

## TESIS

### Año 1992

- **Ignacio Sánchez García**

“Métodos de cuadrado integrable para el estudio de colisiones con múltiples canales abiertos. Aplicación a la fotoionización del He”

Director: Fernando Martín García

### Año 1993

- **Mónica Cortés Sack**

“Estudio del continuo electrónico del ion H con bases de cuadrado integrable. Obtención de secciones eficaces de fotoionización”

Director: Fernando Martín García

### Año 1994

- **Alberto Luna Fernández**

“Estudio teórico de reacciones ión capa abierta-molécula de interés en astroquímica”

Director: Manuel Yáñez Montero

- **Jesús Fernández Castillo**

“Estudio de procesos de intercambio de carga y excitación en colisiones  $C^{2+} + HE$ ”

Director: Luis Méndez Ambrosio

### Año 1995

- **José Miguel Doña Rodríguez**

“Depósito químico en disoluciones y caracterización de láminas delgadas de CdS, ZnS y  $Cd_{1-x}Zn_xS$  para aplicaciones fotovoltaicas”

Director: Jaime González Velasco

- **Pedro Jimeno Cuellar**

“Aplicación del Método molecular al estudio de colisiones  $H^+ + H^-$  empleando un modelo monoeléctrico”

Director: Armando Riera Compte

- **Pedro J. Sánchez Gómez**

“Aplicación del método de absorbentes de probabilidad en colisiones ión-átomo”

Director: Luis F. Errea Ruiz

- **Ismanuel Rabadán Romero**  
"Estudio teórico de la dispersión de electrones por átomos en presencia de láseres de alta intensidad"  
Director: Luis Méndez Ambrosio

### Año 1996

- **Quiong Dai**  
"Caracterización termodinámica de nuevas fases estacionarias para cromatografía de gases con bajo porcentaje de grupo trifluoropropilo"  
Director: Francisco Martínez-González Tablas
- **Marta Herrero Portolés**  
"Estudio de reacciones de transferencia protónica en fase gaseosa por resonancia ciclotrónica de iones con transformada de Fourier"  
Directores: José L. Abboud Mas y Rafael Notario Bueno  
Tutora: Otilia Mó Romero
- **José Luis Sanz Vicario**  
"Estudio de la excitación en colisiones de iones multicargados con átomos a velocidades intermedias"  
Director: Antonio Macías Martínez
- **Angel Cuesta Ciscar**  
"Estudio electroquímico de la electroadsorción de monóxido de carbono sobre platino y metales férricos"  
Director: Claudio Gutiérrez de la Fe  
Tutor: Jaime González Velasco

### Año 1997

- **Raque Fernández César**  
"Estudio del enriquecimiento isotópico a partir de la disociación multifotónica del  $\text{CF}_3\text{Br}$  con un láser Tea de  $\text{CO}_2$ "  
Director: Francisco Martínez González-Tablas
- **Raul Guantes Navacerrada**  
"Dispersión caótica átomo-superficie"  
Director: Florentino Borondo Rodríguez

### Año 1998

- **Leticia González Herrero**  
"Caracterización de enlaces de hidrógeno inter e intramolecular. Estudio teórico de casos significativos"  
Directora: Otilia Mó Romero

- **Mercedes Manuel García**  
"Química en fase gas de los cationes de halógeno. Estudio teórico de las reacciones  $F^+$  ( $^3P$ ,  $^1D$ ) y  $Cl^+$  ( $^3P$ ,  $^1D$ ) con  $H_2O$  y  $H_2S$ "  
Directora: Otilia Mó Romero
- **Clara Illescas Rojas**
- "Tratamiento clásico de los procesos de ionización y captura en colisiones  $A^{q+} + H, H_2$  a energías intermedias"  
Director: Armando Riera Compte

### Año 1999

- **Ana Isabel González Jiménez**  
"Reacciones catión-molécula de interés en astroquímica y en la química de los elementos de tercer y cuarto periodo"  
Director: Manuel Yáñez Montero
- **Jimena Díaz Gorfinkiel**  
"Estudio teórico de procesos no adiabáticos en colisiones ion-molécula diatómica. Aplicación al sistema  $C^{4+} + H_2$ "  
Director: Luis Méndez Ambrosio
- **José David Moreno Acedo**  
"Propiedades, oxidación anódica y electroluminiscencia del silicio poroso"  
Director: Jaime González Velasco
- **Francisco Javier Arranz Saiz**  
"Transición orden-caos en la molécula LiCN"  
Director: Florentino Borondo Rodríguez

