



FACULTAD DE  
CIENCIAS



Cincuenta  
Aniversario  
UAM Universidad Autónoma  
de Madrid



Biblioteca de Ciencias  
UAM\_Biblioteca Universidad Autónoma de Madrid



**DEPARTAMENTO DE QUÍMICA**

**MEMORIA DE INVESTIGACIÓN**

**2018**

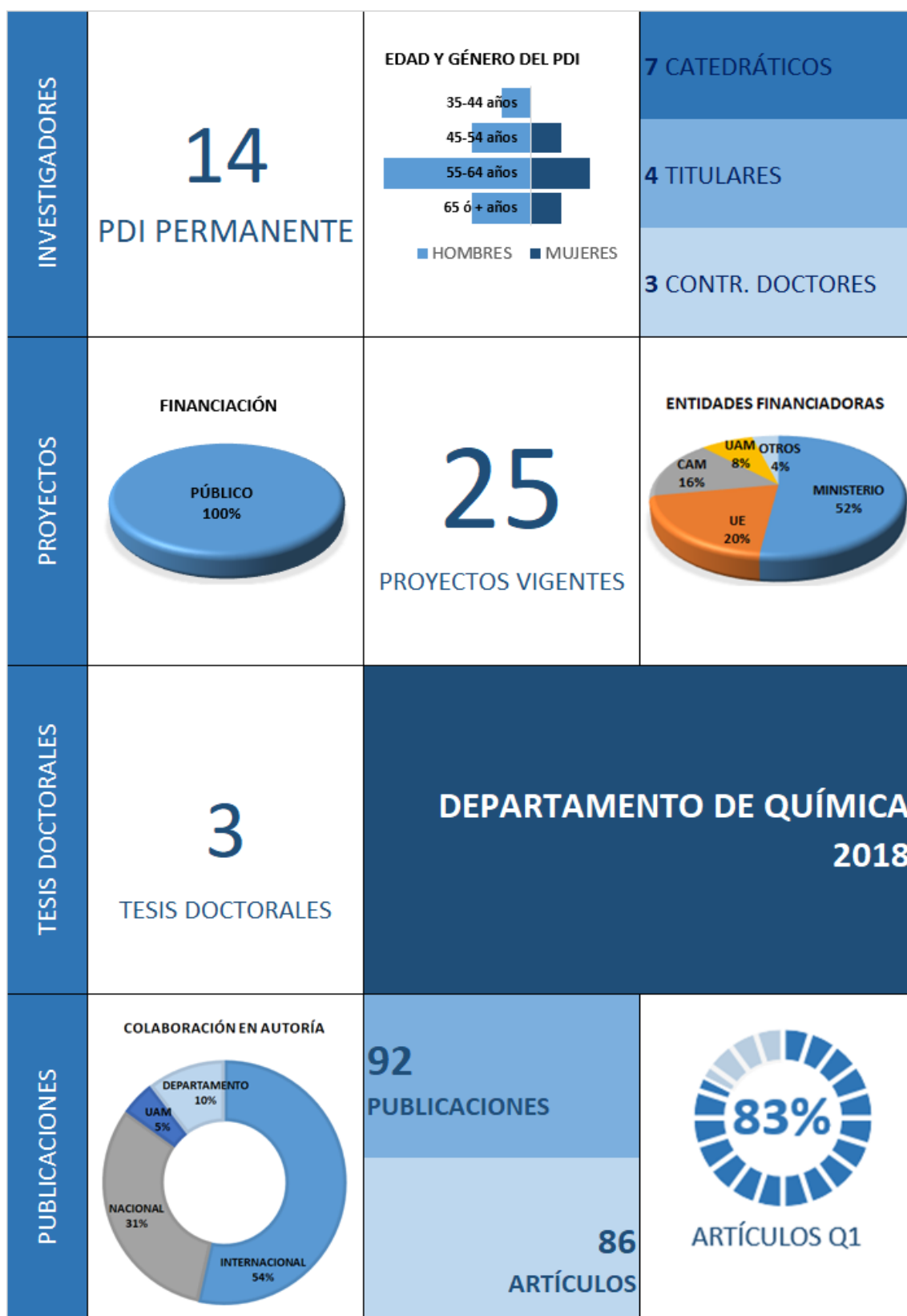
## **MEMORIA DE INVESTIGACIÓN DEL DEPARTAMENTO DE QUÍMICA 2018**

El presente documento tiene como objetivo recoger los resultados de la investigación realizada a lo largo de 2018 por los profesores e investigadores del Departamento de Química de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de Madrid. Recogiendo las publicaciones, los proyectos de Investigación en los que participa y las tesis doctorales, tanto dirigidas como tutorizadas por el PDI del Departamento.

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 y por el Decanato de la Facultad, a quienes agradecemos enormemente sus valiosas aportaciones.

INVESTIGADORES	<p style="text-align: center;"><b>526</b> PDI PERMANENTE</p>	<p><b>EDAD Y GÉNERO DEL PDI</b></p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Edad</th> <th>Hombres</th> <th>Mujeres</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>35-44 años</td> <td>~10</td> <td>~5</td> </tr> <tr> <td>45-54 años</td> <td>~25</td> <td>~15</td> </tr> <tr> <td>55-64 años</td> <td>~35</td> <td>~25</td> </tr> <tr> <td>65 ó + años</td> <td>~45</td> <td>~35</td> </tr> </tbody> </table>	Edad	Hombres	Mujeres	35-44 años	~10	~5	45-54 años	~25	~15	55-64 años	~35	~25	65 ó + años	~45	~35	<p><b>125 CATEDRÁTICOS</b></p> <p><b>269 TITULARES</b></p> <p><b>132 CONTR. DOCTORES</b></p>			
Edad	Hombres	Mujeres																			
35-44 años	~10	~5																			
45-54 años	~25	~15																			
55-64 años	~35	~25																			
65 ó + años	~45	~35																			
