for the computation of vibrational wavefunctions. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 103: 105989. DOI: 10.1016/j.cnsns.2021.105989
*Open Access [Q1]
- 24.** Erdmann, E.; Aguirre, N.F.; Indrajith, S.; Chiarinelli, J.; Domaracka, A.; Rousseau, P.; Huber, B.A.; Bolognesi, P.; Richter, R.; Avaldi, L.; Díaz-Tendero, S.; Alcamí, M.; Labuda, M. (2021). A general approach to study molecular fragmentation and energy redistribution after an ionizing event. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 23 (3): 1859-1867. DOI: 10.1039/d0cp04890a
[Q1]
- 25.** Fallaque, J.G.; Ramos, M.; Busnengo, H.F.; Martín, F.; Díaz, C. (2021). Normal and off-normal incidence dissociative dynamics of O₂(v,J) on ultrathin Cu films grown on Ru(0001). *Physical Chemistry Chemical Physics*. 23 (13): 7768-7776. DOI: 10.1039/d0cp03979a
*Open Access [Q1]
- 26.** Franco, M.; Sáinz, R.; Lamsabhi, A.M.; Díaz, C.; Tortosa, M.; Cid, M.B. (2021). Evaluation of the role of graphene-based Cu(i) catalysts in borylation reactions dagger. *Catalysis Science & Technology*. 11 (10): 3501-3513. DOI: 10.1039/d1cy00104c

[Q2]

27. Fuchs, J.; Douguet, N.; Donsa, S.; Martín, F.; Burgdorfer, J.; Argenti, L.; Cattaneo, L.; Keller, U. (2021). Towards the complete phase profiling of attosecond wave packets. *Physical Review Research* 3: 013195-1 - 013195-8. DOI: 10.1103/PhysRevResearch.3.013195

*Open Access [sin FI]

28. Gal, J-F.; Maria, P-C.; Yáñez, M.; Mo, O. (2021). Enthalpies of Adduct Formation between Boron Trifluoride and Selected Organic Bases in Solution: Toward an Accurate Theoretical Entry to Lewis Basicity. *Molecules*. 26(21): 6659. DOI: 10.3390/molecules26216659

[Q2]

29. González-Muñoz, D.; Martín-Somer, A.; Strobl, K.; Cabrera, S.; De Pablo, P.J.; Díaz-Tendero, S.; Blanco, M.; Alemán, J. (2021). Enhancing Visible-Light Photocatalysis via Endohedral Functionalization of Single-Walled Carbon Nanotubes with Organic Dyes. *ACS Applied Materials & Interfaces*. 13 (21): 24877-24886. DOI: 10.1021/acsami.1c04679

<http://hdl.handle.net/10486/700465> *Open Access [Q1]

30. Guerra, C.; Kumar, S.; Aguilar-Galindo, F.; Díaz-Tendero, S.; Lozano, A.I.; Mendes, M.; Limão-Vieira, P.; García, G. (2021). Unexpected benzene oxidation in collisions with superoxide anions. *Scientific Reports*. 11: 23125. DOI: 10.1038/s41598-021-02408-7

[Q1]

31. Horgan D; Ciliberto G; Conte P; Curigliano G; Seijo L; Montuenga LM; Garassino M; Penault-Illorca F; Galli F; Ray-coquard I; Querleu D; Riegman P; Kerr K; Van Poppel H; Bjartell A; Codacci-pisanelli G; Koeva-balabanova J; Paradiso A; Maravic Z; Fotaki V; Malats N; Bernini C; Buglioni S; Kent A; Munzone E; Belina I; Van Meerbeeck J; Duffy M; Jagielska B; Capoluongo E (2021). Bringing onco-innovation to Europe's healthcare systems: the potential of biomarker testing, real world evidence, tumour agnostic therapies to empower personalised medicine. *Cancers*. 13 (3): 0583. DOI: 10.3390/cancers13030583

<http://hdl.handle.net/10486/701090> *Open Access [Q1]

32. Huber-Gedert, M.; Nowakowski, M.; Kertmen, A.; Burkhardt, L.; Lindner, N.; Schoch, R.; Herbst-Irmer, R.; Neuba, A.; Schmitz, L.; Choi, TK.; Kubicki, J.; Gawelda, W.; Bauer, M. (2021). Fundamental Characterization, Photophysics and Photocatalysis of a Base Metal Iron(II)-Cobalt(III) Dyad. *Chemistry-A European Journal*. 27 (38): 9905-9918. DOI: 10.1002/chem.202100766

