

MEMORIA DE INVESTIGACIÓN 2024

QUÍMICA



**MEMORIA DE INVESTIGACIÓN
ELABORADA POR LA
BIBLIOTECA DE CIENCIAS
“FERNANDO GONZÁLEZ BERNÁLDEZ”**



THIS WORK IS LICENSED UNDER A CREATIVE COMMONS ATTRIBUTION 4.0 INTERNATIONAL LICENSE.

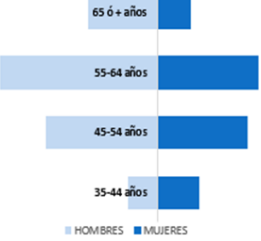
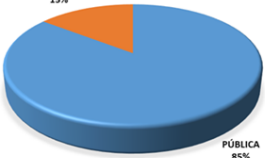
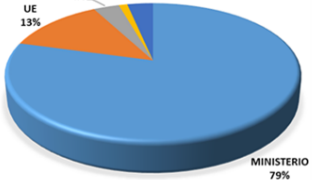
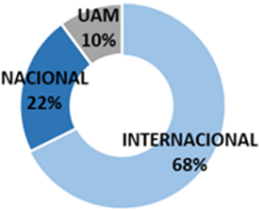
MEMORIA DE INVESTIGACIÓN DEL DEPARTAMENTO DE QUÍMICA 2024

El presente documento tiene como finalidad compilar la actividad investigadora, desarrollada durante el año 2024 por el personal docente e investigador de este Departamento.

Esta memoria recoge de manera sistemática las publicaciones científicas, las tesis doctorales dirigidas y 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 el Departamento tiene representación.

La elaboración de este documento se ha basado en los perfiles individuales del PDI disponibles en el Portal de Producción Científica de la UAM. La Biblioteca actualiza y completa dichos perfiles individuales una vez verificada esta información.

Expresamos nuestro más sincero agradecimiento por sus valiosas aportaciones, que han permitido consolidar esta memoria, a los integrantes del departamento, coordinadores de los grupos de investigación y al Decanato de la Facultad.

INVESTIGADORES	491 PDI PERMANENTE	Edad y Género del PDI 	127 CATEDRÁTICOS 253 TITULARES 111 CONTR. DOCT. Y LABORALES PERMANENTES
	619 PDI NO PERMANENTE	227 PDI Doctor no permanente 334 Personal Investigador en Formación 12 Profesores honorarios 46 Profesores Eméritos	
	97 NUEVOS SEXENIOS DE INVESTIGACIÓN CONCEDIDOS EN 2024		
	FINANCIACIÓN 	529 PROYECTOS VIGENTES	ENTIDADES FINANCIADORAS 
	27 PATENTES	8 EMPRESAS BASADAS EN EL CONOCIMIENTO ACTIVAS	
TESIS DOCTORALES	228 TESIS DOCTORALES	FACULTAD DE CIENCIAS 2024	
PUBLICACIONES	COLABORACIÓN EN LA AUTORIA DE ARTÍCULOS 	1.556 PUBLICACIONES	 64% ARTÍCULOS Q1 (JCR)
		1.400 ARTÍCULOS	

INVESTIGADORES	18 PDI PERMANENTE	Edad y género del PDI 65 ó + años 55-64 años 45-54 años 35-44 años HOMBRES MUJERES	5 CATEDRÁTICOS 7 TITULARES 6 CONTR. DOCTORES Y LABORAL PERM.
	24 PDI NO PERMANENTE	4 PDI Doctor no permanente 18 Personal Investigador en Formación 2 Profesores Eméritos	
	6 NUEVOS SEXENIOS DE INVESTIGACIÓN CONCEDIDOS EN 2024		
PROYECTOS	25 PROYECTOS I+D+I VIGENTES		
TESIS DOCTORALES	6 TESIS DOCTORALES	DEPARTAMENTO DE QUÍMICA 2024	
PUBLICACIONES	COLABORACIÓN EN LA AUTORIA DE ARTÍCULOS NACIONAL22% INTERNACIONAL69% UAM9%	94 PUBLICACIONES 91 ARTÍCULOS	53% ARTÍCULOS Q1 (JCR)



METODOLOGÍA



DESTACADOS: TABLAS Y GRÁFICOS



**PUBLICACIONES: ARTÍCULOS
OTRAS PUBLICACIONES**



TESIS DOCTORALES



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y CONTRATOS CON EMPRESAS



AYUDAS INDIVIDUALES



GRUPOS DE INVESTIGACIÓN



PATENTES



EMPRESAS BASADAS EN EL CONOCIMIENTO (EBC) ACTIVAS



SEXENIOS



PREMIOS



PDI DE LA FACULTAD Y ENLACE AL PPEC



MEMORIA EN FICHAS

1. TABLAS

1.1. Tabla de Publicaciones

AÑO	Total publicaciones	Artículos	Q1	% Q1	Publicaciones/PDI Permanente
Departamento de Química					
2024	94	91	48	52,75%	5,22
2023	86	79	51	64,56%	6,62
2022	70	57	29	50,88%	5,83
2021	76	72	43	59,72%	5,85
2020	89	73	46	63,01%	5,93
FACULTAD DE CIENCIAS					
2024	1.556	1.400	900	64,29%	3,17
2023	1.428	1.232	810	65,75%	2,96
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

1.2. Tabla de Proyectos de Investigación y Contratos con empresas

DEPARTAMENTO	VIGENTES	TIPO DE FINANCIACION		ENTIDADES FINANCIADORAS				
		PÚBLICA	PRIVADA	MINISTERIO	UE	CAM	UAM	OTRAS
QUI	25	23	2	15	6	2	0	0
FACULTAD	529	450	79	356	58	15	5	15

1.3. Tabla de Tesis Doctorales

DEPARTAMENTO	2024				
	TESIS DEFENDIDAS			DOCTORANDOS	
	Total	Dirigidas	Tutorizadas	HOMBRES	MUJERES
QUI	6	4	2	5	1
FACULTAD	228	89	139	120	108

2. METODOLOGÍA Y FUENTES

La Biblioteca de Ciencias elabora la Memoria de Investigación de la Facultad de Ciencias y sus departamentos a partir de la recopilación y análisis de datos provenientes de diversas fuentes, que se relacionan en el apartado Fuentes. El [Portal de Producción Científica](#) (PPC), en el que está incluido todo el personal docente e investigador permanente y la mayoría del PDI no permanente, es nuestro principal proveedor de datos.

Una vez recopilada la información, llevamos a cabo un proceso de verificación y depuración de los datos, con la que generamos una primera versión de la memoria. Esta versión se envió a los directores de los 17 departamentos para su revisión en mayo de 2025. 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 las modificaciones recogidas en esta versión final se incorporan al PPC, de modo que se mejora la calidad y actualización de 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.

La biblioteca deposita de forma sistemática en el repositorio institucional [Biblos-e Archivo](#) los artículos de nuestro PDI firmados como UAM, atendiendo a los derechos de propiedad intelectual vigentes. El dato de acceso abierto en repositorio institucional corresponde a 27-07-2025, aunque la biblioteca continuará trabajando en su incorporación.

Al comienzo, se presentan fichas resumen tanto de la Facultad como del departamento, que recogen los principales logros y cifras más relevantes de esta 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.
 - Publicaciones de investigadores no incluidos en el PPC, a solicitud de algunos departamentos.
 - 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 está en acceso abierto.
- Para los indicios de calidad.
 - Se utilizan los indicadores de factor de impacto de las publicaciones JCR (WoS) del año 2024, la versión cerrada a septiembre de 2025.
- 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, Profesor Contratado Doctor y Personal Laboral Permanente.
 - 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 Ayudante Doctor.
 - Ramón y Cajal.