### Año 2000

- **Lourdes Infantes San Mateo**  
"Estructura Molecular de Pirazoles-NH monocíclicos: Métodos mecanocuánticos y cristalográficos. Modos de empaquetamiento cristalino"  
Directora: M<sup>a</sup> Concepción Foces Foces  
Tutora: Otilia Mó Romero

### Año 2002

- **Al Mokhtar Laamsabhi**  
"Contribution experimentale et theorique a l'estude de la basicité des groupements carbonyles et thiocarbonyles vis-a-vis de  $I_2$ ,  $ICl$  et  $H^+$ "  
Director: Manuel Yáñez Montero

### Año 2003

- **Inmaculada Sevilla Pascual**  
“Análisis de la ionización en colisiones atómicas. Descripción por distintos métodos y correlación asintótica”  
Directores: Luis F. Errea Ruiz y Bernard Pons
- **Pablo Sanz Mercado**  
“Una aproximación teórica a la química de los calcógenos”  
Directores: Manuel Yáñez Montero y Otilia Mó Romero

### Año 2004

- **Gustavo Avila Blanco**  
“Espectroscopía Raman de rotación-vibración de algunas moléculas de interés: H<sub>2</sub>O, D<sub>2</sub>O, HDO, (CO<sub>2</sub>)<sub>2</sub> y (N<sub>2</sub>)<sub>2</sub>”  
Director: Salador Montero Martín  
Tutora: Otilia Mó Romero
- **Zaki Safi**  
“Classical and quantum chaos in the vibrational states of the HCP molecule”  
Director: Florentino Borondo Rodríguez
- **Cristina Díaz Blanco**  
“Difusión molecular por superficies metálicas: H<sub>2</sub>/Pd (111) y H<sub>2</sub>/Pd (110)”  
Directores: Fernando Martín García y Antoine Salin

### Año 2005

- **Inés Corral Pérez**  
“Enlace y perturbaciones de enlace en reacciones ion-molécula en fase gas”  
Director: Manuel Yáñez Montero
- **Luis Ruiz Nieto**  
“Transferencia de carga, excitación y fragmentación en colisiones de agregados metálicos con átomos e iones”  
Director: Fernando Martín García
- **Sergio Díaz-Tendero Victoria**  
“Structure and fragmentation of neutral and positively charged carbonclusters and fullerenes”  
Directores: Manuel Alcamí Pertejo y Fernando Martín García

- **Esther Quintanilla Luján**  
 “Estudio por RCI con TF (FT-ICR) de relaciones entre estructura, reactividad y estabilidad termodinámica de especies iónicas y neutras en fase gaseosa”  
 Director: José Luis Abbud Mas  
 Tutora: Otilia Mó Romero
  
- **Delia Fernández Torres**  
 “Estudio teórico de sistemas de relevancia atmosférica: Espectroscopía IR de cristales de ácido nítrico y sus hidratos”  
 Director: Rafael Escribano Torres  
 Tutora: Otilia Mó Romero
  
- **Carmen Sicilia Aparicio**  
 “Estudio teórico del proceso de protonación de la piridina en clusters de moléculas de agua”  
 Directores: Camelia Muñoz Caro y Alfonso Niño Ramos  
 Tutora: Otilia Mó Romero
  
- **Luis Fernández Menchero**  
 “Intercambio de carga, disociación y excitación vibracional en colisiones ión-molécula. Estudio teórico de colisiones ión-H<sub>2</sub>”  
 Director: Luis Méndez Ambrosio
  
- **Jaime Suarez Corujo**  
 “Estudio comparativo clásico/cuántico de colisiones atómicas en plasmas de fusión termonuclear”  
 Directores: Armando Riera Compte y Bernard Pons

### **Año 2006**

- **Paula Riviere Herrera**  
 “Dissociative adsorption and scattering of H<sub>2</sub> molecules from the NiAl(1110) surface”  
 Director: Fernando Martín García
  
- **Alicia Palacios Cañas**  
 “Ionización y disociación de H<sub>2</sub> y H<sub>2</sub><sup>+</sup> por pulsos láser ultracortos en la región XUV”  
 Director: Fernando Martín García