<http://hdl.handle.net/10486/701518> *Open Access [Q2]

33. I-Ting, T.; Montero-Campillo, MM.; Alkorta, I.; Elguero, J.; Yáñez, M. (2021). Large Stabilization Effects by Intramolecular Beryllium Bonds in Ortho-Benzene Derivatives. *Molecules*. 26(11): 3401. DOI: 10.3390/molecules26113401

<http://hdl.handle.net/10486/701698> *Open Access [Q2]

34. Joos, JJ.; Neeffjes, I.; Seijo, L.; Barandiarán, Z. (2021). Charge transfer from Eu²⁺ to trivalent lanthanide co-dopants: Systematic behavior across the series. *Journal of Chemical Physics*. 154 (6): 064704. DOI: 10.1063/5.0037992

[Q1]

35. Joos, J.J.; Van Der Heggen, D.; Amidani, L.; Seijo, L.; Barandiarán, Z. (2021). Elucidation of the electron transfer mechanism in Eu²⁺ and Sm³⁺ codoped CaF₂: A step towards better understanding of trapping and detrapping in luminescent materials. *Physical Review B*. 104 (20): L201108. DOI: 10.1103/PhysRevB.104.L201108

[Q2]

36. Kamel, E.M.; Lamsabhi, A.M. (2021). Water biocatalytic effect attenuates cytochrome P450-mediated carcinogenicity of diethylnitrosamine: A computational insight. *Organic & Biomolecular Chemistry*. 19 (41): 9031-9042. DOI: 10.1039/d1ob01439k

<http://hdl.handle.net/10486/699464> *Open Access [Q1]

37. Kannis, C.S.; Suárez, J.; Rakitzis, T.P. (2021). Macroscopic production of spin-polarised hydrogen atoms from the IR-excitation and photodissociation of molecular beams. *Molecular Physics*. 120(1-2): e1975053. DOI: 10.1080/00268976.2021.1975053

[Q3]

38. Kirkpatrick, J.; McMorrow, B.; Turban, D.H.P.; Gaunt, A.L.; Spencer, J.S.; Matthews, A.G.D.G.; Obika, A.; Thiry, L.; Fortunato, M.; Pfau, D.; Román Castellanos, L.; Petersen, S.; Nelson, A.W.R.; Kohli, P.; Mori-Sánchez, P.; Hassabis, D.; Cohen, A.J. (2021). Pushing the frontiers of density functionals by solving the fractional electron problem. *Science*. 374 (6573): 1385-1389. DOI: 10.1126/science.abj6511

[Q1]

39. Lamsabhi, A.M.; Mo, O.; Yáñez, M. (2021). Perturbating Intramolecular Hydrogen Bonds through Substituent Effects or Non-Covalent Interactions. *Molecules*. 26(12): 3556. DOI: 10.3390/molecules26123556

<http://hdl.handle.net/10486/701699> *Open Access [Q2]

40. Lorient, V.; Marciniak, A.; Nandi, S.; Karras, G.; Hervé, M.; Constant, E.; Plésiat, E.; Palacios, A.; Martin, F.; Lépine, F. (2021). Attosecond Interferometry Using a HHG-2?? Scheme. *Studia Universitatis Babe?-Bolyai Physica*. 65 (1-2): 35-47. DOI: 10.24193/subbphys.2020.05 [sin FI]

41. Lu, C.; Jiang, K.; Tranca, D.; Wang, N.; Zhu, H.; Rodríguez-Hernández, F.; Chen, Z.; Yang, C.; Zhang, F.; Su, Y.; Ke, C.; Zhang, J.; Han, Y.; Zhuang, X. (2021). Electrochemical reduction of carbon dioxide with nearly 100% carbon monoxide faradaic efficiency from vacancy-stabilized single-atom active sites. *Journal of Materials Chemistry A*. 9 (44): 24955-24962. DOI: 10.1039/d1ta05990d

[Q1]

42. Martínez-Gualda, A.M.; Domingo-Legarda, P.; Rigotti, T.; Díaz-Tendero, S.; Fraile, A.; Alemán, J. (2021). Asymmetric [2+2] photocycloaddition via charge transfer complex for the synthesis of tricyclic chiral ethers. *Chemical Communications*. 57 (24): 3046-3049. DOI: 10.1039/d1cc00035g

<http://hdl.handle.net/10486/699599> *Open Access [Q1]