- Otros Contratos Postdoctorales: Atracción de Talento modalidades CAM 1 y 2, postdoc CAM, Juan de la Cierva (incorporación/formación), beca César Nombela.
 - Personal Investigador en Formación (PIF):
 - 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.
 - Incorporación, a solicitud de los departamentos, de PIF no incluidos en el PPC.
 - En caso de investigadores con múltiples categorías laborales durante el año, se ha considerado aquella en la que hayan permanecido más tiempo.
- Para los Proyectos de investigación y contratos con empresas:
 - Portal de Producción Científica de la UAM, que recoge la información facilitada por el Servicio de Investigación.
 - Boletines oficiales: BOE, BOCAM.
 - Información complementaria revisada por los departamentos.
 - Los contratos con empresas son facilitados por los departamentos.
- Para las Tesis Doctorales:
 - Escuela de Doctorado.
 - Repositorio institucional.
 - 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 94 publicaciones, de las que 91 son artículos científicos. De éstos, un total de 48 se han publicado en revistas del primer cuartil, que corresponde al 53% de los artículos publicados. El 6% de las publicaciones de la Facultad de Ciencias han sido firmadas por PDI del Departamento. De estas publicaciones están depositadas en el Repositorio Institucional el 73%.

Dónde publica el Departamento

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

TÍTULO DE REVISTAS	Nº ART.	CUARTILES
NATURE COMMUNICATIONS	6	Q1
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS	5	Q2
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A	4	Q2

Relación de Publicaciones de la Facultad, ordenadas alfabéticamente por autor

Leyenda de cuartiles de JCR 2023 [Q1] [Q2] [Q3] [Q4]

Artículos

1. Aguilar-Galindo, F.; Fajardo-Rodríguez, S.; Poyato, JML.; Pastor, E.; Avilés-Moreno, JR.; Ocón, P. (2024). Outstanding inhibition of H₂O₂ generation in doubly doped graphene: The synergy of two heteroatoms opens a new chemical path. Carbon. 216: 118499. DOI: 10.1016/j.carbon.2023.118499 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/709395>

2. Aguilar-Galindo, F.; Nguyen, V.T.T.; Singh, R.; Domaracka, A.; Huber, B.A.; Díaz-Tendero, S.; Rousseau, P.; Maclot, S. (2024). Unexpected and delayed fragmentation dynamics of the organometallic ferrocene induced by ion-collision. Physical Chemistry Chemical Physics. 26 (9): 7638-7646. DOI: 10.1039/d3cp05430f [Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/716884>

3. Alemán, J.; Humbrías-Martín, J.; del Río-Rodríguez, R.; Aguilar-Galindo, F.; Díaz-Tendero, S.; Fernández-Salas, J.A. (2024). Bicarbonate-binding catalysis for the enantioselective desymmetrization of keto sulfonium salts. Nature Communications. 15 (1): 4727. DOI: 10.1038/s41467-024-48832-x [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/717105>

4. Alexander, O.; ...; Rego, L.; Gutiérrez, A.M.; Cárdenes, G.A.; Nogueira, J. J. (2024). Attosecond impulsive stimulated X-ray Raman scattering in liquid water. Science Advances. 10 (39): eadp0841. DOI: 10.1126/sciadv.adp0841 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/716838>

5. Alqhtani, H.A; Othman, S.I; Alkhayl, F.F.A.; Altoom, N.G.; Lamsabhi, A.M.; Kamel, E.M. (2024). Unraveling the mechanism of carbonic anhydrase IX inhibition by alkaloids from Ruta chalepensis: A synergistic analysis of in vitro and in silico data. Biochemical and Biophysical Research Communications. 733: 150685. DOI: 10.1016/j.bbrc.2024.150685 [Q3]

- 6.** Alruhaimi, R.S.; Mahmoud, A.M.; Alnasserm, S.M.; Alotaibi, M.F.; Elbagory, I.; El-Bassuony, A.A.; Lamsabhi, A.M.; Kamel, E.M. (2024). Integrating computational modeling and experimental validation to unveil tyrosinase inhibition mechanisms of flavonoids from *alhagi graecorum*. *ACS Omega*. 9 (47): 47167-47179. DOI: 10.1021/acsomega.4c07624 [Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/719054>
- 7.** Alruhaimi, R.S.; Mahmoud, A.M.; Elbagory, I.; Ahmeda, A.F.; El-Bassuony, A.A.; Kamel, E.M.; Lamsabhi, A. (2024). Unveiling the tyrosinase inhibitory potential of phenolics from *Centaureum spicatum*: Bridging in silico and in vitro perspectives. *Bioorganic Chemistry*. 147: 107397. DOI: 10.1016/j.bioorg.2024.107397 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/713836>
- 8.** Alruhaimi, Reem S.; Kamel, Emadeldin M.; Alnasser, Sulaiman M.; Alzoghaibi, Mohammed A.; Lamsabhi, Al Mokhtar; Mahmoud, Ayman M. (2024). Mechanistic insights into carbonic anhydrase IX inhibition by coumarins from *Calendula officinalis*: in vitro and in silico approaches. *RSC Advances*. 14 (45): 33602-33618. DOI: 10.1039/d4ra05984k [Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/718422>
- 9.** Alwaili, M.A.; Aba Alkhayl, F.F.; Rudayni, H.A.; Allam, A.A.; Altoom, N.G.; Lamsabhi, A.M.; Kamel, E.M. (2024). Unraveling molecular mechanisms of β -glucuronidase inhibition by flavonoids from *Centaurea scoparia*: integrated in silico and in vitro insights. *New Journal of Chemistry*. 48 (32): 14236-14252. DOI: 10.1039/d4nj02393e [Q3]
- 10.** Antonowicz, J.; ...; Gawelda, W. (2024). Structural pathways for ultrafast melting of optically excited thin polycrystalline Palladium films. *Acta Materialia*. 276: 120043. DOI: 10.1016/j.actamat.2024.120043 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/717215>
- 11.** Arteaga, K.; Feist, J.; Jelovina, D.; Martín, F.; Palacios, A. (2024). Strong electron-electron-nuclei correlations in two-photon double ionization of H₂. *Physical Review Letters*. 133 (12): 123201. DOI: 10.1103/PhysRevLett.133.123201 [Q1]
- 12.** Ayani, C.G.; Pisarra, M.; Ibarburu, I.M; Rebanal, C.; Garnica, M.; Calleja, F.; Martín, F.; de Parga, A.L.V. (2024). Electron delocalization in a 2D Mott insulator. *Nature Communications*. 15 (1): 10272. DOI: 10.1038/s41467-024-54747-4 [Q1]
- 13.** Ayani, CG.; Pisarra, M.; Ibarburu, IM; Garnica, M.; Miranda, R.; Calleja, F.; Martín, F.; Vázquez de Parga, AL . (2024). Probing the phase transition to a coherent 2D Kondo Lattice. *Small*. 20 (8): e2303275. DOI: 10.1002/sml.202303275 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/709197>
- 14.** Barrabés, E.; Borondo, F.; Fontich, E.; Martín, P.; Ollé, M. (2024). A numerical study of the scattering in the He-Cu model with a Morse potential: Parabolic manifolds and exponentially small phenomena. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 139: 108260. DOI: 10.1016/j.cnsns.2024.108260 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/717943>

