



DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

MEMORIA DE INVESTIGACIÓN 2022

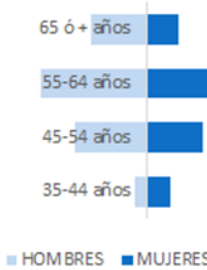
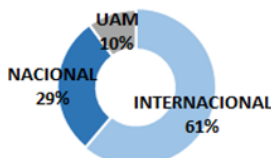





This work is licensed under a [Creative Commons Attribution 4.0 International License](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

MEMORIA DE INVESTIGACIÓN DEL DEPARTAMENTO DE QUÍMICA 2022

El presente documento tiene como objetivo recoger los resultados de la investigación realizada a lo largo de 2022 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, sexenios, empresas basadas en el conocimiento activas, 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>490 PDI PERMANENTE</p> 	<p>122 CATEDRÁTICOS</p> <p>222 TITULARES</p> <p>146 CONTR. DOCTORES</p>	
	<p>465 PDI NO PERMANENTE</p>	<p>222 PDI Doctor no permanente</p> <p>215 Personal Investigador en Formación</p> <p>2 Profesores honorarios</p> <p>26 Profesores Eméritos</p>	
	<p>73 NUEVOS SEXENIOS DE INVESTIGACIÓN CONCEDIDOS EN 2022</p>		
PROYECTOS Y TRANSFERENCIA	<p>547 PROYECTOS DE I+D+I VIGENTES</p>	<p>24 PATENTES</p>	<p>5 EBC activas</p>
TESIS DOCTORALES	<p>216 TESIS DOCTORALES</p>	<p>FACULTAD DE CIENCIAS 2022</p>	
PUBLICACIONES	<p>COLABORACIÓN EN LA AUTORIA DE ARTÍCULOS</p> 	<p>1.322 PUBLICACIONES</p> <p>1.135 ARTÍCULOS</p>	 <p>59% ARTÍCULOS Q1 (JCR)</p>
	 <p>650 artículos en Biblos-e Archivo</p>	<p>ARTÍCULOS EN REPOSITORIO BIBLOS-E ARCHIVO</p> 	<p>57% Artículos OA en Repositorio Institucional</p>

INVESTIGADORES	<p>13 PDI PERMANENTE</p>		<p>5 CATEDRÁTICOS</p> <p>3 TITULARES</p> <p>5 CONTR. DOCTORES</p>
	<p>19 PDI NO PERMANENTE</p>	<p>4 PDI Doctor no permanente</p> <p>13 Personal Investigador en Formación</p> <p>2 Profesores Eméritos</p>	
	<p>4 NUEVOS SEXENIOS DE INVESTIGACIÓN CONCEDIDOS EN 2022</p>		
PROYECTOS	<p>20 PROYECTOS I+D+I VIGENTES</p>		
TESIS DOCTORALES	<p>7 TESIS DOCTORALES</p>	<p>DEPARTAMENTO DE QUÍMICA 2022</p>	
PUBLICATIONES	<p>COLABORACIÓN EN LA AUTORIA DE ARTÍCULOS</p> 	<p>70 PUBLICACIONES</p> <p>57 ARTÍCULOS</p>	 <p>51% ARTÍCULOS Q1 (JCR)</p>
	 <p>27 Artículos en Biblos-e Archivo</p>	<p>ARTÍCULOS EN REPOSITORIO BIBLOS-E ARCHIVO</p>  <p>47%</p>	<p>47% 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	Artículos	Q1	% Q1	Publicaciones/PDI Permanente
Departamento de Química					
2022	70	57	29	50,88%	5,83
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
FACULTAD DE CIENCIAS					
2022	1.322	1.135	669	58,94%	2,70
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

1.2. Tabla de Proyectos de Investigación y Contratos con empresas

DEPARTAMENTO	TIPO DE FINANCIACIÓN			ENTIDADES FINANCIADORAS				
	Vigentes	PÚBLICA	PRIVADA	Ministerio	UE	CAM	UAM	otros
QUI	20	19	1	12	2	2	2	2
FACULTAD	547	485	62	321	55	65	31	75

1.3. Tabla de Tesis Doctorales

DEPARTAMENTO	2022				
	TESIS DEFENDIDAS			GÉNERO	
	Total	Dirigidas	Tutorizadas	HOMBRES	MUJERES
QUIMICA	7	5	2	5	2
FACULTAD	217	113	104	111	103

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 mayo de 2023.

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).

Desde 2021, la biblioteca viene realizando un trabajo de inclusión en el repositorio institucional Biblos e Archivo, de todos los artículos de nuestro PDI firmados como UAM, atendiendo a los derechos de propiedad intelectual vigentes.

Para ello, la biblioteca utiliza la información sobre artículos publicados por nuestros investigadores, comprobando las políticas editoriales y depositándolos en el repositorio.

Este año en las convocatorias de Evaluación de sexenios y Acreditación, la ANECA ha puesto como condición, que los artículos de 2011 en adelante a evaluar estén depositados en un repositorio institucional o temático, lo que ha supuesto un gran esfuerzo para la biblioteca, ya que además del volumen de artículos que se estudiaron, se han tenido que conseguir, con el PDI implicado, las versiones adecuadas de los artículos.