- 43.** Martini, L.; Boll, DIR.; Palacios, A.; Fojon, OA. (2021). Different approximations in the polarization control of two-color water molecule ionization. *Journal of Physics B-Atomic Molecular and Optical Physics*. 54 (13): 5602. DOI: 10.1088/1361-6455/abfc67
[Q3]
- 44.** Montero-Campillo, MM.; Alkorta, I.; Mo, O.; Elguero, J.; Yáñez, M. (2021). Clustering of Electron Deficient B- and Be-Containing Analogues: in the Fight for Tetracoordination, Beryllium Takes the Lead. *European Journal of Inorganic Chemistry*. 2021 (42): 4393-4401. DOI: 10.1002/ejic.202100737
[Q2]
- 45.** Montes, J.; Revuelta, F.; Borondo, F. (2021). Bohr-Sommerfeld-like quantization in the theory of walking droplets. *Physical Review E*. 103 (5): 053110. DOI: 10.1103/PhysRevE.103.053110
<http://hdl.handle.net/10486/702312> *Open Access [Q1]
- 46.** Montes, J.; Revuelta, F.; Borondo, F. (2021). Lagrangian descriptors and regular motion. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 102: 105860. DOI: 10.1016/j.cnsns.2021.105860
[Q1]
- 47.** Moreno-Da Silva, S.; Martínez, JI.; Develioglu, A.; Nieto-Ortega, B.; de Juan-Fernández, L.; Ruiz-González, L.; Picón, A.; Oberli, S.; Alonso, PJ.; Moonshiram, D.; Pérez, EM.; Burzurí, E. (2021). Magnetic, Mechanically Interlocked Porphyrin–Carbon Nanotubes for Quantum Computation and Spintronics. *Journal of the American Chemical Society*. 143 (50): 21286–21293. DOI: 10.1021/jacs.1c07058
[Q1]
- 48.** Murillo-Sánchez, ML.; Reitsma, G.; Poullain, SM.; Fernández-Milán, P.; González-Vázquez, J.; de Nalda, R.; Martín, F.; Vrakking, MJJ.; Kornilov, O.; Bañares, L. (2021). Femtosecond XUV- IR induced photodynamics in the methyl iodide cation. *New Journal of Physics*. 23 (7): 073023. DOI: 10.1088/1367-2630/ac0c9b
<http://hdl.handle.net/10486/702271> *Open Access [Q2]
- 49.** Nazari Haghighi Pashaki, M.; Choi, TK.; Rohwer, EJ.; Feurer, T.; Duhme-Klair, AK.; Gawelda, W.; Cannizzo, A. (2021). Unveiling the origin of photo-induced enhancement of oxidation catalysis at Mo(vi) centres of Ru(ii)-Mo(vi) dyads dagger. *Chemical Communications*. 57 (34): 4142-4145. DOI: 10.1039/d1cc00750e
<http://hdl.handle.net/10486/701509> *Open Access [Q1]
- 50.** Omiste, JJ.; Madsen, LB. (2021). Photoionization of aligned excited states in neon by attosecond laser pulses. *Journal of Physics B-Atomic Molecular and Optical Physics*. 54 (5): 4001. DOI: 10.1088/1361-6455/abd610
<http://hdl.handle.net/10486/702676> *Open Access [Q3]
- 51.** Ota, F.; Abe, S.; Hatada, K.; Ueda, K.; Díaz-Tendero, S.; Martín, F. (2021). Imaging intramolecular hydrogen migration with time- and momentum-resolved photoelectron

diffraction. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 23 (36): 20174-20182. DOI: 10.1039/d1cp02055b
<http://hdl.handle.net/10486/701145> *Open Access [Q1]

52. Palmisano, V.F.; Gómez-Rodellar, C.; Pollak, H.; Cárdenas, G.; Corry, B.; Faraji, S.; Nogueira, J.J. (2021). Binding of Azobenzene and p-Diaminoazobenzene to the Human Voltage-Gated Sodium Channel NaV1.4. *Physical Chemistry Chemical Physics*, (23): 3552-3564. DOI: 10.1039/D0CP06140A
[Q1]

53. Palomino-Ruiz, L.; Rodríguez-González, S.; Fallaque, JG.; Márquez, IR.; Agraït, N.; Díaz, C.; Leary, E.; Cuerva, JM.; Campaña, AG.; Martín, F.; Millán, A.; González, MT. (2021). Single-Molecule Conductance of 1,4-Azaborine Derivatives as Models of BN-doped PAHs. *Angewandte Chemie (International Ed. Print)*. 60 (12): 6609-6616. DOI: 10.1002/anie.202014194
[Q1]