- 15.** Barreiro-Lage, D.; Mattioli, G.; Nicolafrancesco, C.; Rousseau, P.; Milosavljevic, A.R.; Díaz-Tendero, S. (2024). Inner-shell photoelectron spectroscopy unveils the interplay between hydrogen bonds and π - π stacking in clusters of biomolecules in the gas phase: hypoxanthine clusters as a case study. *Journal of Physics B-Atomic Molecular and Optical Physics*. 57 (2): 025201. DOI: 10.1088/1361-6455/ad1d36 [Q3]
- 16.** Barzaga, R.; Díaz-Tendero, S.; Díaz, J.A.; Cedillo, M.I; Méndez-González, Y.; Esqueda-Barrón, Y.; Farias, M.H.; Hernández, M.P. (2024). Dehydrogenation, polymerization and self-assembly in the inhibition of copper surfaces by an ultrathin imidazole film. *Corrosion Science*. 235: 112168. DOI: 10.1016/j.corsci.2024.112168 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/716467>
- 17.** Bijlsma, K.; Oltra, L.; de Wit, E.; Assink, L.; Rabadán, I.; Méndez, L.; Hoekstra, R. (2024). Electron capture from molecular hydrogen by metastable Sn^{2+*} ions. *Atoms*. 12 (2): 9. DOI: 10.3390/atoms12020009 [Q3]
<http://hdl.handle.net/10486/718609>
- 18.** Boehmke Amoruso, A.; Boto, R.A.; Elliot, E.; de Nijs, B.; Esteban, R.; Foldes, T.; Aguilar-Galindo, F.; Rosta, E.; Aizpurua, J.; Baumberg, J.J. (2024). Uncovering low-frequency vibrations in surface-enhanced Raman of organic molecules. *Nature Communications*. 15 (1): 6733. DOI: 10.1038/s41467-024-50823-x [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/717107>
- 19.** Bordin, N.; Scholes, H.; Rauer, C.; Roca-Martínez, J.; Sillitoe, I.; Orengo, C. (2024). Clustering protein functional families at large scale with hierarchical approaches. *Protein Science*. 33 (9): e5140. DOI: 10.1002/pro.5140 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/716931>
- 20.** Borràs, V.J.; Fernández-Milán, P.; Argenti, L.; González-Vázquez, J.; Martín, F. (2024). Photoionization cross sections and photoelectron angular distributions of molecules with XCHEM-2.0. *Computer Physics Communications*. 296: 109033. DOI: 10.1016/j.cpc.2023.109033 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/709396>
- 21.** Casares, R.; Rodríguez-González, S.; Martínez-Pinel, A.; Márquez, I.R.; González, M.T.; Díaz, C.; Martín, F.; Cuerva, J.M.; Leary, E.; Millán, A. (2024). Single-molecule conductance of neutral closed-shell and open-shell diradical indenofluorenes. *Journal of the American Chemical Society*. 146 (43): 29977-29986. DOI: 10.1021/jacs.4c13551 [Q1]
- 22.** Cattaneo, L.; Omiste, J.J.; Vos, J.; González-Vázquez, J.; Decleva, P.; Keller, U.; Palacios, A.; Martín, F. (2024). Orientation-resolved attosecond photoionization delays in the N_2O molecule. *Physical Review Research*. 6 (3): 033342. DOI: 10.1103/PhysRevResearch.6.033342 [Q1]
- 23.** Cerezo, J.; Gierschner, J.; Santoro, F.; Prampolini, G. (2024). Explicit modelling of spectral bandshapes by a mixed quantum-classical approach: solvent order and temperature effects in the optical spectra of distyrylbenzene. *ChemPhysChem*. 25 (16): e202400307. DOI: 10.1002/cphc.202400307 [Q3]

<http://hdl.handle.net/10486/714505>

24. Cigrang, LLE.; Green, JA.; Gómez, S.; Cerezo, J.; Improta, R.; Prampolini, G.; Santoro, F.; Worth, GA. (2024). Non-adiabatic direct quantum dynamics using force fields: Toward solvation. *Journal of Chemical Physics*. 160 (17): 174120. DOI: 10.1063/5.0204911 [Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/716591>

25. Cobos-Escudero, M.; Pla, P.; Cervantes-Díaz, A.; Alonso-Prados, JL.; Sandín-España, P.; Alcamí, M.; Lamsabhi, AM. (2024). Profoxydim in focus: A structural examination of herbicide behavior in gas and aqueous phases. *Molecules*. 29 (18): 4371. DOI: 10.3390/molecules29184371 [Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/718298>

26. Colaizzi, L.; Ryabchuk, S.; Mansson, E.P.; Saraswathula, K.; Wanie, V.; Trabattoni, A.; Gonzalez-Vazquez, J.; Martin, F.; Calegari, F. (2024). Few-femtosecond time-resolved study of the UV-induced dissociative dynamics of iodomethane. *Nature Communications*. 15 (1): 9196. DOI: 10.1038/s41467-024-53183-8 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/718336>

27. Dellai, A.; Naim, C.; Cerezo, J.; Prampolini, G.; Castet, F. (2024). Dynamic effects on the nonlinear optical properties of donor acceptor stenoise adducts: insights from combined MD + QM simulations. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 26 (18): 13639-13654. DOI: 10.1039/d4cp00310a [Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/716882>

28. Domingo, L.; Borondo, F.; Scialchi, G.; Roncaglia, AJ.; Carlo, GG.; Wisniacki, DA. (2024). Quantum reservoir complexity by the Krylov evolution approach. *Physical Review A: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 110 (2): 22446. DOI: 10.1103/PhysRevA.110.022446 [Q2]

29. Domingo, L.; Borondo, J.; Borondo, F. (2024). Using reservoir computing to construct scarred wave functions. *Physical Review E*. 109 (4): 044214. DOI: 10.1103/PhysRevE.109.044214 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/716608>

30. Domingo, L.; Grande, M.; Borondo, F.; Borondo, J. (2024). Quantifying the uncertainty of reservoir computing: Confidence intervals for time-series forecasting. *Mathematics*. 12 (19): 3078. DOI: 10.3390/math12193078 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/718126>

31. Dudek, M.; López-Pacios, L.; Sabouri, N.; Nogueira, J.J.; Martínez-Fernández, L.; Deiana, M. (2024). Harnessing light for G-Quadruplex modulation: dual isomeric effects of an Ortho-Fluoroazobenzene derivative. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 15 (38): 9757-9765. DOI: 10.1021/acs.jpclett.4c02285 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/717927>

32. Enríquez-Rodríguez, CJ.; Casadevall, C.; Faner, R.; Pascual-Guardia, S.; Castro-Acosta, A.; López-Campos, JL.; Peces-Barba, G.; Seijo, L.; Caguana-Velez, OA.; Monso, E.; Rodríguez-Chiaradia, D.; Barreiro, E.; Cosío, BG.; Agustí, A.; Gea, J. (2024). A pilot study on

proteomic predictors of mortality in stable COPD. *Cells*. 13 (16): 1351. DOI: 10.3390/cells13161351 [Q2]

<http://hdl.handle.net/10486/716711>

33. Fainozzi, D.; ...; Gawelda, W.;... (2024). Protocols for x-ray transient grating pump/optical probe experiments at x-ray free electron lasers. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 57 (18): 185403. DOI: 10.1088/1361-6455/ad717f [Q3]

34. Fallaque, J.G.; Rodríguez-González, S.; Díaz, C.; Martín, F. (2024). Tailoring single-molecule conductance with structured graphene electrodes. *Applied Surface Science*. 646: 158943. DOI: 10.1016/j.apsusc.2023.158943 [Q1]