En el apartado de artículos en acceso abierto recogemos los artículos en el repositorio institucional. El dato de acceso abierto en repositorio institucional corresponde a 29-02-2024, aunque la biblioteca continúa trabajando en su incorporación

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
 - 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 70 publicaciones, de las que 57 son artículos científicos. De éstos, un total de 29 se han publicado en revistas del primer cuartil, que corresponde al 51% de los artículos publicados. Resaltar que este departamento ha firmado un artículo en la revista Science. El 5% 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	Q2
PHYSICAL REVIEW A	4	Q2
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS	3	Q1
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. Ahmadi, H.; Plésiat, E.; Moiola, M.; Frassetto, F.; Poletto, L.; Decleva, P.; Schröter, C.D.; Pfeifer, T.; Moshhammer, R.; Palacios, A.; Martín, F.; Sansone, G. (2022). Attosecond photoionisation time delays reveal the anisotropy of the molecular potential in the recoil frame. *Nature Communications*. 13 (1): 1242. DOI: 10.1038/s41467-022-28783-x Y[Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/707198>

2. Al-Haddad, A.; Oberli, S.; González-Vázquez, J.; Bucher, M.; Doumy, G.; Ho, P.; Krzywinski, J.; Lane, T.J.; Lutman, A.; Marinelli, A.; Maxwell, T.J.; Moeller, S.; Pratt, S.T.; Ray, D.; Shepard, R.; Southworth, S.H.; Vázquez-Mayagoitia, Á.; Walter, P.; Young, L.; Picón, A.; Bostedt, C. (2022). Observation of site-selective chemical bond changes via ultrafast chemical shifts. *Nature Communications*. 13 (1): 7170. DOI: 10.1038/s41467-022-34670-2 [Q1]

3. Ambrosio, M.J.; Plesiat, E.; Decleva, P.; Echenique, P.M.; Díez Muiño, R.; Martín, F. (2022). Cluster approach to scattering in MoS₂ photoemission. *Chemical Physics*. 557: 111476. DOI: 10.1016/j.chemphys.2022.111476 [Q3]

4. Ambrosio, M.J.; Plésiat, E.; Decleva, P.; Echenique, P.M.; Díez Muiño, R.; Martín, F. (2022). Scattering effects from neighboring atoms in core-level WSe₂ photoemission. *Physical Review B*. 105 (12): 125405. DOI: 10.1103/PhysRevB.105.125405 Y[Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/706048>
5. Bao, W.; Huang, S.; Tranca, D.; Feng, B.; Qiu, F.; Rodríguez-Hernández, F.; Ke, C.; Han, S.; Zhuang, X. (2022). Molecular Engineering of Co-II Porphyrins with Asymmetric Architecture for Improved Electrochemical CO₂ Reduction. *Chemsuschem*. 15 (8): e202200090. DOI: 10.1002/cssc.202200090 [Q1]
6. Barreiro-Lage, D.; Nicolafrancesco, C.; Kocisek, J.; Luna, A.; Kopyra, J.; Alcamí, M.; Huber, B.A.; Martín, F.; Domaracka, A.; Rousseau, P.; Díaz-Tendero, S. (2022). Controlling the diversity of ion-induced fragmentation pathways by N-methylation of amino acids. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 24 (2): 941-954. DOI: 10.1039/d1cp04097a Y[Q2]
7. Bello, R.Y.; Borrás, V.J.; González-Vázquez, J.; Martín, F. (2022). Electronic coherences in argon through interfering one- and two-photon ionization processes in the vicinity of Feshbach resonances. *Physical Review Research*. 4 (4): 43028. DOI: 10.1103/physrevresearch.4.043028 [Q1]
8. Bertolino, M.; Carlstrom, S.; Peschel, J.; Zapata, F.; Lindroth, E.; Dahlstrom, J.M. (2022). Thomas-Reiche-Kuhn correction for truncated configuration-interaction spaces: Case of laser-assisted dynamical interference. *Physical Review A*. 106 (4): 43108. DOI: 10.1103/physreva.106.043108 [Q2]
9. Bruña, S.; Valverde-González, A.; Montero-Campillo, M.M.; Mó, O.; Cuadrado, I. (2022). Thiol-yne chemistry of diferrocenylacetylene: from synthesis and electrochemistry to theoretical studies. *Dalton Transactions*. 51 (40): 15412-15424. DOI: 10.1039/d2dt02378d [Q1]
10. Busto, D.; Laurell, H.; Finkelstein-Shapiro, D.; Alexandridi, C.; Isinger, M.; Nandi, S.; Squibb, R.J.; Turconi, M.; Zhong, S.; Arnold, C.L.; Feifel, R.; Gisselbrecht, M.; Salieres, P.; Pullerits, T.; Martín, F.; Argenti, L.; L'Huillier, A. (2022). Probing electronic decoherence with high-resolution attosecond photoelectron interferometry. *European Physical Journal D*. 76 (7): 112. DOI: 10.1140/epjd/s10053-022-00438-y Y[Q3]
<http://hdl.handle.net/10486/705911>
11. Caldero-Rodríguez, N.E.; Arpa, E.M.; Cárdenas, D.J.; Martínez-Fernández, L.; Jockush, S.; Seth, S.K.; Corral, I.; Crespo-Hernández, C.E. (2022). 2-Oxopurine Riboside: A Dual Fluorescent Analog and Photosensitizer for RNA/DNA Research. *Journal of Physical Chemistry B*. 126 (24): 4483-4490. DOI: 10.1021/acs.jpcc.2c01113 N[Q3]
12. Carlo, G.G.; Montes, J.; Borondo, F. (2022). Lagrangian descriptors for the Bunimovich stadium billiard. *Physical Review E*. 105 (1): 14208. DOI: 10.1103/PhysRevE.105.014208 Y[Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/705916>
13. Casares, R.; Martínez-Pinel, Á.; Rodríguez-González, S.; Márquez, I.R.; Lezama, L.; González, M.T.; Leary, E.; Blanco, V.; Fallaque, J.G.; Díaz, C.; Martín, F.; Cuerva, J.M.; Millán, A. (2022).