54. Pisarra, M.; Díaz, C.; Martín, F. (2021). Theoretical study of structural and electronic properties of 2H-phase transition metal dichalcogenides. *Physical Review B*. 103 (19): 195416. DOI: 10.1103/PhysRevB.103.195416
[Q2]

55. Pla, P.; Dubosq, C.; Rapacioli, M.; Posenitskiy, E.; Alcamí, M.; Simón, A. (2021). Hydrogenation of C-24 Carbon Clusters: Structural Diversity and Energetic Properties. *Journal of Physical Chemistry A*. 125 (24): 5273-5288. DOI: 10.1021/acs.jpca.1c02359
<http://hdl.handle.net/10486/702673> *Open Access [Q2]

56. Rabadán, I.; Gorfinkiel, JD. (2021). Toward a description of electron-induced dissociative excitation in H₂O⁺: Investigation of three resonances above the (B)over-tilde state. *Physical Review A*. 103 (3): 032804. DOI: 10.1103/PhysRevA.103.032804
<http://hdl.handle.net/10486/693931> *Open Access [Q2]

57. Revuelta, F.; Benito, RM.; Borondo, F. (2021). Identification of the invariant manifolds of the LiCN molecule using Lagrangian descriptors. *Physical Review E*. 104 (4): 044210. DOI: 10.1103/PhysRevE.104.044210
[Q1]

58. Romeo-Gella, F.; Corral, I.; Faraji, S. (2021). Theoretical investigation of a novel xylene-based light-driven unidirectional molecular motor. *Journal of Chemical Physics*. 154 (6): 064111. DOI: 10.1063/5.0038281
<http://hdl.handle.net/10486/703274> *Open Access [Q1]

59. Rousseau, P.; González-Vázquez, J.; Piekarski, DG.; Kopyra, J.; Domaracka, A.; Alcamí, M.; Adoui, L.; Huber, BA.; Díaz-Tendero, S.; Martín, F. (2021). Timing of charge migration in betaine by impact of fast atomic ions. *Science Advances*. 7 (40): eabg9080. DOI: 10.1126/sciadv.abg9080
<http://hdl.handle.net/10486/702947> *Open Access [Q1]

- 60.** Ruano, L.; Cárdenas, G.; Nogueira, J.J. (2021). The Permeation Mechanism of Cisplatin through a Dioleoylphosphocholine Bilayer**. *Chemphyschem.* 22 (12): 1251-1261. DOI: 10.1002/cphc.202100059
<http://hdl.handle.net/10486/701451> *Open Access [Q2]
- 61.** Salvador, P.; Vos, E.; Corral, I.; Andrada, DM. (2021). Beyond the Classical Electron-Sharing and Dative Bond Picture: the Case of Spin-Polarized Bond. *Angewandte Chemie (International Ed. Print).* 60 (3): 1498-1502. DOI: 10.1002/anie.202010948
<http://hdl.handle.net/10486/701087> *Open Access [Q1]
- 62.** Santoro, F.; Green, JA.; Martínez-Fernández, L.; Cerezo, J.; Improta, R. (2021). Quantum and semiclassical dynamical studies of nonadiabatic processes in solution: achievements and perspectives. *Physical Chemistry Chemical Physics.* 23 (14): 8181-8199. DOI: 10.1039/d0cp05907b
<http://hdl.handle.net/10486/702300> *Open Access [Q1]
- 63.** Sopena, A.; Bachau, H.; Catoire, F.; Martín, F.; Palacios, A. (2021). Selecting two-photon sequential ionization pathways in H₂ through harmonic filtering. *Physical Chemistry Chemical Physics.* 23 (39): 22395-22403. DOI: 10.1039/d1cp03449a
[Q1]
- 64.** Sopena, A.; Palacios, A.; Catoire, F.; Bachau, H.; Martín, F. (2021). Angle-dependent interferences in electron emission accompanying stimulated Compton scattering from molecules. *Communications Physics.* 4 (1): 253. DOI: 10.1038/s42005-021-00749-3
<http://hdl.handle.net/10486/702116> *Open Access [Q1]
- 65.** Szabó, P.B.; Sabanés Zariquiey, F.; Nogueira, J.J. (2021). Cosolvent and Dynamic Effects in Binding Pocket Search by Docking Simulations. *Journal of Chemical Information and Modeling.* 61 (11): 5508–5523. DOI: 10.1021/acs.jcim.1c00924
<http://hdl.handle.net/10486/704574> [Q1]
- 66.** Tejerina, L.; Labella, J.; Martínez-Fernández, L.; Corral, I.; Martínez-Díaz, M.V.; Torres, T. (2021). Subphthalocyaninato Boron(III) Hydride: Synthesis, Structure and Reactivity. *Chemistry-A European Journal.* 27 (47): 12058-12062. DOI: 10.1002/chem.202101991
<http://hdl.handle.net/10486/700270> *Open Access [Q2]
- 67.** Vegas, VG.; Latorre, A.; Marcos, ML.; Gómez-García, CJ.; Castillo, O.; Zamora, F.; Gómez, J.; Martínez-Costas, J.; López, MV.; Somoza, A.; Amo-Ochoa, P. (2021). Rational Design of Copper(II)-Uracil Nanoprocessed Coordination Polymers to Improve Their Cytotoxic Activity in Biological Media. *ACS Applied Materials & Interfaces.* 13 (31): 36948-36957. DOI: 10.1021/acsami.1c11612
<http://hdl.handle.net/10486/698861> *Open Access [Q1]
- 68.** Vos, E.; Corral, I.; Montero-Campillo, MM.; Mó, O. (2021). Significant bonding rearrangements triggered by Mg₄ clusters. *Journal of Chemical Physics.* 154 (4): 044302. DOI: 10.1063/5.0038047
<http://hdl.handle.net/10486/699463> *Open Access [Q1]