<http://hdl.handle.net/10486/709804>

35. García, G.; Llorena, D.; Illescas, C.; Viñals, S.; García, L.; Fernández de Barrena Machón, G.; Sánchez-Parcerisa, D.; Ynsa, MD. (2024). Phenomenological toy model for flash effect in proton therapy. *European Physical Journal Plus*. 139 (6): 479. DOI: 10.1140/epjp/s13360-024-05267-z [Q2]

<http://hdl.handle.net/10486/713133>

36. García-Hernán, A.; Aguilar-Galindo, F.; Castillo, O.; Amo-Ochoa, P. (2024). 1D Zn(II)/2D Cu(I) halogen pyridyl coordination polymers. Band gap engineering by DFT for predicting more efficient photocatalysts in water treatment. *Catalysis Science & Technology*. 14 (22): 6573-6583. DOI: 10.1039/d4cy00969j [Q2]

<http://hdl.handle.net/10486/716103>

37. García-Hernán, A.; Brito-Santos, G.; de la Rubia, E.; Aguilar-Galindo, F.; Castillo, O.; Lifante-Pedrola, G.; Sanchíz, J.; Guerrero-Lemus, R.; Amo-Ochoa, P. (2024). Determining factors to understand the external quantum efficiency values: study carried out with Copper(I)-I and 1,2-Bis(4-pyridyl)ethane coordination polymers as downshifters in photovoltaic modules. *Inorganic Chemistry*. 63 (10): 4646-4656. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.3c04232 [Q1]

<http://hdl.handle.net/10486/711503>

38. González-Vázquez, J.; García, G.A.; Chicharro, D.V.; Bañares, L.; Poullain, S.M. (2024). Evidencing an elusive conical intersection in the dissociative photoionization of methyl iodide. *Chemical Science*. 15 (9): 3203-3213. DOI: 10.1039/d3sc04065h [Q1]

<http://hdl.handle.net/10486/714500>

39. Gouadria, H.; Aguilar-Galindo, F.; Álvarez-Alonso, J.; de Miguel, J.J.; Díaz-Tendero, S.; Capitán, M.J. (2024). Disentangling the Optoelectronic Behavior of Lead Iodide Governed by Two-Dimensional Electron Confinement. *ACS Applied Materials and Interfaces*. 16 (42): 57302-57315. DOI: 10.1021/acsami.4c10507 [Q1]

<http://hdl.handle.net/10486/718685>

40. Hervé du Penhoat, M.A.; Souchaud, A.; Rajpal, A.; Vuilleumier, R.; Gaigeot, M.P.; Tavernelli, I.; Fujii, K.; Yokoya, A.; Díaz-Tendero, S.; Politis, M.F. (2024). Ultrafast fragmentation of highly-excited doubly-ionized deoxyribose: role of the liquid water

environment. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 26 (21): 15693-15704. DOI: 10.1039/d4cp00489b [Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/717535>

41. Kamel, E.; Alkhayl, F.F.A.; Alqhtani, H.A.; Bin-Jumah, M.; Lamsabhi, A.M. (2024). Dynamic interactions and inhibitory mechanisms of *Artemisia annua* terpenoids with carbonic anhydrase IX. *International Journal of Biological Macromolecules*. 282 (3): 136982-287. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2024.136982 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/717553>

42. Kamel, E.M.; Alkhayl, F.F.A.; Alqhtani, H.A.; Bin-Jumah, M.; Rudayni, H.A.; Lamsabhi, A.M. (2024). Dissecting molecular mechanisms underlying the inhibition of β -glucuronidase by alkaloids from *Hibiscus trionum*: Integrating in vitro and in silico perspectives. *Computers in Biology and Medicine*. 180: 108969. DOI: 10.1016/j.compbiomed.2024.108969 [Q1]

43. Kamel, E.M.; Alkhayl, F.F.A.; Alqhtani, H.A.; Bin-Jumah, M.; Rudayni, H.A.; Lamsabhi, A.M. (2024). Bridging in silico and in vitro perspectives to unravel molecular mechanisms underlying the inhibition of (3-glucuronidase by coumarins from *Hibiscus trionum*. *Biophysical Chemistry*. 313: 107304. DOI: 10.1016/j.bpc.2024.107304 [Q3]

44. Kamel, E.M.; Alqhtani, H.A.; Bin-Jumah, M.; Rudayni, H.A.; El-Bassuony, A.A.; Lamsabhi, A.M. (2024). Deciphering molecular mechanisms underlying the inhibition of 13-glucuronidase by xanthenes from *Centaurium spicatum*. *Bioorganic Chemistry*. 150: 107609. DOI: 10.1016/j.bioorg.2024.107609 [Q1]

45. Kamel, E.M.; Alwaili, M.A.; Rudayni, H.A.; Allam, A.A.; Lamsabhi, A.M. (2024). Deciphering the molecular mechanisms of reactive metabolite formation in the mechanism-based inactivation of cytochrome p450 1B1 by 8-Methoxypsoralen and assessing the driving effect of phe268. *Molecules*. 29 (7): 1433. DOI: 10.3390/molecules29071433 [Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/716502>

46. Kamel, EM.; Maodaa, S.; Al-Shaebi, EM.; Lamsabhi, AM. (2024). Mechanistic insights into the metabolic pathways of vanillin: unraveling cytochrome P450 interaction mechanisms and implications for food safety. *Organic and Biomolecular Chemistry*. 22 (32): 6561-6574. DOI: 10.1039/d4ob00973h [Q2]

47. Kamel, EM.; Maodaa, S.; Al-Shaebi, EM.; Mokhtar, L.A. (2024). Molecular insights into β -glucuronidase inhibition by *Alhagi Graecorum* flavonoids: a computational and experimental approach. *ChemistryOpen*. 14 (3): e202400325. DOI: 10.1002/open.202400325 [Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/718830>

48. Kuraoka, T.; Goto, S.; Kanno, M.; Díaz-Tendero, S.; Reino-González, J.; Trinter, F.; Pier, A.; Sommerlad, L.; Melzer, N.; McGinnis, O.D.; Kruse, J.; Wenzel, T.; Jahnke, T.; Xue, H.; Kishimoto, N.; Yoshikawa, K.; Tamura, Y.; Ota, F.; Hatada, K.; Ueda, K.; (2024). Tracing photoinduced hydrogen migration in alcohol dications from time-resolved molecular-frame

photoelectron angular distributions. *Journal of Physical Chemistry A*. 128 (7): 1241-1249. DOI: 10.1021/acs.jpca.3c07640 [Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/711159>

49. Lamsabhi, A.; Mo, O.; Guillemín, J.C.; Yáñez, M. (2024). Characterization of 1,1-and 1,2-ethenedithiol, elusive compounds of potential astrochemical interest. *Journal of Molecular Modeling*. 30 (10): 347. DOI: 10.1007/s00894-024-06149-y [Q3]

50. López-Pacios, L.; Nogueira, J.J.; Martínez-Fernández, L. (2024). Computational characterization of the DAD photoisomerization: functionalization, protonation, and solvation effects. *Journal of Physical Chemistry B*. 128 (47): 11587-11596. DOI: 10.1021/acs.jpcc.4c05179 [Q3]
<http://hdl.handle.net/10486/716548>

51. Lorient, V.; Boyer, A.; Nandi, S.; González-Collado, C.M.; Plesiat, E.; Marciniak, A.; García, C.L.; Hu, Y.; Lara-Astiaso, M.; Palacios, A.; Decleva, P.; Martín, F.; Lepine, F. (2024). Attosecond metrology of the two-dimensional charge distribution in molecules. *Nature Physics*. 20 (5): 765-769. DOI: 10.1038/s41567-024-02406-2 [Q1]