Engineering the HOMO-LUMO gap of indeno[1,2-b]fluorene. *Journal of Materials Chemistry C*. 10 (32): 11775-11782. DOI: 10.1039/d2tc02475f Y[Q1]

14. Cattaneo, L.; Pedrelli, L.; Bello, R.Y.; Palacios, A.; Keathley, P.D.; Martín, F.; Keller, U. (2022). Isolating Attosecond Electron Dynamics in Molecules where Nuclei Move Fast. *Physical Review Letters*. 128 (6): 63001. DOI: 10.1103/PhysRevLett.128.063001 Y[Q1]

<http://hdl.handle.net/10486/706255>

15. Cerezo, J.; Santoro, F. (2022). FCclasses3: Vibrationally-resolved spectra simulated at the edge of the harmonic approximation. *Journal of Computational Chemistry*. 44 (4): 626-643. DOI: 10.1002/jcc.27027 [Q3]

16. Chang, K.F.; Wang, H.; Poullain, S.M.; González-Vázquez, J.; Bañares, L.; Prendergast, D.; Neumark, D.M., Leone, S.R. (2022). Conical intersection and coherent vibrational dynamics in alkyl iodides captured by attosecond transient absorption spectroscopy. *Journal of Chemical Physics*. 156 (11): 114304. DOI: 10.1063/5.0086775 [Q1]

<http://hdl.handle.net/10486/706834>

17. Chiarinelli, J.; Barreiro-Lage, D.; Bolognesi, P.; Richter, R.; Zettergren, H.; Stockett, M.H.; Díaz-Tendero, S.; Avaldi, L. (2022). Electron and ion spectroscopy of the cyclo-alanine-alanine dipeptide. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 24 (10): 5855-5867. DOI: 10.1039/d1cp05811h [Q2]

18. Corpas, J.; Arpa, E.M.; Lapierre, R.; Corral, I.; Mauleón, P.; Arrayás, R.G.; Carretero, J.C. (2022). Interplay between the Directing Group and Multifunctional Acetate Ligand in Pd-Catalyzed anti-Acetoxylation of Unsymmetrical Dialkyl-Substituted Alkynes. *ACS Catalysis*. 12 (11): 6596-6605. DOI: 10.1021/acscatal.2c00710 Y[Q1]

<http://hdl.handle.net/10486/703195>

19. Del Cueto, M.; Muzas, A.S.; Martín, F.; Díaz, C. (2022). Stereodynamics effects in grazing-incidence fast-molecule diffraction. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 24 (32): 19541-19551. DOI: 10.1039/d2cp02109a [Q2]

20. Díaz, C.; Calleja, F.; Vázquez de Parga, A.L.; Martín, F. (2022). Graphene grown on transition metal substrates: Versatile templates for organic molecules with new properties and structures. *Surface Science Reports*. 77 (4): 100575. DOI: 10.1016/j.surfrep.2022.100575 [Q1]

21. Domingo, L.; Borondo, J.; Borondo, F. (2022). Adapting reservoir computing to solve the Schrodinger equation. *Chaos*. 32 (6): 63111. DOI: 10.1063/5.0087785 Y[Q1]

<http://hdl.handle.net/10486/706956>

22. Domingo, L.; Carlo, G.; Borondo, F. (2022). Optimal quantum reservoir computing for the noisy intermediate-scale quantum era. *Physical Review E*. 106 (4): L043301. DOI: 10.1103/PhysRevE.106.L043301 [Q1]

<http://hdl.handle.net/10486/706274>

- 23.** Fallaque, J.G.; Rodríguez-González, S.; Díaz, C.; Martín, F. (2022). A simple model to engineer single-molecule conductance of acenes by chemical disubstitution. *Nanoscale*. 14 (2): 464-472. DOI: 10.1039/d1nr06687k N[Q1]
- 24.** Fallaque, J.G.; Rodríguez-González, S.; Martín, F.; Díaz, C. (2022). Self-energy corrected DFT-NEGF for conductance in molecular junctions: an accurate and efficient implementation for TRANSIESTA package applied to Au electrodes. *Journal of Physics-Condensed Matter*. 34 (43): 435901. DOI: 10.1088/1361-648X/ac89c4 [Q3]
- 25.** Ganguly, S.; Barreiro-Lage, D.; Walsh, N.; Oostenrijk, B.; Sorensen, S.L.; Díaz-Tendero, S.; Gisselbrecht, M. (2022). The origin of enhanced O-2(+) production from photoionized CO2 clusters. *Communications Chemistry*. 5 (1): 16. DOI: 10.1038/s42004-022-00629-z Y[Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/706807>
- 26.** Ganguly, S.; Gisselbrecht, M.; Eng-Johnsson, P.; Feifel, R.; Hervieux, P.A.; Alfaytarouni, Z.; Fink, R.F.; Díaz-Tendero, S.; Milosavljevic, A.R.; Rousseau, P.; Maclot, S. (2022). Coincidence study of core-ionized adamantane: site-sensitivity within a carbon cage? *Physical Chemistry Chemical Physics*. 24 (47): 28994-29003. DOI: 10.1039/d2cp04426a [Q2]
- 27.** Garg, M.; Martín-Jiménez, A.; Pizarra, M.; Luo, Y.; Martín, F.; Kern, K. (2022). Real-space subfemtosecond imaging of quantum electronic coherences in molecules. *Nature Photonics*. 16 (3): 196-202. DOI: 10.1038/s41566-021-00929-1 Y[Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/703393>
- 28.** Gazzeh, H.; Rouatbi, F.; Chniti, S.; Askri, M.; Knorr, M.; Strohmann, C.; Golz, C.; Lamsabhi, A.M. (2022). Chemoselective and diastereodivergent synthesis of new spirooxindolo-pyrrolizidines and pyrrolidines stemming from unsymmetrical 1,3-bis(arylidene)tetral-2-ones: a combined experimental and theoretical study. *New Journal of Chemistry*. 46 (40): 19198-19212. DOI: 10.1039/d2nj03887k [Q2]
- 29.** Gimferrer, M.; Danés, S.; Vos, E.; Yildiz, C.B.; Corral, I.; Jana, A.; Salvador, P.; Andrada, D.M. (2022). The oxidation state in low-valent beryllium and magnesium compounds. *Chemical Science*. 13 (22): 6583-6591. DOI: 10.1039/d2sc01401g Y[Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/706893>
- 30.** González-Collado, C.M.; Plésiat, E.; Decleva, P.; Palacios, A.; Martín, F. (2022). Vibrationally resolved photoelectron angular distributions of ammonia. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 24 (13): 7700-7712. DOI: 10.1039/d2cp00627h Y[Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/701146>
- 31.** Guerra, C.; Kumar, S.; Aguilar-Galindo, F.; Díaz-Tendero, S.; Lozano, A.I.; Méndes, M.; Oller, J.C.; Limão-Vieira, P.; García, G. (2022). Total Electron Detachment and Induced Cationic Fragmentation Cross Sections for Superoxide Anion (O₂⁻) Collisions with Benzene (C₆H₆) Molecules. *International Journal of Molecular Sciences*. 23 (3): 1266. DOI: 10.3390/ijms23031266 Y[Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/705336>