69. Vos, E.; Corral, I.; Montero-Campillo, MM.; Mo, O.; Elguero, J.; Alkorta, I.; Yáñez, M. (2021). Spontaneous bond dissociation cascades induced by Be-n clusters (n=2,4). *Physical Chemistry Chemical Physics*. 23 (11): 6448-6454. DOI: 10.1039/d0cp06009g

[Q1]

70. Wang, X.; Martínez-Fernández, L.; Zhang, Y.; Zhang, K.; Improta, R.; Kohler, B.; Xu, J.; Chen, J. (2021). Solvent-Dependent Stabilization of a Charge Transfer State is the Key to Ultrafast Triplet State Formation in an Epigenetic DNA Nucleoside. *Chemistry-A European Journal*. 27 (42): 10932-10940. DOI: 10.1002/chem.202100787

[Q2]

71. Zettergren, H.; ... Díaz-Tendero S; Palacios, A.; Erdmann, E.; Alcamí, M.; ... Petrigiani, A. (2021). Roadmap on dynamics of molecules and clusters in the gas phase. *European Physical Journal D*. 75 (5): 152. DOI: 10.1140/epjd/s10053-021-00155-y

<http://hdl.handle.net/10486/701697> *Open Access [Q4]

72. Zúñiga, J.; Bastida, A.; Requena, A.; Cerezo, J. (2021). Ab Initio Partition Functions and Thermodynamic Quantities for the Molecular Hydrogen Isotopologues. *Journal of Physical Chemistry A*. 125 (41): 9226-9241. DOI: 10.1021/acs.jpca.1c06468

[Q2]

OTRAS PUBLICACIONES

Conferencias Publicadas

1. Borzdynski, O.G.; Borondo, F.; Curbelo, J. (2021). Exploring Datasets to Solve Partial Differential Equations with TensorFlow. *Advances in Intelligent Systems and Computing*. 1268 AISC441-450. DOI: 10.1007/978-3-030-57802-2_42

2. Lorient, V.; Marciniak, A.; Nandi, S.; Karras, G.; Hervé, M.; Constant, E.; Plesiat, E.; Palacios, A.; Martín, F.; Lepine, F. (2021). Attosecond Ionization Time Delay around a Shape Resonance in Nitrogen Measured by the RABBIT-2 ω method. 2021 Conference On Lasers and Electro-Optics Europe and European Quantum Electronics Conference, Cleo/Europe-Eqec 2021. DOI: 10.1109/CLEO/Europe-EQEC52157.2021.9542415

Notas

3. Allum, F.; Calegari, F.; Cavaletto, S.M.; Centurión, M.; Dixit, G.; Fasshauer, E.; Fischer, I.; Forbes, R.; Grell, G.; Ivanov, M.; Kirrander, A.; Kornilov, O.; Küpper, J.; Kuttner, C.; Marangos, J.; Matsika, S.; Maxwell, A.; Minns, R.S.; Moreno Carrascosa, A.; Natan, A.; Neumark, D.; Odate, A. (2021). Ultrafast X-ray science: General discussion. *Faraday Discussions*. 228 (0): 597-621. DOI: 10.1039/D1FD90026A

4. Ashfold, M.; Martín, F.; Palacios A.; Young, L. (2021). Time-resolved ultrafast spectroscopy: General discussion. *Faraday Discussions*. 228 (0): 329-348. DOI: 10.1039/D1FD90024B