PROYECTOS	<p><b>FINANCIACIÓN</b></p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Financiación</th> <th>Porcentaje</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>PÚBLICO</td> <td>93%</td> </tr> <tr> <td>PRIVADO</td> <td>7%</td> </tr> </tbody> </table>	Financiación	Porcentaje	PÚBLICO	93%	PRIVADO	7%	<p style="text-align: center;"><b>447</b> PROYECTOS VIGENTES</p>	<p><b>ENTIDADES FINANCIADORAS</b></p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Entidad</th> <th>Porcentaje</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>MINISTERIO</td> <td>57%</td> </tr> <tr> <td>OTROS</td> <td>13%</td> </tr> <tr> <td>UE</td> <td>13%</td> </tr> <tr> <td>UAM</td> <td>10%</td> </tr> <tr> <td>CAM</td> <td>7%</td> </tr> </tbody> </table>	Entidad	Porcentaje	MINISTERIO	57%	OTROS	13%	UE	13%	UAM	10%	CAM	7%
Financiación	Porcentaje																				
PÚBLICO	93%																				
PRIVADO	7%																				
Entidad	Porcentaje																				
MINISTERIO	57%																				
OTROS	13%																				
UE	13%																				
UAM	10%																				
CAM	7%																				
TESIS DOCTORALES	<p style="text-align: center;"><b>174</b> TESIS DOCTORALES</p>	<p><b>FACULTAD DE CIENCIAS</b> <b>2018</b></p>																			
PUBLICACIONES	<p><b>COLABORACIÓN EN AUTORÍA</b></p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Categoría</th> <th>Porcentaje</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>INTERNACIONAL</td> <td>59%</td> </tr> <tr> <td>NACIONAL</td> <td>26%</td> </tr> <tr> <td>DEPARTAMENTO</td> <td>13%</td> </tr> <tr> <td>UAM</td> <td>2%</td> </tr> </tbody> </table>	Categoría	Porcentaje	INTERNACIONAL	59%	NACIONAL	26%	DEPARTAMENTO	13%	UAM	2%	<p><b>1480</b> PUBLICACIONES</p> <p><b>1281</b> ARTÍCULOS</p>	<p style="text-align: center;"><b>82%</b> ARTÍCULOS Q1</p>								
Categoría	Porcentaje																				
INTERNACIONAL	59%																				
NACIONAL	26%																				
DEPARTAMENTO	13%																				
UAM	2%																				