- 32.** Guisán-Ceinos, S.; Rivero, A.R.; Romeo-Gella, F.; Simón-Fuente, S.; Gómez-Pastor, S.; Calvo, N.; Orrego, A.H.; Guisán, J.M.; Corral, I.; Sanz-Rodríguez, F.; Ribagorda, M. (2022). Turn-on Fluorescent Biosensors for Imaging Hypoxia-like Conditions in Living Cells. *Journal of the American Chemical Society*. 144 (18): 8185-8193. DOI: 10.1021/jacs.2c01197 Y[Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/703655>
- 33.** Jorge, A.; Illescas, C.; Méndez, L. (2022). Classical and semiclassical calculations of state-selective cross sections for electron capture and excitation in Be⁴⁺⁺H(2s) collisions. *Physical Review A*. 105 (1): 12811. DOI: 10.1103/PhysRevA.105.012811 N[Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/705900>
- 34.** Kamel, E.M.; Ahmed, N.A.; El-Bassuony, A.A.; Hussein, O.E.; Alrashdi, B.; Ahmed, S.A.; Lamsabhi, A.M.; Arab, H.H.; Mahmoud, A.M. (2022). Xanthine Oxidase Inhibitory Activity of *Euphorbia peplus* L. Phenolics. *Combinatorial Chemistry & High Throughput Screening*. 25 (8): 1336-1344. DOI: 10.2174/1386207324666210609104456 N[Q3]
- 35.** Kirkpatrick, J.; McMorro, 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. (2022). Response to Comment on "Pushing the frontiers of density functionals by solving the fractional electron problem". *Science*. 377 (6606): eabq4282. DOI: 10.1126/science.abq4282 N[Q1]
- 36.** Labella, J.; Lavarda, G.; Hernández-López, L.; Aguilar-Galindo, F.; Díaz-Tendero, S.; Lobo-Checa, J.; Torres, T. (2022). Preparation, Supramolecular Organization, and On-Surface Reactivity of Enantiopure Subphthalocyanines: From Bulk to 2D-Polymerization. *Journal of the American Chemical Society*. 144 (36): 16579-16587. DOI: 10.1021/jacs.2c06377 [Q1]
- 37.** Lamsabhi, A.M.; Montero-Campillo, M.M.; Mó, O.; Yáñez, M. (2022). A Theoretical Survey of the UV-Visible Spectra of Axially and Peripherally Substituted Boron Subphthalocyanines. *Computation*. 10 (2): 14. DOI: 10.3390/computation10020014 Y[Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/706806>
- 38.** Li, N.; Jiang, K.; Rodríguez-Hernández, F.; Mao, H.; Han, S.; Fu, X.; Zhang, J.; Yang, C.; Ke, C.; Zhuang, X. (2022). Polyarylether-Based 2D Covalent-Organic Frameworks with In-Plane D-A Structures and Tunable Energy Levels for Energy Storage. *Advanced Science*. 9 (6): 2104898. DOI: 10.1002/advs.202104898 Y[Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/704726>
- 39.** Lucía-Tamudo, J.; Cárdenas, G.; Anguita-Ortiz, N.; Díaz-Tendero, S.; Nogueira, J.J. (2022). Computation of Oxidation Potentials of Solvated Nucleobases by Static and Dynamic Multilayer Approaches. *Journal of Chemical Information and Modeling*. 62 (14): 3365-3380. DOI: 10.1021/acs.jcim.2c00234 Y[Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/703589>
- 40.** Martín-Fernández, C.; Alkorta, I.; Montero-Campillo, M.M.; Elguero, J. (2022). Stand up for Electrostatics: The Disiloxane Case. *Chemphyschem*. 23 (9): e202200088. DOI: 10.1002/cphc.202200088 Y[Q2]