4.TESIS DOCTORALES

En 2021, se han defendido 3 tesis doctorales en el departamento

| Plan | Tesis defendidas |
|---|------------------|
| Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional | 3 |
| Total | 3 |

Relación de Tesis doctorales - Ordenación alfabética por título

1. Computational study of the adsorption of molecules on metal surfaces Characterization of metal-thiourea derivatives interactions

Autoría: Barzaga Guzmán, Ransel

Fecha de lectura: 3/12/2021

Dirigida por: Diaz-Tendero Victoria, Sergio; Hernández Sánchez, Mayra P.

<http://hdl.handle.net/10486/700925>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

Departamento de Química

2. Estabilidad, reactividad y espectros infrarrojos de moléculas de carbono: de la química orgánica a la astrofísica

Autoría: Plá Terrada, Paula

Fecha de lectura: 1/3/2021

Dirigida por: Alcamí Pertejo, Manuel; Wang A, Yang

<http://hdl.handle.net/10486/695747>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

Departamento de Química

3. Study of relativistic effect in non-linear interaction between molecules and XUV/soft X-ray short laser pulses

Autoría: Sopena Moros, Arturo

Fecha de lectura: 26/3/2021

Dirigida por: Martín García, Fernando; Bachau, Henri

Tutorizada por: Palacios Cañas, Alicia

<http://hdl.handle.net/10486/695934>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

Departamento de Química

5.PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y CONTRATOS CON EMPRESAS

El Departamento para 2021 ha tenido vigentes 23 proyectos de investigación.

Relación de Proyectos de Investigación vigentes en 2021

1. Attosecond Chemistry- AttoChem

Referencia: CA18222

Vigencia: 2019 - 2023

Investigadores: Martín García, Fernando (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química; Grupo de Física Atómica y Molecular de Sistemas no Ligados

Financiador: Comisión Europea

2. Daño de membranas y control de canales iónicos fotoinducidos

Referencia: PID2020-117806GA-I00

Vigencia: 2021 - 2024

Investigadores: Palmisano, Vito Federico; Cárdenas, Gustavo Adolfo; Corry, Ben; Faraji, Shirin; Nogueira Pérez, Juan José (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química

Financiador: Ministerio de Ciencia e Innovación. Convocatoria 2020 Proyecto I+D+I, Programa Estatal de Generación de Conocimiento y Fortalecimiento Científico y Tecnológico

3. Data for atomic processes related to neutral beams in fusion plasmas

Referencia: IAEA Co-ordinated Research Project (CRP) F43023 **Vigencia:** 2017 - 2022

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

Entidades participantes: OIEA, UAM y otros 8 grupos de investigación de 8 países

Financiador: OIEA (Organismo Internacional de la Energía Atómica)

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

Referencia: FIS2017-84684-R **Vigencia:** 2018 - 2021

Investigadores: Illescas Rojas, Clara Matilde; Méndez Ambrosio, Luis

Entidades participantes: Departamento de Química

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:** 2020 - 2023

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

Entidades participantes: Departamento de Química; Departamento de Física de la Materia Condensada; Departamento de Química Física Aplicada; Grupo de Física Atómica y Molecular de Sistemas no Ligados; Grupo de Ab Initio Simulations of Electron-Nuclear Dynamics: From Atoms to Surfaces

Financiador: Ministerio de Ciencia e Innovación. Convocatoria 2019 Proyecto I+D+I, Programa Estatal de Generación de Conocimiento

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

Referencia: SI2/PBG/2020-00003 **Vigencia:** 2020 - 2023

Investigadores: Gawelda, Wojciech Milosz (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química

Financiador: Comunidad de Madrid

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

Referencia: PGC2018-094644-B-C21 **Vigencia:** 2019 - 2022

Investigadores: Cuadrado Sánchez, Isabel (IP); Bruña Fernández, Sonia

Entidades participantes: Departamento de Química Inorgánica; Departamento de Química; Grupo de Molecular Structure and Reactivity; Grupo de 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: 2019 - 2025

Investigadores: Alcamí Pertejo, Manuel (IP)

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

Financiador: Agencia Ejecutiva de Educación Audiovisual y Cultura

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

Referencia: RTI2018-097355-A-I00

Vigencia: 2019 - 2021

Investigadores: Marzo Puerta, Leyre; Maestro Rubio, Carmen; Fraile Carrasco; Alberto; Cano Monserrat, Rafael; Picón Álvarez, Antonio