52. Lucía-Tamudo, J.; Díaz-Tendero, S.; Nogueira, J.J. (2024). Modeling one-electron oxidation potentials and hole delocalization in double-stranded DNA by multilayer and dynamic approaches. *Journal of Chemical Information and Modeling*. 64 (12): 4802-4810. DOI: 10.1021/acs.jcim.4c00528 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/713291>

53. Lucía-Tamudo, J.; López-Sánchez, R.; Nogueira, J.J.; Díaz-Tendero, S. (2024). Effect of weak intermolecular interactions on the ionization of benzene derivatives dimers. *Journal of Chemical Physics*. 161 (16): 164309. DOI: 10.1063/5.0226339 [Q2]

54. Lucía-Tamudo, J.; Nogueira, J.J.; Díaz-Tendero, S. (2024). Charge transfer mechanism in guanine-based self-assembled monolayers on a gold surface. *Langmuir*. 40 (29): 15129-15139. DOI: 10.1021/acs.langmuir.4c01512 [Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/714042>

55. Luo, S.; Weissenbilder, R.; Laurell, H.; Bello, R.Y.; Marante, C.; Ammitzböll, M.; Neoričić, L.; Ljungdahl, A.; Squibb, R.J.; Feifel, R.; Gisselbrecht, M.; Arnold, C.L.; Martín, F.; Lindroth, E.; Argenti, L.; Busto, D.; Huillier, A. (2024). Influence of final state interactions in attosecond photoelectron interferometry. *Physical Review Research*. 6 (4): 043271. DOI: 10.1103/PhysRevResearch.6.043271 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/718447>

56. Luo, Y.; Sheng, S.; Pizarra, M.; Martín-Jiménez, A.; Martín, F.; Kern, K.; Garg, M. (2024). Selective excitation of vibrations in a single molecule. *Nature Communications*. 15 (1): 6983. DOI: 10.1038/s41467-024-51419-1 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/717120>

- 57.** Malakhov, M.; Cistaro, G.; Martín, F.; Picon, A. (2024). Exciton migration in two-dimensional materials. *Communications Physics*. 7 (1): 196. DOI: 10.1038/s42005-024-01689-4 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/713666>
- 58.** Mansouri, M.; Díaz, C.; Martín, F. (2024). Optoelectronic properties of electron-acceptor molecules adsorbed on graphene/silicon carbide interfaces. *Communications Materials*. 5 (1): 117. DOI: 10.1038/s43246-024-00549-6 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/716602>
- 59.** Marchesano, F.; Melotti, L.; Paoloni, L. (2024). On the moduli space curvature at infinity. *Journal of High Energy Physics*. 2024 (2): 103. DOI: 10.1007/JHEP02(2024)103 [Q1]
- 60.** Martín, F.; Calegari, F.; Vozzi, C.; Ueda, K.; DiMauro, L. (2024). Virtual special issue on attosecond chemistry. *Journal of Physical Chemistry A*. 128 (24): 4761-4764. DOI: 10.1021/acs.jpca.4c03136 [Q2]
- 61.** Martín-Fernández, C.; Montero-Campillo, M.M.; Alkorta, I. (2024). Hydrogen bonds are never of an "anti-electrostatic" nature: a brief tour of a misleading nomenclature. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 15 (15): 4105-4110. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.4c00779 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/716760>
- 62.** Mateo-de-laFuente, H.; Nogueira, J.J. (2024). OLUFF: a novel set of ground and excited state force field parameters of the emitting oxyluciferin species. *Photochemical and Photobiological Sciences*. 23 (12): 2157-2171. DOI: 10.1007/s43630-024-00654-y [Q2]
- 63.** Mellaoui, M.D.; Zaki, K.; Abbiche, K.; Imjjad, A.; Boutiddar, R.; Sbai, A.; Jmiai, A.; El Issami, S.; Lamsabhi, A.M.; Zejli, H. (2024). In silico anticancer activity of isoxazolidine and isoxazolines derivatives: DFT study, ADMET prediction, and molecular docking. *Journal of Molecular Structure*. 1308: 138330. DOI: 10.1016/j.molstruc.2024.138330 [Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/716476>
- 64.** Méndez, L.; Rabadán, I. (2024). Ab Initio Study of Electron Capture in Collisions of Protons with CO₂ Molecules. *Molecules*. 30 (1): 74. DOI: 10.3390/molecules30010074 [Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/718248>
- 65.** Mishra, D.; LaForge, A.C; Gorman, L.M; Díaz-Tendero, S.; Martín, F.; Berrah, N. (2024). Direct tracking of H₂ roaming reaction in real time. *Nature Communications*. 15 (1): 6656. DOI: 10.1038/s41467-024-49671-6 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/717117>
- 66.** Mó, O.; Lamsabhi, A.M.; Guillemin, J.C.; Yáñez, M. (2024). Ionization, intrinsic basicity, and intrinsic acidity of unsaturated diols of astrochemical interest: 1,1- and 1,2-ethenediol: A theoretical survey. *Journal of Computational Chemistry*. 45 (3): 140-149. DOI: 10.1002/jcc.27223 [Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/708947>

- 67.** Mó, O.; Montero-Campillo, M.M.; Yáñez, M.; Alkorta, I.; Elguero, J. (2024). Discovering trends in the Lewis acidity of beryllium and magnesium hydrides and fluorides with increasing clusters size. *Journal of Computational Chemistry*. 45 (20): 1702-1715. DOI: 10.1002/jcc.27356 [Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/711747>
- 68.** Molinero, E.B.; Amorim, B.; Malakhov, M.; Cistaro, G.; Jiménez-Galán, Á.; Picón, A.; San-José, P.; Ivanov, M.; Silva, R.E.F. (2024). Subcycle dynamics of excitons under strong laser fields. *Science Advances*. 10 (35): eadn6985. DOI: 10.1126/sciadv.adn6985 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/717478>
- 69.** Montes, J.; Arranz, F.J.; Borondo, F. (2024). Using Lagrangian descriptors to calculate the Maslov index of periodic orbits. *Physical Review E*. 110 (1): 014213. DOI: 10.1103/PhysRevE.110.014213 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/716610>
- 70.** Montes, J.; Carlo, G.G.; Borondo, F. (2024). Average localization of resonances on the quantum repeller. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 132: 107886. DOI: 10.1016/j.cnsns.2024.107886 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/711282>
- 71.** Mosquera, J.F.P.; Cistaro, G.; Malakhov, M.; Picón, A.; Pisanty, E.; Dauphin, A.; Lewenstein, M.; Plaja, L.; Chacón, A. (2024). Topological phase transitions via attosecond x-ray absorption spectroscopy. *Reports on Progress in Physics*. 87 (11): 117901. DOI: 10.1088/1361-6633/ad889f [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/720643>
- 72.** Naumova, MA.; ...; Gawelda, W.;...; Canton, SE. (2024). Nonadiabatic charge transfer within photoexcited nickel porphyrins. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 15 (13): 3627-3638. DOI: 10.1021/acs.jpclett.4c00375 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/718015>
- 73.** Nogal, N.; Luis-Barrera, J.; Vela-Gallego, S.; Aguilar-Galindo, F.; de la Escosura, A. (2024). NADH-mediated primordial synthesis of amino acids. *Organic Chemistry Frontiers*. 11 (7): 1924-1932. DOI: 10.1039/D4QO00050A [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/711758>
- 74.** Nowakowski, M; ...; Gawelda, W.; ...; (2024). Ultrafast two-color X-ray emission spectroscopy reveals excited state landscape in a base metal dyad. *Advanced Science*. 11 (38): 2404348. DOI: 10.1002/advs.202404348 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/717194>
- 75.** Palmisano, V.F.; Anguita-Ortiz, N.; Faraji, S.; Nogueira, J.J. (2024). Voltage-gated ion channels: structure, pharmacology and photopharmacology. *ChemPhysChem*. 25 (16): e202400162. DOI: 10.1002/cphc.202400162 [Q3]
<http://hdl.handle.net/10486/714219>