- 41.** Mishra, D.; Reino-González, J.; Obaid, R.; LaForge, A.C.; Díaz-Tendero, S.; Martín, F.; Berrah, N. (2022). Ultrafast molecular dynamics in ionized 1-and 2-propanol: from simple fragmentation to complex isomerization and roaming mechanisms. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 24 (1): 433-443. DOI: 10.1039/d1cp04011a N[Q2]
- 42.** Montero-Campillo, M.M.; Alkorta, I.; Mo, O.; Elguero, J.; Yáñez, M. (2022). On predicting bonding patterns of small clusters of alkaline-earth (Be, Mg) and triel (B, Al) fluorides: a balance between atomic size and electron-deficient character. *Molecular Physics*. 121: e2086935. DOI: 10.1080/00268976.2022.2086935 Y[Q3]
- 43.** Montero-Campillo, M.M.; Mo, O.; Alkorta, I.; Elguero, J.; Yáñez, M. (2022). Disrupting bonding in azoles through beryllium bonds: Unexpected coordination patterns and acidity enhancement. *Journal of Chemical Physics*. 156 (19): 194303. DOI: 10.1063/5.0089716 Y[Q1] <http://hdl.handle.net/10486/707079>
- 44.** Montero-Campillo, M.M.; Mó, O.; Yáñez, M. (2022). Malonaldehyde-like Systems: BeF₂ Clusters—A Subtle Balance between Hydrogen Bonds, Beryllium Bonds, and Resonance. *Sci*. 4 (1): 7. DOI: 10.3390/sci4010007
- 45.** Ortín-Fernández, J.; González-Vázquez, J.; Martínez-Fernández, L.; Corral, I. (2022). Molecular Identification of the Transient Species Mediating the Deactivation Dynamics of Solvated Guanosine and Deazaguanosine. *Molecules*. 27 (3): 989. DOI: 10.3390/molecules27030989 Y[Q2] <http://hdl.handle.net/10486/703779>
- 46.** Pérez-Barcia, Á.; Montero-Campillo, M.M.; Lamsabhi, A.M.; Salpin, J.Y.; Yáñez, M. (2022). Open questions on toxic heavy metals Cd, Hg and Pb binding small components of DNA and nucleobases. Are there any predictable trends? *Physical Chemistry Chemical Physics*. 24 (35): 20624-20637. DOI: 10.1039/d2cp02459d [Q2]
- 47.** Rai, S.; Bijlsma, K.I.; Rabadán, I.; Méndez, L.; Wolff, P.A.J.; Salverda, M.; Versolato, O.O.; Hoekstra, R. (2022). Charge exchange in collisions of 1-100-keV Sn³⁺ ions with H₂ and D₂. *Physical Review A*. 106 (1): 12804. DOI: 10.1103/PhysRevA.106.012804 [Q2] <http://hdl.handle.net/10486/703103>
- 48.** Romeo-Gella, F.; Arpa, E.M.; Corral, I. (2022). A molecular insight into the photophysics of barbituric acid, a candidate for canonical nucleobases' ancestor. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 24 (3): 1405-1414. DOI: 10.1039/d1cp04987a [Q2]
- 49.** Sahu, S.; Sikdar, Y.; Bag, R.; Cerezo, J.; Cerón-Carrasco, J.P.; Goswami, S. (2022). Turn on Fluorescence Sensing of Zn²⁺ Based on Fused Isoindole-Imidazole Scaffold. *Molecules*. 27 (9): 2859. DOI: 10.3390/molecules27092859 Y[Q2] <http://hdl.handle.net/10486/706767>
- 50.** Salaverri, N.; Carli, B.; Díaz-Tendero, S.; Marzo, L.; Alemán, J. (2022). Enantioselective Addition of Remote Alkyl Radicals to Double Bonds by Photocatalytic Proton-Coupled Electron Transfer (PCET) Deconstruction of Unstrained Cycloalkanols. *Organic Letters*. 24 (17): 3123-3127. DOI: 10.1021/acs.orglett.2c00662 Y[Q1]

<http://hdl.handle.net/10486/703089>

51. Schlee, M.M.; Reiff, J.; García-Müller, P.L.; Benito, R.M.; Borondo, F.; Main, J.; Hernández, R. (2022). Mean first-passage times for solvated LiCN isomerization at intermediate to high temperatures. *Journal of Chemical Physics*. 156 (3): 34103. DOI: 10.1063/5.0065090 Y[Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/706821>

52. Sopena, A.; Catoire, F.; Palacios, A.; Martín, F.; Bachau, H. (2022). Asymmetric electron angular distributions in H-2 induced by intense ultrashort soft-x-ray laser pulses. *Physical Review A*. 105 (3): 33104. DOI: 10.1103/PhysRevA.105.033104 Y[Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/702932>

53. Sun, C.; Bai, L.; Roldao, J.C.; Burgos-Caminal, A.; Borrell-Grueiro, O.; Lin, J.; Huang, W.; Gierschner, J.; Gawelda, W.; Bañares, L.; Cabanillas-González, J. (2022). Boosting the Stimulated Emission Properties of Host:Guest Polymer Blends by Inserting Chain Twists in the Host Polymer. *Advanced Functional Materials*. 32 (48): 2206723. DOI: 10.1002/adfm.202206723 [Q1]

54. Toulouse, J.; Schwinn, K.; Zapata, F.; Levitt, A.; Cancès, E.; Luppi, E. (2022). Photoionization and core resonances from range-separated time-dependent density-functional theory for open-shell states: Example of the lithium atom. *Journal of Chemical Physics*. 157 (24): 244.104,0. DOI: 10.1063/5.0134645 [Q1]

55. Vergel, A.; Montes, J.; Borondo, F. (2022). Geometrodynamic approach to conjugate points and the Maslov index. *Physical Review E*. 106 (6): 64213. DOI: 10.1103/physreve.106.064213 [Q1]