Entidades participantes: Departamento de Química Inorgánica; Departamento de Química Orgánica; Departamento de Química; Grupo de Frontiers in Catalysis; Grupo de 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: 2020 - 2023

Investigadores: Fernández Milán, Pedro; Argenti, Luca; Omiste Romero, Juan José; Sopena Moros, Arturo; Martín Llorente, Beatriz; Plesiat, Etienne; Palacios Cañas, Alicia (IP); Borrás de Llano, Josép Vicent; Pizarra, Michele; González Castrillo, Alberto; Boll, Diego Iván; Reinio, Juan; Ambrosio, Marcelo; Suñer, Adrián; González, Celso Manuel

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

Financiador: Ministerio de Ciencia e Innovación. Convocatoria 2019 Proyecto I+D+i, Programa Estatal de Generación de Conocimiento

11. Flujo de carga y energía en procesos químicos complejos

Referencia: PID2019-110091GB-I00

Vigencia: 2020 - 2023

Investigadores: Plá Terreda, Paula; Díaz-Tendero Victoria, Sergio (IP); Mó Romero, Otilia; Martínez Fernández, Lara; Lamsabhi, Al Mokhtar; Barreiro Lage, Darío; Martín Somer, Ana; Luna Fernández, Alberto; Alcamí Pertejo, Manuel (IP); Cerezo Bastida, Javier

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

Financiador: Ministerio de Ciencia e Innovación. Convocatoria 2019 Proyecto I+D+i, Programa Estatal de Generación de Conocimiento

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; Grupo de Física Atómica y Molecular de Sistemas no Ligados

Financiador: Instituto Madrileño de Estudios Avanzados en Nanociencia. Ministerio de Economía y Competitividad

13. Métodos teóricos en ciencia de attosegundos

Referencia: UAM/128

Vigencia: 2019 - 2022

Investigadores: Martín García, Fernando (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química; Grupo de Física Atómica y Molecular de Sistemas no Ligados

Financiador: Universidad Autónoma de Madrid

14. Nanomateriales metal-orgánicos bio-inspirados FORTALECIDOS para la creación de sensores

Referencia: PID2019-108028GB-C22

Vigencia: 2020 - 2022

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

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

Financiador: Ministerio de Ciencia e Innovación. Convocatoria 2019 Proyecto I+D+I, Programa Estatal de Generación de Conocimiento

15. Predicting the environmental impact of relevant pesticides. (Programa de Fomento de la Transferencia de Conocimiento II)

Referencia: FUAM - Prog. 465022

Vigencia: 2020 - 2022

Investigadores: Alcamí Pertejo, Manuel; Díaz-Tendero, Sergio; Lamsabhi, Al Mokhtar; Plá Terrada, Paula; Pulgar, Antonio; Perez-Tabero, Sergio; Martín Somer, Ana

Entidades participantes: Departamento de Química

Financiador: Universidad Autónoma de Madrid & Adama Makhteshim Ltd / Adama AGAN Ltd

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

Referencia: PID2019-108678GB-I00

Vigencia: 2020 - 2023

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

Entidades participantes: Departamento de Química; Grupo de Física Atómica y Molecular de Sistemas no Ligados

Financiador: Ministerio de Ciencia e Innovación. Convocatoria 2019 Proyecto I+D+I, Programa Estatal de Generación de Conocimiento

17. Simulación de optoelectrónica molecular resuelta en el tiempo con el código Xchem

Referencia: PDC2021-121073-I00

Vigencia: 2021 - 2023

Investigadores: Martín García, Fernando (IP); Palacios Cañas, Alicia (IP); González-Vázquez, Jesús; Borrás de Llano, Vicent; Fernández Milán, Pedro; Martín Llorente, Beatriz

Entidades participantes: Departamento de Química

Financiador: Agencia Estatal de Investigación/NextGenerationEU

18. Sistema Experto de Predicción del Impacto Ambiental de Pesticidas

Referencia: PDC2021-121203-I00

Vigencia: 2021 - 2023

Investigadores: Alcamí Pertejo, Manuel (IP); Lamsabhi Belmeknassi, Al Mokhtar; Martínez Fernández, Lara; Plá Terrada, Paula

Entidades participantes: Departamento de Química

Financiador: Agencia Estatal de Investigación/NextGenerationEU

19. Sistema experto para identificación del riesgo de contaminantes emergentes provenientes de pesticidas

Referencia: Y2020/EMT-6290 (PRIES-CM) Grupo: COORDINADOR

Vigencia: 2021 - 2024

Investigadores: Alcamí Pertejo, Manuel (IP)