- 76.** Palmisano, V.F.; Agnorelli, C.; Fagiolini, A.; Erritzoe, D.; Nutt, D.; Faraji, S.; Nogueira, J.J. (2024). Membrane permeation of psychedelic tryptamines by dynamic simulations. *Biochemistry*. 63 (4): 419-428. DOI: 10.1021/acs.biochem.3c00598 [Q3]
<http://hdl.handle.net/10486/711388>
- 77.** Pizarra, M.; Navarro, J.J.; Díaz, C.; Calleja, F.; Vázquez de Parga, A.L.; Martín, F. (2024). Jumping dynamics of cyanomethyl radicals on corrugated graphene/Ru(0001) substrates. *Journal of Physical Chemistry C*. 128 (50): 21408-21414. DOI: 10.1021/acs.jpcc.4c06312 [Q3]
<http://hdl.handle.net/10486/716849>
- 78.** Pranjali, P.; González-Vázquez, J.; Bello, R.Y.; Martín, F. (2024). Resonant photoionization of CO₂ up to the fourth ionization threshold. *Journal of Physical Chemistry A*. 128 (1): 182-190. DOI: 10.1021/acs.jpca.3c06947 [Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/710937>
- 79.** Pulgar, A.; Valentín, M.; Rauer, C.; Pla, P.; Alonso-Prados, J.L.; Sandín-España, P.; Lamsabhi, A.L.; Alcamí, M. (2024). Theoretical study of structural and electronic trends of the sulfonylurea herbicides family. *Journal of Physical Chemistry A*. 128 (29): 5941-5953. DOI: 10.1021/acs.jpca.4c03259 [Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/714040>
- 80.** Recio, P.; Bello R.Y.; García, G.A.; Zanchet, A.; González-Vázquez, J.; Banares, L.; Marggi Poullain, S. (2024). Dissociative photoionization of acetaldehyde in the 10.2-19.5 eV VUV range. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 26 (32): 21441-21452. DOI: 10.1039/d4cp01984a [Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/717536>
- 81.** Revuelta, F.; Chacón, R.; Borondo, F. (2024). Dynamical localization in nonideal kicked rotors driven by two competing pulsatile modulations. *Physical Review E*. 110 (5): 054202. DOI: 10.1103/PhysRevE.110.054202 [Q1]
- 82.** Revuelta, F.; Vergini, E.; Benito, R.M.; Borondo, F. (2024). Calculation of highly excited degenerate eigenstates of a chaotic system in energy windows. *Discontinuity, Nonlinearity, and Complexity*. 13 (1): 49-64. DOI: 10.5890/DNC.2024.03.004 [SF]
- 83.** Rodríguez-Cuenca, E.; Picón, A.; Oberli, S.; Kuleff, A.I.; Vendrell, O. (2024). Core-Hole coherent spectroscopy in molecules. *Physical Review Letters*. 132 (26): 263202. DOI: 10.1103/PhysRevLett.132.263202 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/716691>
- 84.** Schäfer, A.; Giannini, S.; Strelnikov, D.; Mohr, T.; Santoro, F.; Cerezo, J.; Kappes, M.M. (2024). Influence of symmetry breaking on the absorption spectrum of crystal violet: from isolated cations at 5 K to room temperature solutions. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 26 (45): 28514-28524. DOI: 10.1039/d4cp03825h [Q2]

- 85.** Stenquist, A.; Zapata, F.; Olofsson, E.; Liao, Y.; Svegborn, E.; Bruhnke, J.N.; Verdozzi, C.; Dahlstroem, J.M. (2024). Mollow-like triplets in ultrafast resonant absorption. *Physical Review Letters*. 133 (6): 063202. DOI: 10.1103/PhysRevLett.133.063202 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/716684>
- 86.** Suner-Rubio, A.J.; Lemell, C.; Bello, R.Y.; Burgdorfer, J.; Palacios, A.; Martín, F. (2024). Attosecond photoionization delays in molecules: The role of nuclear motion. *Physical Review Research*. 6 (2): L022066. DOI: 10.1103/PhysRevResearch.6.L022066 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/716710>
- 87.** Takkella, D.; Sharma, S.; Vishwakarma, J.; Cerezo, J.; Martínez-Fernández, L.; Gavvala, K. (2024). Unveiling the interaction modes of Imiquimod with DNA: Biophysical and computational studies. *Journal of Photochemistry and Photobiology A-Chemistry*. 447: 115190. DOI: 10.1016/j.jphotochem.2023.115190 [Q2]
- 88.** Vindel-Zandbergen, P.; González-Vázquez, J. (2024). Non-adiabatic dynamics of photoexcited cyclobutanone: Predicting structural measurements from trajectory surface hopping with XMS-CASPT2 simulations. *Journal of Chemical Physics*. 161 (2): 024104. DOI: 10.1063/5.0203722 [Q2]
- 89.** Vismarra, F.; Fernández-Villoria, F.; Mocci, D.; González-Vázquez, J.; Wu, Y.; Colaizzi, L.; Holzmeier, F.; Delgado, J.; Santos, J.; Bañares, L.; Carlini, L.; Castrovilli, M.C.; Bolognesi, P.; Richter, R.; Avaldi, L.; Palacios, A.; Lucchini, M.; Reduzzi, M. (2024). Few-femtosecond electron transfer dynamics in photoionized donor- π -acceptor molecules. *Nature Chemistry*. 16 (12): 2017-2024. DOI: 10.1038/s41557-024-01620-y [Q1]
- 90.** Yoshikawa, K.; ...; Díaz-Tendero, S.; Martín, F.; ...; (2024). Time-resolved photoelectron diffraction imaging of methanol photodissociation involving molecular hydrogen ejection. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 26 (38): 25118-25130. DOI: 10.1039/d4cp01015a [Q2]
<http://hdl.handle.net/10486/717538>
- 91.** Zapata, F.; Toffoli, D.; Dahlström, J.M.; Lindroth, E.; Decleva, P.; Martín, F. (2024). B-Spline solution of the two-center dirac equation in the electronic continuum for relativistic molecular photoionization. *Journal of Chemical Theory and Computation*. 20 (23): 10507-10523. DOI: 10.1021/acs.jctc.4c01232 [Q1]
<http://hdl.handle.net/10486/718708>

OTRAS PUBLICACIONES

Conferencia Publicada

- 1.** Anguita-Ortiz, N.; Lombardi, A.; Faginas-Lago, N.; Nogueira, J.J. (2024). Insights into ion conduction mechanisms through the ORF3a channel by computational modelling. *Lecture Notes in Computer Science*. 14823: 402-414. DOI: 10.1007/978-3-031-65329-2_27

Corrección

2. García-Hernán, A.; Aguilar-Galindo, F.; Castillo, O.; Amo-Ochoa, P. (2024). Correction: 1D Zn(ii)/2D Cu(i) halogen pyridyl coordination polymers. Band gap engineering by DFT for predicting more efficient photocatalysts in water treatment (Sept, 10.1039/d4cy00969j, 2024). Catalysis Science & Technology. 14 (22): 6720-6720. DOI: 10.1039/d4cy90084g

Editorial

3. Gorfinkiel, J.D.; Martín, F. (2024). Attosecond Chemistry Special Issue. Computer Physics Communications. 299: 109140-109140. DOI: 10.1016/j.cpc.2024.109140