56. Vos, E.; Hoehn, S.J.; Krul, S.E.; Crespo-Hernández, C.E.; González-Vázquez, J.; Corral, I. (2022). Disclosing the Role of C4-Oxo Substitution in the Photochemistry of DNA and RNA Pyrimidine Monomers: Formation of Photoproducts from the Vibrationally Excited Ground State. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 13 (8): 2000-2006. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.2c00052 Y[Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/703014>

57. Xu, Q.; Aranda, D.; Jouybari, M.Y.; Liu, Y.; Wang, M.; Cerezo, J.; Improta, R.; Santoro, F. (2022). Nonadiabatic Vibrational Resonance Raman Spectra from Quantum Dynamics Propagations with LVC Models. *Journal of Physical Chemistry A*. 126 (41): 7468-7479. DOI: 10.1021/acs.jpca.2c05271 [Q2]

OTRAS PUBLICACIONES

Capítulos de Libro

1. Barandiarán, Z.; Joos, J.; Seijo, L. (2022). Active Centers of Luminescent Materials. Springer Series in Materials Science. DOI: 10.1007/978-3-030-94984-6_10

2. Barandiarán, Z.; Joos, J.; Seijo, L. (2022). Calculations of Local Properties of Luminescent Materials. Springer Series in Materials Science. DOI: 10.1007/978-3-030-94984-6_3

3. Barandiarán, Z.; Joos, J.; Seijo, L. (2022). Charge Transfer States. Springer Series in Materials Science. DOI: 10.1007/978-3-030-94984-6_7
4. Barandiarán, Z.; Joos, J.; Seijo, L. (2022). Configuration Coordinate Energy Diagrams of Optically Active Sites in BaF₂. Springer Series in Materials Science. DOI: 10.1007/978-3-030-94984-6_5
5. Barandiarán, Z.; Joos, J.; Seijo, L. (2022). Electron Transfer and Luminescence. Springer Series in Materials Science. DOI: 10.1007/978-3-030-94984-6_11
6. Barandiarán, Z.; Joos, J.; Seijo, L. (2022). Feasibility and Accuracy: Criteria and Choices. Springer Series in Materials Science. DOI: 10.1007/978-3-030-94984-6_2
7. Barandiarán, Z.; Joos, J.; Seijo, L. (2022). Fundamental Spectroscopic Studies. Springer Series in Materials Science. DOI: 10.1007/978-3-030-94984-6_9
8. Barandiarán, Z.; Joos, J.; Seijo, L. (2022). Impurity States. Springer Series in Materials Science. DOI: 10.1007/978-3-030-94984-6_6
9. Barandiarán, Z.; Joos, J.; Seijo, L. (2022). Quantum Chemistry Methods. Springer Series in Materials Science. DOI: 10.1007/978-3-030-94984-6_1
10. Barandiarán, Z.; Joos, J.; Seijo, L. (2022). Solid-State Lighting Phosphors. Springer Series in Materials Science. DOI: 10.1007/978-3-030-94984-6_8
11. Barandiarán, Z.; Joos, J.; Seijo, L. (2022). Symmetry Handling. Springer Series in Materials Science. DOI: 10.1007/978-3-030-94984-6_4

Conferencia Publicada

1. Borrego-Varillas, R.; Vismarra, F.; Wu, Y.; Mocci, D.; Holzmeier, F.; Reduzzi, M.; Recio, P.; Cachón, J.; González-Vázquez, J.; Palacios, A.; Santos, J.; Lucchini, M.; Martín, N.; Martín, F.; Bañares, L.; Nisoli, M. (2022). Ultrafast dynamics of push-pull nitroanilines tracked with few-femtosecond XUV-NIR spectroscopy. Optics InfoBase Conference Papers. DOI: 10.1364/UP.2022.M2A.6

Corrección

1. Sopena, A.; Palacios, A.; Catoire, F.; Bachau, H.; Martín, F. (2022). Publisher Correction: Angle-dependent interferences in electron emission accompanying stimulated Compton scattering from molecules (Communications Physics, (2021), 4, 1, (253), 10.1038/s42005-021-00749-3). Communications Physics. DOI: 10.1038/s42005-021-00784-0

4. TESIS DOCTORALES

En 2022, se han defendido 7 tesis doctorales en el departamento

Plan	Tesis defendidas
Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional	7
Total	7

Relación de Tesis doctorales - Ordenación alfabética por título

1. Attosecond spectroscopy in the x-ray regime in complex systems

Autoría: Cistaro , Giovanni Consalvo

Fecha de lectura: 26-10-2022

Dirigida por: Picón Álvarez, Antonio; Martín García, Fernando

<http://hdl.handle.net/10486/705177>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

2. Computational approaches in clathrate- hydrates: from finite-size molecular clusters to extended lattice systems

Autoría: Cabrera Ramírez, Luz Adriana

Fecha de lectura: 17-11-2022

Dirigida por: Prosmi, Aristeo

Tutorizada por: Alcamí Pertejo, Manuel

<http://hdl.handle.net/10486/706256>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

3. Development of scientific software and research in Aqueous Molecular Systems with environmental and energy impact

Autoría: Rodríguez Segundo, Raúl

Fecha de lectura: 25-05-2022

Dirigida por: Prosmi, Aristeo

Tutorizada por: Alcamí Pertejo, Manuel

<http://hdl.handle.net/10486/703672>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

4. Improvement of methods for the structural characterisation of drug metabolites based on collisional cross sections

Autoría: Ivashchenko , Dmytro

Fecha de lectura: 26-07-2022

Dirigida por: Lopes de Magalhães, Alexandre; Corral Pérez, Inés

<http://hdl.handle.net/10486/704097>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