## 1. TABLAS Y GRÁFICOS

Tabla de publicaciones

AÑO	Total publicaciones	Nº Artículos	Q1	% Q1	Publicaciones/PDI permanente
<b>Departamento de Química</b>					
<b>2018</b>	92	86	71	82,56%	6,57
<b>2017</b>	61	54	50	92,59%	4,36
<b>2016</b>	70	64	57	89,06%	5,38
<b>FACULTAD DE CIENCIAS</b>					
<b>2018</b>	<b>1.480</b>	<b>1.281</b>	<b>1.047</b>	<b>81,73%</b>	<b>2,81</b>
<b>2017</b>	1.104	1.104	807	73,10%	2,19
<b>2016</b>	1.598	1.403	1.025	73,06%	3,12

Tabla de Proyectos de Investigación

DEPARTAMENTO	VIGENTES	TIPO DE FINANCIACION		ENTIDADES FINANCIADORAS				
		PÚBLICO	PRIVADO	MINISTERIO	UE	CAM	UAM	OTROS
QUÍMICA	25	25		13	5	4	2	1
<b>TOTAL FACULTAD</b>	<b>447</b>	<b>416</b>	<b>31</b>	<b>253</b>	<b>56</b>	<b>33</b>	<b>45</b>	<b>60</b>

Tabla de Tesis Doctorales

	TESIS DEFENDIDAS		
	Total	Dirigidas	Tutorizadas
QUÍMICA	3	1	2
<b>FACULTAD</b>	<b>174</b>	<b>111</b>	<b>63</b>

## 2. METODOLOGÍA

La Memoria de Investigación del Departamento de Química, extrae la información de distintas herramientas, que se relacionan a continuación en las Fuentes.

Tras un proceso de verificación y depuración se generó una primera versión que se remitió al Director y los gestores del Departamento para su revisión en dos fases: Proyectos de investigación, Contratos de Investigación y Tesis Doctorales en abril de 2019 y Publicaciones en mayo de 2019.

Se reciben las propuestas de modificación que, una vez validadas, se añaden a la versión final, junto con las nuevas incorporaciones detectadas por la Biblioteca.

Una vez finalizada la revisión, se analizan los datos relativos a indicios de calidad de los artículos, incorporándose al presente documento.

Se acompañan a esta relación de la memoria, tablas y gráficos a fin de facilitar la comprensión de los datos globales.

Se incluyen tablas comparativas (2016-2018) del Departamento, tanto con sus resultados como con la media de la Facultad, en lo referente a: Investigadores; Publicaciones: artículos con factor de impacto, porcentaje de artículos publicados en revistas del primer cuartil, ratios de publicación.

### FUENTES UTILIZADAS

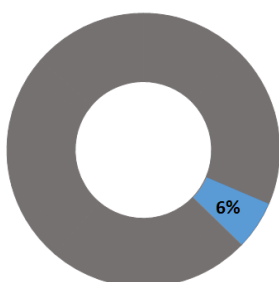
- Para las publicaciones
  - Portal de Producción Científica de la UAM [IMarina]
  - Revisión facilitada por los Departamentos
  - Bases de datos: WoS, Scopus y Pubmed.
  - A petición de algunos Departamentos, se han incorporado publicaciones de profesores e investigadores no presentes en el Portal de Producción Científica de la UAM.
- Para los indicios de calidad.
  - Se utilizan los indicadores de factor de impacto de las publicaciones JCR y SJR (Scimago) del año 2018.
- 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 los Proyectos de Investigación
  - El Servicio de Investigación de la UAM nos facilita un listado de proyectos vigentes en 2018
  - Cotejo con los distintos boletines oficiales: BOE, BOCAM