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

Financiador: Comunidad de Madrid

20. Software XChem para simulación de procesos inducidos por radiación en física, química y energía. (Programa de Fomento de la Transferencia de Conocimiento I)

Referencia: FUAM - Prog. 465001

Vigencia: 2019 - 2021

Investigadores: Martín García, Fernando; González-Vázquez, Jesús; Borrás de Llano; Vicent; Fernández Milán, Pedro

Entidades participantes: Departamento de Química

Financiador: Universidad Autónoma de Madrid, SIMUNE ATOMISTIC SIMULATIONS SL

21. Stability and transitions in physical processes - TRAX

Referencia: GA 734557

Vigencia: 2017 - 2021

Investigadores: Borondo Rodríguez, Florentino (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química

Financiador: Comisión Europea

22. The ultimate time scale in organic molecular opto-electronics, the attosecond

Referencia: GA 951224

Vigencia: 2021 - 2027

Investigadores: Martín García, Fernando (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química; Grupo de Física Atómica y Molecular de Sistemas no Ligados

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 Loche, Luis Ignacio (IP)

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

Financiador: Ministerio de Economía y Competitividad

6. AYUDAS INDIVIDUALES

| Tipo de Ayuda | Número |
|--|-----------|
| Dotación adicional Ayudas para Contratos Predoctorales para la Formación de Doctores | 10 |
| Dotación adicional capatación de talentos Comunidad de Madrid | 2 |
| Dotación adicional convenio UAM LA CAIXA-INPHINIT | 2 |
| Dotación adicional Juan de la Cierva | 1 |
| Dotación adicional Programa Ramón y Cajal | 1 |
| Excelencia profesorado universitario Profesor/a Contratado/a Doctor/a | 1 |
| Total general | 17 |

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.

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

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 (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 Cont

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.

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; Pizarra, 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: 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; 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.

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.

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. PATENTES

No tiene

9. EMPRESAS BASADAS EN EL CONOCIMIENTO

No tiene

10. SEXENIOS

| DEPARTAMENTO | SEXENIOS DE INVESTIGACIÓN ABIERTOS 2016-2021 | SEXENIO DE INVESTIGACION 2021 | SEXENIO DE TRANSFERENCIA 2019 |
|--------------|--|-------------------------------|-------------------------------|
| QUI | 21 | 3 | 1 |
| FACULTAD | 417 | 96 | 48 |

11. PREMIOS

No tiene

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

12.1. PDI PERMANENTE

[ALCAMI PERTEJO, MANUEL](#)

[GONZALEZ VAZQUEZ, JESUS](#)

[BARANDIARAN PIEDRA, ZOILA](#)

[ILLESCAS ROJAS, CLARA MATILDE](#)

[BORONDO RODRIGUEZ, FLORENTINO](#)

[LAMSABHI , AL MOKHTAR](#)

[DIAZ-TENDERO VICTORIA, SERGIO](#)

[MARCOS LAGUNA, Mª LUISA](#)

[MARTIN GARCIA, FERNANDO](#)

[RABADAN ROMERO, ISMANUEL](#)

[MENDEZ AMBROSIO, LUIS](#)

[SEIJO LOCHE, LUIS IGNACIO](#)

[MORI SANCHEZ, PAULA](#)

12.2. PDI NO PERMANENTE

12.2.1 PDI EMÉRITO

[MO ROMERO, OTILIA](#)

[YAÑEZ MONTERO, MANUEL](#)

12.2.2 PDI DOCTOR NO PERMANENTE

[CEREZO BASTIDA, JAVIER](#)

[NORIEGA PÉREZ, JUAN JOSÉ](#)

[CORRAL PEREZ, INES](#)

[OMISTE ROMERO, JUAN JOSE](#)

[MARTIN SOMER, ANA](#)

[PALACIOS CAÑAS, ALICIA](#)

[MARTINEZ FERNANDEZ, LARA](#)

[PICON ALVAREZ, ANTONIO](#)

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

12.2.3. PERSONAL INVESTIGADOR EN FORMACIÓN

[BARREIRO LAGE, DARIO](#)

[MALAKHOV , MIKHAIL](#)

[BORRAS DE LLANO, JOSEP VICENT](#)

[PLA TERRADA, PAULA](#)

[CISTARO , GIOVANNI CONSALVO](#)

[ROMEO GELLA, FERNANDO](#)

[FERNANDEZ MILAN, PEDRO](#)

[VOS ESTEBAN, EVA](#)