4.TESIS DOCTORALES

En 2024, se han defendido 6 tesis doctorales en el departamento

Plan	Tesis defendidas
Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional	6
Total	6

Relación de Tesis doctorales - Ordenación alfabética por título

1. Attosecond dynamics of photoionized organic molecules

Autoría: Delgado Guerrero, Jorge

Fecha de lectura: 12/06/2024

Dirigida por: Palacios Cañas, Alicia; Martín García, Fernando

Desarrollada en: Departamento de Química

<http://hdl.handle.net/10486/715204>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

Departamento de Química

2. Attosecond two-photon double ionization of H2 molecule in full dimensionality

Autoría: Arteaga Gutiérrez, Kilian

Fecha de lectura: 26/04/2024

Dirigida por: Palacios Cañas, Alicia; Martín García, Fernando

Desarrollada en: Departamento de Química

<http://hdl.handle.net/10486/714889>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

Departamento de Química

3. Computational modelling of optical devices: molecular motors, development of fluorescent probes and curved nanographenes

Autoría: Romeo Gella, Fernando

Fecha de lectura: 22/01/2024

Dirigida por: Corral Pérez, Inés

Desarrollada en: Departamento de Química

<http://hdl.handle.net/10486/713553>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

Departamento de Química

4. DNA damage: on the origin of the photostability of DNA and its response to platination with biheterometallic compounds

Autoría: Ortín Fernández, Francisco Javier

Fecha de lectura: 29/11/2024

Dirigida por: Corral Pérez, Inés

Desarrollada en: Departamento de Química

<http://hdl.handle.net/10486/718185>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

Departamento de Química

5. Entering in the big data era of quantum astrochemistry: a database of potentially detectable molecules in the interstellar medium

Autoría: Montes de Oca Estévez, María Judit

Fecha de lectura: 24/05/2024

Dirigida por: Prosmi, Aristeo

Tutorizada por: Alcamí Pertejo, Manuel

Desarrollada en: Instituto de Física Fundamental

<http://hdl.handle.net/10486/715045>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

Departamento de Química

6. Exploring the mechanisms of CO₂ capture by intramolecular Frustrated Lewis Pairs

Autoría: Ferrer Mariot, Maxime

Fecha de lectura:

04/10/2024

Dirigida por: Oliva-Enrich, Josep M.; Alkorta, Ibón

Tutorizada por: Alcamí Pertejo, Manuel

Desarrollada en: Departamento de Ingeniería Química

<http://hdl.handle.net/10486/717899>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

Departamento de Química

5.PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y CONTRATOS CON EMPRESAS

El Departamento para 2024 ha tenido vigentes 25 proyectos de investigación.

Relación de Proyectos de Investigación vigentes en 2024

1. Attosecond Chemistry- AttoChem

Referencia: CA18222

Vigencia: 2019-2024

Investigadores: Martín García, F. (IP)

Financiador: Comisión Europea

2. Campos de fuerza basados en aprendizaje automático para el control de la activación de canales iónicos

Referencia: CNS2022-135720

Vigencia: 2023/2025

Investigadores: Nogueira Pérez, Juan José (IP)

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: Agencia Estatal de Investigación (AEI)

3. Comprendiendo la radioterapia flash con dispositivos de tejido-en-chip y resonancia magnética mejorada con hiperpolarización: FLASHONCHIP

Referencia: PLEC2022-009256

Vigencia: 2022/2025

Investigadores: Illescas Rojas, Clara Matilde; Rabadán Romero, Ismanuel; García López, Gastón (IP)

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: Agencia Estatal de Investigación (AEI)

4. Daño de membranas y control de canales iónicos fotoinducidos

Referencia: PID2020-117806GA-I00

Vigencia: 2021/2024

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

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: Agencia Estatal de Investigación (AEI)

5. Deformación del material y dinámica excitónica

Referencia: CNS2022-135803

Vigencia: 2023/2025

Investigadores: Picón Álvarez, Antonio (IP)

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: Agencia Estatal de Investigación (AEI)

6. Dinámica de attosegundos inducida por luz XUV y de Rayos X en átomos y moléculas en fase gas

Referencia: PID2022-138288NB-C32

Vigencia: 2023/2026

Investigadores: Boll, Diego Ivan Rene; Ambrosio, Marcelo José; Martín Llorente, Beatriz; González Collado, Celso Manuel; Fojon, Omar Ariel; Bello Romero, Roger Yulier; González Vázquez, Jesús (IP); Palacios Cañas, Alicia (IP)

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: Agencia Estatal de Investigación (AEI)

7. Dinámica electrónica y técnicas ultrarrápidas

Referencia: PID2021-126560NB-I00

Vigencia: 2022/2025

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

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: Agencia Estatal de Investigación (AEI)

8. Dinámica ultrarrápida de la estructura atómica y electrónica local de moléculas funcionales y nanomateriales

Referencia: PID2022-140257NB-I00

Vigencia: 2023/2026

Investigadores: Burgos Caminal, Andrés; Corrales Castellanos, María Eugenia; Gawelda, Wojciech Milosz (IP)

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: Agencia Estatal de Investigación (AEI)

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

Referencia: SI2/PBG/2020-00003

Vigencia: 2020/2024

Investigadores: Gawelda, Wojciech Milosz (IP)

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: Comunidad de Madrid

10. Electronic structure and ultrafast dynamics in atoms, molecules and solids out of equilibrium

Referencia: PID2022-138288NB-C31

Vigencia: 2023/2026

Investigadores: Martín, Fernando

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN)

11. EMJMD Theoretical Chemistry and Computational Modelling

Referencia: 2019-1539/001-001

Vigencia: 2019/2025

Investigadores: Alcamí Pertejo, Manuel (IP)

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: Universidad Autónoma de Madrid

12. Estudio de procesos de transferencia de carga en moléculas

Referencia: n/d

Vigencia: 2022/2024

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

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: FUAM

13. Evolución química de los ladrillos moleculares de la vida durante la era prebiótica: claves fotofísicas para entender la composición actual de los ácidos nucleicos

Referencia: LEO24-1-13210

Vigencia: 2024/2027

Investigadores: Corral Perez, Inés

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: Fundación BBVA14. **Materiales metal-orgánicos fotocatalíticos y con capacidad de light down-shifting para el aprovechamiento de la energía solar**

Referencia: PID2022-138968NB-C21

Vigencia: 2023/2025

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

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: Agencia Estatal de Investigación (AEI)

15. 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: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: Agencia Estatal de Investigación (AEI)

16. Modelización in silico de la interacción de derivados de purina y pirimidina con luz: claves para la evolución fotoquímica del alfabeto de los ácidos nucleicos

Referencia: CNS2022-135912

Vigencia: 2023/2025

Investigadores: Corral Pérez, Ines (IP)

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: Agencia Estatal de Investigación (AEI)

17. NEXT- an international Network for nonlinear Extreme UV to hard X-ray Techniques

Referencia: CA 22148

Vigencia: 2023/2027

Investigadores: Gawelda, Wojciech Milosz (IP)

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: Comisión Europea

18. Producción de hidrógeno por disociación electroquímica de agua asistida por fotocatalizadores con control de espín

Referencia: TED2021-131042B-I00

Vigencia: 2022/2025

Investigadores: Capitán Aranda, María; Diaz-Tendero Victoria, Sergio; Mazario Masip, Eva; Olmos Martínez, José Manuel; Aguilar-Galindo Rodríguez, Fernando; Álvarez Alonso, Jesús; Segovia Cabrero, María Pilar; Menéndez González, Nieves; Herrasti González, Pilar; Fatas Lahoz, Enrique; García Michel, Enrique; Miguel Llorente, Juan José De (IP); Recio Cortes, Francisco Javier (IP)