- Portal de Producción Científica de la UAM
- Revisión facilitada por los Departamentos
- Para las Tesis Doctorales
  - Sistema integrado de Gestión Bibliotecaria, al ser la Biblioteca de Ciencias depositaria de todas las tesis doctorales leídas en la Facultad de Ciencias.
  - Escuela de Doctorado, para completar información relativa a los planes de los programas de doctorado
  - Repositorio Institucional que aporta enlace permanente (handle)
  - Revisión facilitada por los Departamentos

### 3. PUBLICACIONES

El Departamento de Química, ha generado 92 publicaciones, de las que 86 son artículos científicos. De éstos, un total de 71 se han publicado en revistas del primer cuartil, que corresponde al 83% de los artículos publicados.

% Publicaciones del Departamento



El 6% de las publicaciones de la Facultad de Ciencias han sido firmadas por el PDI del Departamento de Química

#### Dónde publica el Departamento

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

TÍTULO	Artículos	CUARTIL [Q]
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A	15	Q1; Q2
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS	8	Q1; Q2
PHYSICAL REVIEW A	6	Q1; Q2
CHEMISTRY - A EUROPEAN JOURNAL	4	Q1; Q2
CHEMPHYSICHEM	4	Q1; Q2

**Relación de Publicaciones del Departamento**, ordenadas alfabéticamente por autor

#### Artículos

1. Aguilar-Galindo, F.; Díaz-Tendero, S. (2018). Theoretical Insights into Vinyl Derivatives Adsorption on a Cu(100) Surface. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C (ISSN: 19327447), 122 (48): 27301-27313. DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b06142

2. Aguilar-Galindo, F.; Ocón, P.; Poyato, J. (2018). Exploring the catalytic efficiency of X-doped (X=B, N, P) graphene in oxygen reduction reaction: Influence of solvent and border effects. *INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY* (ISSN: 00207608), 118(14): 25579. DOI: 10.1002/qua.25579
3. Alkorta, I.; Martín-Fernández, C.; Montero-Campillo, M.; Elguero, J. (2018). Hydrogen-Bonding Acceptor Character of Be<sub>3</sub>, the Beryllium Three-Membered Ring. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A* (ISSN: 00223654). 122 (5) : 1472-1478. DOI: 10.1021/acs.jpca.7b11952
4. Alkorta, I.; Montero-Campillo, M.; Elguero, J. (2018). Remote modulation of singlet-triplet gaps in carbenes. *CHEMICAL PHYSICS LETTERS* (ISSN: 00092614). 694 : 48-52. DOI: 10.1016/j.cplett.2018.01.039
5. Alkorta, I.; Montero-Campillo, M.; Elguero, J.; Yáñez, M.; Mó, O. (2018). Complexes between H<sub>2</sub> and neutral oxyacid beryllium derivatives. The role of angular strain. *MOLECULAR PHYSICS* (ISSN: 00268976), 117 (9-12): 1142-1150. DOI: 10.1080/00268976.2018.1521012
6. Alkorta, I.; Montero-Campillo, M.; Elguero, J.; Yáñez, M.; Mó, O. (2018). Complexes between neutral oxyacid beryllium salts and dihydrogen: A possible way for hydrogen storage? *DALTON TRANSACTIONS* (ISSN: 14779226). 47(36): 12516-12520. DOI: 10.1039/c8dt01679h
7. Alkorta, I.; Montero-Campillo, M.; Elguero, J.; Yáñez, M.; Mó, O. (2018). Trapping One Electron between Three Beryllium Atoms: Very Strong One-Electron Three-Center Bonds. *CHEMPHYSICHEM* (ISSN: 14394235), 19 (9): 1068-1074. DOI: 10.1002/cphc.201701240
8. Aranda, D.; Cerezo, J.; Pescitelli, G.; Avila Ferrer, F.J.; Soto, J.; Santoro, F. (2018). A computational study of the vibrationally-resolved electronic circular dichroism spectra of single-chain transoid and cisoid oligothiophenes in chiral conformations. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS* (ISSN: 14639076). 20(34): 21864-21880. DOI: 10.1039/c8cp03482f
9. Arslançan, S.; Lamsabhi, A.; Mó, O.; Yáñez, M. (2018). Complexes between cyclopentene and cyclopentyne derivatives with HCu and FCu. The importance of cyclization effects. *INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY* (ISSN: 00207608), 118 (9): 25489. DOI: 10.1002/qua.25489
10. Bello R.; Canton S.; Jelovina D.; Bozek J.; Rude B.; Smirnova O.; Ivanov M.; Palacios A.; Martín F. (2018). Reconstruction of the time-dependent electronic wave packet arising from molecular autoionization. *SCIENCE ADVANCES* (ISSN: 23752548). 4(8): eaat3962. DOI: 10.1126/sciadv.aat3962
11. Brea, O.; Corral, I. (2018). Super Strong Be-Be Bonds: Theoretical Insight into the Electronic Structure of Be-Be Complexes with Radical Ligands. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A* (ISSN: 00223654), 122(8), 2258-2265. DOI: 10.1021/acs.jpca.7b11758