5. In silico tools used for the prediction of the environmental risk of pesticides under the EU legislation

Autoría: Villaverde Mella, Juan José

Fecha de lectura: 7-06-2022

Dirigida por: Sandín España, Pilar; Lamsabhi, Al Mokhtar

Desarrollada en: Instituto Nacional de Investigación y Tecnología Agraria y Alimentaria (INIA)

<http://hdl.handle.net/10486/703969>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

6. Modeling the Interactions of Anticancer Compounds with DNA and Lipid Membranes

Autoría: Cárdenas , Gustavo Adolfo

Fecha de lectura: 15-07-2022

Dirigida por: Nogueira Perez, Juan José

<http://hdl.handle.net/10486/704086>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

7. The impact of oxo functionalization in the photophysics and photochemistry of nucleobases: implications in prebiotic chemistry and the current composition of nucleic acids

Autoría: Vos Esteban, Eva

Fecha de lectura: 30-09-2022

Dirigida por: González Vázquez, Jesús; Corral Perez, Inés

<http://hdl.handle.net/10486/705034>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

5.PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y CONTRATOS CON EMPRESAS

El Departamento para 2022 ha tenido vigentes 20 proyectos de investigación.

Relación de Proyectos de Investigación vigentes en 2022

1. Attosecond Chemistry- AttoChem

Referencia: CA18222

Vigencia: 2019 - 2023

Investigadores: Martín García, Fernando (IP)

Entidades participantes: Centro de Investigación en Física de la Materia Condensada (IFIMAC); Departamento de Química.

Financiador: Comisión Europea

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

Referencia: CRP F43023

Vigencia: 2017 - 2022

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

Entidades participantes: Departamento de Química.

Financiador: Organismo Internacional de la Energía Atómica (OIEA)

3. 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 Física de la Materia Condensada; Departamento de Química; Centro propio de Investigación Avanzada en Ciencias Químicas (IAdChem); Departamento de Química Física Aplicada.

Financiador: Agencia Estatal de Investigación

4. Dinámica electrónica y técnicas ultrarrápidas

Referencia: PID2021-126560NB-I00

Vigencia: 2021 - 2025

Investigadores: Oberli, Solene; Picón Álvarez, Antonio (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química.

Financiador: Agencia Estatal de Investigación

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

Referencia: PGC2018-094644-B-C21

Vigencia: 2019 - 2022

Investigadores: Bruña Fernández, Sonia; Hernández Vizcaíno, María Elisa; Sanz Mercado, Pablo; Montero Campillo, M^a de la Merced; Mo Romero, Otilia; Corral Pérez, Inés(IP); Yáñez Montero, Manuel; Cuadrado Sánchez, Isabel (IP); González Vadillo, Ana María

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

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

6. EMJMD Theoretical Chemistry and Computational Modelling

Referencia: 2019-1539/001-001

Vigencia: 2019 - 2025

Investigadores: Alcamí Pertejo, Manuel (IP)

Entidades participantes: Centro propio de Investigación Avanzada en Ciencias Químicas (IAdChem); Departamento de Química.

Financiador: Agencia Ejecutiva de Educación Audiovisual y Cultura

7. Espectroscopía ultrarrápida de rayos-x para la transferencia de carga y energía. Dotación Adicional Captación de Talentos Comunidad de Madrid

Referencia: 2017-T1/IND-5432

Vigencia: 2018 - 2022

Investigadores: Picón Álvarez, Antonio

Entidades participantes: Departamento de Química.

Financiador: Comunidad de Madrid

8. Estudio de procesos de transferencia de carga en moléculas

Referencia:

Vigencia: 2022 - 2024

Investigadores: Palacios Cañas, Alicia; Martín García, Fernando (IP)

Entidades participantes: Centro propio de Investigación Avanzada en Ciencias Químicas (IAdChem); Centro de Investigación en Física de la Materia Condensada (IFIMAC); Departamento de Química.

Financiador: Universidad Autónoma de Madrid

9. 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: González Collado, Celso Manuel; Suñer Rubio, Adrián Jesús; Ambrosio, Marcelo José; Fernández Milán, Pedro; Argenti, Luca; Omiste Romero, Juan José; Sopena Moros, Arturo; Martín Llorente, Beatriz; Plesiat, Etienne; Palacios Cañas, Alicia (IP); Borrás de LI

Entidades participantes: Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada; Departamento de Química; Centro propio de Investigación Avanzada en Ciencias Químicas (IAdChem); Centro de Investigación en Física de la Materia Condensada (IFIMAC).

Financiador: Agencia Estatal de Investigación

10. Flujo de carga y energía en procesos químicos complejos

Referencia: PID2019-110091GB-I00

Vigencia: 2020 - 2023

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

Entidades participantes: Departamento de Química. Centro propio de Investigación Avanzada en Ciencias Químicas (IAdChem); Centro de Investigación en Física de la Materia Condensada (IFIMAC); Departamento de Química Física Aplicada.

Financiador: Agencia Estatal de Investigación

11. Mejora de eficiencia de módulos fotovoltaicos a fabricar en España integrando láminas conversoras basadas en cobre (MEFFEC)

Referencia: TED2021-131132B-C22

Vigencia: 2022 - 2024

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

Entidades participantes: Centro propio de Investigación Avanzada en Ciencias Químicas (IAdChem); Departamento de Química; Departamento de Química Inorgánica.

Financiador: Agencia Estatal de Investigación

12. Métodos teóricos en ciencia de attosegundos

Referencia: UAM/128

Vigencia: 2019 - 2022

Investigadores: Martín García, Fernando (IP)

Entidades participantes: Centro de Investigación en Física de la Materia Condensada (IFIMAC); Departamento de Química.

Financiador: Universidad Autónoma de Madrid

13. 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: Centro propio de Investigación Avanzada en Ciencias Químicas (IAdChem); Departamento de Química; Departamento de Química Inorgánica.