## Año 2007

- **Lara Hernando Orden**  
"Construcción y análisis de funciones de scar. Aplicación a un oscilador cuártico y sistemas moleculares".  
Director: Florentino Borondo Rodríguez
- **Belén Ordejón Rontomé**  
"Estudio teórico de lantánidos y actínidos en cristales iónicos: contracción lantánida en Cs<sub>2</sub>NaYCl<sub>6</sub>:Ln<sup>3+</sup>. Luminiscencia, estados localizados y excitones atrapados en Cs<sub>2</sub>GeF<sub>6</sub>:U<sup>4+</sup>"  
Directores: Luis I. Seijo Loché y Zoila Barandiarán Piedra
- **Fernando Ruipérez Cillán**  
"Estudios teóricos ab initio de impurezas en cristales iónicos. Estructura y espectroscopía de U<sup>3+</sup> y otros iones de elementos f en las configuraciones F<sub>n</sub> F<sub>n</sub>-1 D<sub>1</sub> y F<sub>n</sub>-1 S<sub>1</sub> en Cs<sub>2</sub>NaYCl<sub>6</sub>.  
Directores: Luis I. Seijo Loché y Zoila Barandiarán Piedra
- **Patrica Barragán Ruiz de Castellano**  
"Procesos de captura electrónica en colisiones entre iones multicargados y átomos de hidrógeno"  
Directores: Luis Méndez Ambrosio e Ismanuel Rabadán Romero

## Año 2008

- **Helena Massó González**  
"Estudio espectroscópico ab initio de moléculas carbonadas. Cadenas C<sub>4</sub>, C<sub>5</sub> y C<sub>6</sub>".  
Directora: María Luis Senent Díez  
Tutora: Otilia Mó Romero
- **Magdalena Mora Salazar**  
"Modelización del proceso de interacción de analgésicos nicotínicos al subtipo  $\alpha 4\beta 2$  del receptor nAChR"  
Directores: Camelia Muñoz Caro y Alfonso Niño Ramos  
Tutora: Otilia Mó Romero
- **Cristina Trujillo del Valle**

“Estudio de enlaces y reactividad unimolecular de dicaciones orgánicos en fases gas”

Director: Manuel Yáñez Montero

- **Jorge Fernández Hernández**

“Dissociative and non dissociative ionization of H<sub>2</sub>, HeH<sup>+</sup> and H<sub>2</sub><sup>+</sup> by protons and fast particles”

Director: Fernando Martín García

- **Francisco Guzmán Fulgencio**

“Procesos colisionales entre iones multicargados y átomos neutros para el diagnóstico de plasmas a distintas temperaturas”

Director: Luis F. Errea Ruiz y Francisco L. Tabarés Vázquez

### Año 2009

- **Felipe Morales Moreno**

“One and two-photon double ionization of He and H<sub>2</sub> using exterior complex scaling”

Director: Fernando Martín García

### Año 2010

- **José Antonio Gámez Martínez**

“Electron capture dissociation of disulphides and diselenides”

Director: Manuel Yáñez Montero

- **Pablo Martínez Martínez**

“Nuevos métodos para el estudio dinámico de colisiones ión-molécula. Aplicaciones a los sistemas H<sub>2</sub>O + A<sup>q+</sup> y CO + C<sup>2+</sup>”

Directores: Luis F. Errea Ruiz e Ismanuel Rabadán Romero

- **Goar Sánchez Sanz**

“Estudio teórico ab initio de lantánidos pesados en sólidos: Yb<sup>2+</sup> en haluros”

Directora: Zoila Barandiarán Piedra

- **M<sup>a</sup> Eugenia Castro Sánchez**

“Una aproximación metaheurística para la construcción óptima de hamiltonianos rovibracionales anarmónicos”

Directores: Camelia Muñoz Caro y Alfonso Niño Ramos

Tutora: Otilia Mó Romero

### Año 2011

- **Pablo López Tarifa**  
“Fragmentation dynamics of biomolecules in gas phase and water environment”  
Director: Manuel Alcamí Pertejo
- **Ana Belén Muñoz García**  
“Estudio de primeros principios en YAG ( $Y_3Al_5O_{12}$ ) dopado con Ce”  
Directores: Zoila Barandiarán Piedra y Luis Seijo Loché

### Año 2012

- **Jhon Fredy Pérez Torres**  
“Photionization of the hydrogen molecule using attosecond laser pulses”  
Director: Fernando Martín García
- **Ane Eizaguirre Martínez de Antoñana**  
“Reacciones en fase gas de bases de relevancia con  $Ca^{2+}$  y  $Sr^{2+}$ ”  
Director: Manuel Yáñez Montero

### Año 2013

- **Daniele Stradi**  
“Charge transfer between organic molecules and epitaxial graphene on metals”  
Directores: Fernando Martín García y Cristina Díaz Blanco

### Año 2014

- **Lara Martínez Fernández**  
“Photophysics and photochemistry of singlet oxygen precursor chromophores: insights from static calculations and molecular dynamics”  
Director: Inés Corral Pérez
- **Luis Miguel Azofra Mesa**  
“Estudio teórico de procesos fundamentales en carbohidratos”  
Director: Ibón Alkorta  
Tutor: Manuel Alcamí Pertejo
- **Ana Martín Somer**