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: Agencia Estatal de Investigación (AEI)

19. Quantum information science and ultrafast nonlinear coherent control at the attosecond timescale (Grupo UAM)

Referencia: HORIZON-MSCA- 2023-DN-01, ref. 101168628 **Vigencia:** 2024/2028

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

Entidades participantes: Training Network that unites 14 academic institutions, three large-scale facilities, four industrial companies, and two outreach partners across 10 European countries

Financiador: H2020

20. Reactividad ultrarrápida en la nanoescala

Referencia: PID2022-138470NB-I00 **Vigencia:** 2023/2026

Investigadores: Lucia Tamudo, Jesús; Leiferman Tamames, Mariana; Diaz-Tendero Victoria, Sergio (IP)

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: Agencia Estatal de Investigación (AEI)

21. Relativistic Time-Delays in molecules

Referencia: MSCA-H2020-COFUND, ref. 101034324 **Vigencia:** 2024/2025

Investigadores: Martín, Fernando

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: H2020

22. Simulación de procesos con impacto en astroquímica y medioambiente

Referencia: PID2023-150717NB-I00 **Vigencia:** 2024/2027

Investigadores: Alcamí Pertejo, Manuel (IP); Lamsabhi, Al Mokhtar (IP); Martín Somer, Ana; Mo Romero, Otilia

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: Agencia Estatal de Investigación (AEI)

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

Referencia: PID2021-125207NB-C31 **Vigencia:** 2022/2025

Investigadores: Sanz Mercado, Pablo; Bruña Fernandez, Sonia; Mo Romero, Otilia; Yáñez Montero, Manuel; Montero Campillo, M^a De La Merced; Romeo Gella, Fernando; González Vadillo, Ana María; Corral Pérez, Ines (IP); Cuadrado Sánchez, Isabel (IP)

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: Agencia Estatal de Investigación (AEI)

24. 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: Universidad Autónoma de Madrid

Financiador: Comunidad de Madrid

25. The ultimate Time scale in Organic Molecular opto-electronics, the ATTOsecond

Referencia: GA 951224 **Vigencia:** 2021/2027

Investigadores: Martín García, Fernando (IP)

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid; Universidad Complutense de Madrid; Politecnico di Milano; Fundación IMDEA NAanociencia

Financiador: European Research Council (ERC). H2020; ERC Synergy Grant

6. AYUDAS INDIVIDUALES

Tipo de ayudas	Nº de ayudas
Captación de talentos Comunidad de Madrid.	1
Doctorado	1
FPI	4
Gestión de I+D asociada a la ejecución de Proyectos de Investigación de la UAM	1
Research Cost - CIVIS 3i	1
Total general	8

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

Participantes: Alias Rodríguez, Marc; Cavaletto, Stefano Michele; González Collado, Celso Manuel; Galiana, Joachim Walter Jose; Mansouri, Masoud; Martín García, Fernando (Coord.); Pisarra, Michele; Sánchez Pinel, Sergio; Suñer Rubio, Adrián Jesús

Departamentos con miembros del grupo: Química

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

4. Molecular processes modeling group

Acrónimo: MolPM

Tipo de grupo: Grupo consolidado

Líneas de investigación: Simulación de procesos dinámicos en sistemas moleculares complejos. Dinámica de fragmentación de agregados moleculares y moléculas de interés biológico en condiciones atípicas (altamente excitados e ionizados). Excitación electrónica y vibracional en moléculas y nanoestructuras adsorbidas en superficies metálicas. Descripción teórica de reactividad y catálisis en química orgánica. Reactividad en fase gas. Estructura, estabilidad y reactividad de 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 Vitoria, 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: Alkorta Osoro, Ibon; Corral Pérez, Inés; Lamsabhi, Al Mokhtar; Mo 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

DEPARTAMENTOS	SEXENIOS 2024	Sexenios abiertos (2019-2024)
QUIMICA	6	15
FACULTAD	97	428

11. PREMIOS

II Premios UAM de Innovación y Transferencia del Conocimiento

Premiado: Florentino Borondo Rodríguez

Concedido por: Universidad Autónoma de Madrid

Departamento: Departamento de Química

Ganador de la 3ª edición del Concurso de Retos Tecnológicos en Gestión del Tráfico Aéreo

Premiado: Florentino Borondo Rodríguez

Concedido por: ENAIRE
Departamento: Departamento de Química

Premio Lifethime Achievement 2024

Premiado: Manuel Yañez Montero
Concedido por: European Chemistry Society
Departamento: Departamento de Química

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	biblos-e
BORONDO RODRIGUEZ, FLORENTINO	biblos-e
CEREZO BASTIDA, JAVIER	biblos-e
CORRAL PEREZ, INES	biblos-e
DIAZ-TENDERO VICTORIA, SERGIO	biblos-e
GONZALEZ VAZQUEZ, JESUS	biblos-e
ILLESCAS ROJAS, CLARA MATILDE	biblos-e
LAMSABHI BELMEKNASSI, AL MOKHTAR	biblos-e
MARCOS LAGUNA, MARIA LUISA	biblos-e
MARTIN GARCIA, FERNANDO	biblos-e
MENDEZ AMBROSIO, LUIS	biblos-e
MONTERO CAMPILLO, MARIA DE LA MERCED	biblos-e
MORI SANCHEZ, PAULA	biblos-e
NOGUEIRA PEREZ, JUAN JOSE	biblos-e
PALACIOS CAÑAS, ALICIA	biblos-e
PICON ALVAREZ, ANTONIO	biblos-e
RABADAN ROMERO, ISMANUEL	biblos-e
SEIJO LOCHE, LUIS IGNACIO	biblos-e

12.2 PDI NO PERMANENTE

12.2.1 PDI EMÉRITO

MO ROMERO, OTILIA	biblos-e
YAÑEZ MONTERO, MANUEL	biblos-e

12.2.2. PDI DOCTOR NO PERMANENTE

AGUILAR-GALINDO RODRIGUEZ, FERNANDO	biblos-e
GAWELDA, WOJCIECH MILOSZ	biblos-e
GOMEZ RODRIGUEZ, SANDRA	
ZAPATA ABELLAN, FELIPE	

12.2.3. PERSONAL INVESTIGADOR EN FORMACIÓN

ARNANZ SEBASTIAN, JULIA	biblos-e
CARDENAS, GUSTAVO ADOLFO	
CAVALETTO, STEFANO MICHELE	biblos-e

DELGADO GUERRERO, JORGE	
GALIANA, JOACHIM WALTER JOSE	
GONZALEZ COLLADO, CELSO MANUEL	biblos-e
IBAÑEZ DE LUIS, MARTA	biblos-e
LEIFERMAN TAMAMES, MARIANA	
LOPEZ PACIOS, LUCIA	biblos-e
LUCIA TAMUDO, JESUS	
MANSOURI, MASOUD	biblos-e
MATEO DE LA FUENTE, HENAR	biblos-e
MIGUEL ARIAS, SELMA	biblos-e
ORTIN FERNANDEZ, FRANCISCO JAVIER	
PEREZ TABERO, SERGIO	biblos-e
RAUER, CLEMENS	
SUÑER RUBIO, ADRIAN JESUS	
VALENTIN RODRIGUEZ, MONICA ANGELS	

12.2.4. PROFESORES HONORARIOS

ALIAS RODRIGUEZ, MARC	
PAOLONI, LORENZO	biblos-e
SANZ MERCADO, PABLO	biblos-e