12. Brea, O.; Luna, A.; Díaz, C.; Corral, I. (2018). Molecular modelling of the H<sub>2</sub> adsorptive properties of tetrazolate-based MOFs: from the cluster approach to periodic simulations (I). *CHEMPHYSICHEM* (ISSN: 14394235), 19 (11): 1349-1357. DOI: 10.1002/cphc.201800077
13. Brea, O.; Mó, O.; Yáñez, M.; Montero-Campillo, M.; Alkorta, I.; Elguero, J. (2018). Are beryllium-containing biphenyl derivatives efficient anion sponges? *JOURNAL OF MOLECULAR MODELING* (ISSN: 09485023). 24 (1), ARTN 16. DOI: 10.1007/s00894-017-3551-1
14. Buades, B.; Moonshiram, D.; Sidiropoulos, TPH.; León, I.; Schmidt, P.; Pi, I.; Di Palo, N.; Cousin, SL.; Picon, A.; Koppens, F.; Biegert, J. (2018). Dispersive soft x-ray absorption fine- structure spectroscopy in graphite with an attosecond pulse. *OPTICA* (ISSN: 23342536). 5 (5): 502. DOI: 10.1364/OPTICA.5.000502
15. Busto, D.; Barreau, L.; Isinger, M.; Turconi, M.; Alexandridi, C.; Harth, A.; Zhong, S.; Squibb, R. J.; Kroon, D.; Plogmaker, S.; Miranda, M.; Jiménez-Galan, A.; Argenti, L.; Arnold, C. L.; Feifel, R.; Martín, F.; Gisselbrecht, M.; L'Huillier, A.; Saliere (2018). Time-frequency representation of autoionization dynamics in helium. *JOURNAL OF PHYSICS B: ATOMIC, MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS* (ISSN: 09534075). 51 (4) : ARTN 044002. DOI: 10.1088/1361-6455/aaa057
16. Calegari, F.; Trabattoni, A.; Månsson, E.; Greenwood, J.; Decleva, P.; Martín, F.; Nisoli, M. (2018). Attosecond spectroscopy of bio-chemically relevant molecules. *SOCIETA ITALIANA DI FISICA. RIVISTA DEL NUOVO CIMENTO* (ISSN: 0393697X). 41(8): 415-461. DOI: 10.1393/ncr/i2018-10150-2
17. Cattaneo, L.; Vos, J.; Bello, R.; Palacios, A.; Heuser, S.; Pedrelli, L.; Lucchini, M.; Cirelli, C.; Martín, F.; Keller, U. (2018). Attosecond coupled electron and nuclear dynamics in dissociative ionization of H<sub>2</sub>. *NATURE PHYSICS* (ISSN: 17452473), 14(7), 733. DOI: 10.1038/s41567-018-0103-2
18. Cerezo, J.; Aranda, D.; Avila Ferrer, FJ.; Prampolini, G.; Mazzeo, G.; Longhi, G.; Abbate, S.; Santoro, F. (2018). Toward a general mixed quantum/classical method for the calculation of the vibronic ECD of a flexible dye molecule with different stable conformers: Revisiting the case of 2,2,2-trifluoro-anthrylethanol. *CHIRALITY* (ISSN: 08990042). 30(6): 730-743. DOI: 10.1002/chir.22853
19. Cerezo, J.; Liu, Y.; Lin, N.; Zhao, X.; Improta, R.; Santoro, F. (2018). Mixed Quantum/Classical Method for Nonadiabatic Quantum Dynamics in Explicit Solvent Models: The  $\pi\pi^*/n\pi^*$  Decay of Thymine in Water as a Test Case. *JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION* (ISSN: 15499618). 14(2): 820-832. DOI: 10.1021/acs.jctc.7b01015
20. Cerezo, J.; Prampolini, G.; Cacelli, I. (2018). Developing accurate intramolecular force fields for conjugated systems through explicit coupling terms. *THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS* (ISSN: 1432881X). 137(6): 80. DOI: 10.1007/s00214-018-2254-8