“Gas phase reactivity of Lewis-adducts and model biological systems. Quantum chemistry and molecular dynamics perspectives”

Director: Manuel Yáñez Montero

### Año 2015

- **Alvaro Jiménez Galán**  
“Attosecond spectroscopy of autoionizing states”  
Director: Fernando Martín García y Luca Argenti
- **David Ayuso Molinero**  
“Coherence in molecular photoionization”  
Directores: Fernando Martín García y Alicia Palacios Cañas
- **Alberto González Castrillo**  
“Single ionization of the hydrogen molecule induced by pump-probe techniques with ultrashort pulses”  
Directores: Fernando Martín García y Alicia Palacios Cañas
- **Maitreyi Robledo Relaño**  
“Adsorption of organic molecules on metal surfaces and metal surfaces covered with ultrathin ionic layers: charge transfer and self-assembly”  
Directores: Manuel Alcamí Pertejo y Sergio Díaz-Tendero Victoria

### Año 2016

- **Rui Emanuel Ferreira Da Silva**  
“Study of diatomic molecules under short intense laser pulses”  
Director: Fernando Martín García
- **Alberto P. Sánchez Muzas**  
“Scattering of atoms and diatomic molecules from non-metal surfaces”  
Directores: Fernando Martín García y Cristina Díaz Blanco

### Año 2017

- **Oriana Brea Noriega**  
“Novel tools for the analysis of non-standard chemical bonds: Theoretical insight into the nature of beryllium bonds”  
Directores: Manuel Yáñez Montero e Inés Corral Pérez
- **Dariusz Grzegorz Piekarski**

“Fragmentation dynamics of ionised amino acids and neutral clusters of amino acids in the gas phase: A theoretical study”

Directores: Manuel Alcamí Pertejo y Sergio Díaz-Tendero Victoria

- **Alba M<sup>a</sup> Jorge Palacios**

“Theoretical treatment of inelastic processes in atomic collisions involving one and many electron systems”

Directora: Clara Illescas Rojas

- **Carlos Antonio Marante Valdés**

“Photoionization of strongly correlated many-electron atoms and molecules: A hybrid-basis close-coupling interface to quantum chemistry packages”

Directores: Fernando Martín García y Luca Argenti

- **Markus Klinker**

“Ultrafast processes in N<sub>2</sub> photoionization: Implementacion of the XCHEN code”

Directores: Fernando Martín García y Jesús González Vázquez

- **Roger Bello**

“Imaging ultrafast electron and nuclear dynamics in hydrogenic molecules”

Directores: Fernando Martín García y Alicia Palacios Cañas

- **Denis Jelovina**

“A full dimensional Discrete Variable Representation of H<sub>2</sub><sup>+</sup> and H<sub>2</sub> photoionization”

Directores: Fernando Martín García y Alicia Palacios Cañas

- **Daniel José Arizmendi Arrieta**

“Simulations of aqueous systems: from gas to the condensed phase”

Directora: Rita Prosmi

Tutor: Manuel Alcamí Pertejo

## **Año 2018**

- **Serra Arslan**

“Influence of Purine and Pyrimidine Functionalization on the Photostability and Photoreactivity of DNA and RNA Nucleobase Derivatives”

Directora: Inés Corral Pérez

- **Manuel Lara Astiaso**

“Attosecond spectroscopy of ultrafast charge dynamics in biomolecules”

Directores: Alicia Palacios Cañas y Fernando Martín García

- **Giovanna D'Angelo**  
"Dynamics of Charged Biomolecules: Fragmentation, Molecular Growth and Solvation"  
Directores: Manuel Alcamí Pertejo y Pedro Alexandrino Fernandes

### **Año 2019**

- **Marcos del Cueto Cordones**  
"Diffraction studies of atoms and molecules from surfaces using DFT-based potential energy surfaces"  
Directores: Cristina Díaz Blanco y Fernando Martín García
- **Neus Aguilera Porta**  
"Drugs and Light. A computational approach to predict phototoxicity"  
Directores: Rachel Crespo Otero y Daniel Escudero  
Tutora: Inés Corral Pérez
- **Martina de Vetta**  
"Computational models of photosensitizers to be used in photodynamic therapy: from assisted delivery to light activation"  
Directores: Leticia González Herrero e Inés Corral Pérez
- **Carl Leon Mikael Petterson**  
"A Theoretical Study of Ultrafast Phenomena in Complex Atoms"  
Director: Fernando Martín García
- **Fernando Aguilar-Galindo Rodríguez**  
"Theoretical study of adsorption, excitation and resonant charge transfer of organic molecules on metal surfaces"  
Director: Sergio Díaz-Tendero Victoria