Financiador: Agencia Estatal de Investigación

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

Referencia: FUAM - Prog. 465022

Vigencia: 2020 - 2022

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

Entidades participantes: Departamento de Química; Centro propio de Investigación Avanzada en Ciencias Químicas (IAdChem); Departamento de Química Física Aplicada.

Financiador: Adama Makhteshim Ltd; Adama AGAN Ltd

15. 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.

Financiador: Agencia Estatal de Investigación

16. Simulación de optoelectrónica molecular resuelta en el tiempo con el código XCHEM

Referencia: PDC2021-121073-I00

Vigencia: 2021 - 2023

Investigadores: Martín Llorente, Beatriz; González Vázquez, Jesús; Palacios Cañas, Alicia (IP); Martín García, Fernando (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química; Centro propio de Investigación Avanzada en Ciencias Químicas (IAdChem); Centro de Investigación en Física de la Materia Condensada (IFIMAC).

Financiador: Agencia Estatal de Investigación

17. Síntesis y modelización de materiales moleculares orgánicos y metalocenos en el estado fundamental y excitado

Referencia: PID2021-125207NB-C31

Vigencia: 2022 - 2025

Investigadores: Romeo Gella, Fernando; González Vadillo, Ana María; Corral Pérez, Inés (IP); Cuadrado Sánchez, Isabel (IP); Montero Campillo, Maria Merced; Yáñez Montero, Manuel; MÓ Romero, Otilia; Bruña Fernández; Sonia; Sanz Mercado, Pablo

Entidades participantes: Centro propio de Investigación Avanzada en Ciencias Químicas (IAdChem); Departamento de Química; Departamento de Química Inorgánica.

Financiador: Agencia Estatal de Investigación

18. Sistema experto de predicción del impacto ambiental de pesticidas

Referencia: PDC2021-121203-I00

Vigencia: 2021 - 2023

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

Entidades participantes: Departamento de Química; Centro propio de Investigación Avanzada en Ciencias Químicas (IAdChem).

Financiador: Agencia Estatal de Investigación

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: Centro propio de Investigación Avanzada en Ciencias Químicas (IAdChem); Departamento de Química.

Financiador: Comunidad de Madrid

20. The ultimate Time scale in Organic Molecular opto-electronics, the attosecond

Referencia: GA 951224

Vigencia: 2021 - 2027

Investigadores: Martín García, Fernando (IP)

Entidades participantes: Centro de Investigación en Física de la Materia Condensada (IFIMAC); Departamento de Química.

Financiador: Comisión Europea

6. AYUDAS INDIVIDUALES

Tipo de ayudas	Nº de ayudas
Dotación adicional captación de talentos Comunidad de Madrid	1
Dotación Adicional FPI	1
Dotación Adicional Juan de la Cierva	2
Excelencia profesorado universitario Profesor Contratado Doctor	1
Total general	5

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 Sáez, 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 Cantó, 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.

Participantes: Borrás de Llano, Josep 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: 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 fulerenos y PAH. Autoensamblado de moléculas en superficies. Estructura y reactividad de moléculas de interés en astroquímica. Estudio teórico del impacto medioambiental de plaguicidas

Participantes: Aguilar-Galindo Rodríguez, Fernando; Alcamí Pertejo, Manuel (coord.); Bargaza Guzmán, Ransel; D'Ángelo, Giovanna; Díaz-Tendero Victoria, Sergio; Luna Fernández, Alberto; Martín Somer, Ana; Plá 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: Alkorta Osoro, Ibon; Corral Pérez, Inés; Lamsabhi, Al Mokhtar; Mó Romero, Otilia; Montero Campillo, M. de la Merced; Sanz Mercado, Pablo; 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 2017-2022	SEXENIOS DE INVESTIGACIÓN 2022
QUI	14	4
FACULTAD	492	73

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](#)

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

[BORONDO RODRIGUEZ, FLORENTINO](#)

[MARTIN GARCIA, FERNANDO](#)

[DIAZ-TENDERO VICTORIA, SERGIO](#)

[MORI SANCHEZ, PAULA](#)

[GONZALEZ VAZQUEZ, JESUS](#)

[PALACIOS CAÑAS, ALICIA](#)

[ILLESCAS ROJAS, CLARA MATILDE](#)

[RABADAN ROMERO, ISMANUEL](#)

[LAMSABHI, AL MOKHTAR](#)

[SEIJO LOCHE, LUIS IGNACIO](#)

12.2. PDI NO PERMANENTE

12.2.1 PDI EMÉRITO

[MO ROMERO, OTILIA](#)

[YAÑEZ MONTERO, MANUEL](#)

12.2.2 PDI DOCTOR NO PERMANENTE

AGUILAR-GALINDO RODRIGUEZ,
FERNANDO
CORRAL PEREZ, INES

MIGUEL ARIAS, SELMA
MONTERO CAMPILLO, M^a. MERCED

12.2.3. PERSONAL INVESTIGADOR EN FORMACIÓN

AMBROSIO, MARCELO JOSE

CORRALES CASTELLANOS, MARIA EUGENIA

GONZALEZ COLLADO, CELSO MANUEL

MALAKHOV , MIKHAIL

MANSOURI, MASOUD

MATEO DE LA FUENTE, HENAR

NORIEGA PEREZ, JUAN JOSE

ORTIN FERNANDEZ, FRANCISCO JAVIER

PAOLONI, LORENZO

PICON ALVAREZ, ANTONIO

RAUER, CLEMENS

VALENTIN RODRIGUEZ, MONICA ANGELS

ZAPATA ABELLAN, FELIPE