21. Choubane, H.; Garrido-Castro, AF., Alvarado, C.; Martín-Somer, A.; Guerrero-Corella, A.; Daaou, M.; Díaz-Tendero, S.; Carmen Maestro, M.; Fraile, A.; Alemán, J. (2018). Intramolecular hydrogen-bond activation for the addition of nucleophilic imines: 2-hydroxybenzophenone as a chemical auxiliary. *CHEMICAL COMMUNICATIONS* (ISSN: 13597345), 54(27), 3399-3402. DOI: 10.1039/C8CC01479E
22. Cirelli, C.; Marante, C.; Heuser, S.; Petersson, CLM.; Galán, ÁJ.; Argenti, L.; Zhong, S.; Busto, D.; Isinger, M.; Nandi, S.; Maclot, S.; Rading, L.; Johnsson, P.; Gisselbrecht, M.; Lucchini, M.; Gallmann, L.; Dahlström, JM.; Lindroth, E.; L'Huillier, A.; (2018). Anisotropic photoemission time delays close to a Fano resonance. *NATURE COMMUNICATIONS* (ISSN: 20411723). 9 (1) : 955-955. DOI: 10.1038/s41467-018-03009-1
23. Del Bene, J.; Alkorta, I.; Montero-Campillo, M.; Elguero, J. (2018). Using protonation to change a Cl...N halogen bond in N-Base:ClOH complexes to a Cl...O halogen bond. *CHEMICAL PHYSICS LETTERS* (ISSN: 00092614). 710123-128. DOI: 10.1016/j.cplett.2018.08.027
24. Duce, S.; Alonso, I.; Lamsabhi, A.; Rodrigo, E.; Morales, S.; García Ruano, J.; Poveda, A.; Mauleón, P.; Cid, M. (2018). The Acidity of a Carbon Nucleophile Dictates Enantioselectivity and Reactivity in Michael Additions to Aromatic and Aliphatic Enals via Iminium Activation. *ACS CATALYSIS* (ISSN: 21555435). 8 (1) : 22-34. DOI: 10.1021/acscatal.7b02806
25. Erdmann, E.; Labuda, M.; Aguirre, N.; Díaz-Tendero, S.; Alcamí, M. (2018). Furan Fragmentation in the Gas Phase: New Insights from Statistical and Molecular Dynamics Calculations. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A* (ISSN: 00223654). 122 (16) : 4153-4166. DOI: 10.1021/acs.jpca.8b00881
26. Esseffar, M.; Parish, C.; Jalal, R.; Lamsabhi, A. (2018). A Computational Study of the Reactivity of 3,5-(Oxo/Thioxo) Derivatives of 2,7-Dimethyl-1,2,4-Triazepines. Keto-Enol Tautomerization and Potential for Hydrogen Storage. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A* (ISSN: 00223654). 122 (11) : 3076-3086. DOI: 10.1021/acs.jpca.8b00251
27. Esteban, F.; Cieslik, W.; Arpa, E.; Guerrero-Corella, A.; Díaz-Tendero, S.; Perles, J.; Fernández-Salas, J.; Fraile, A.; Alemán, J. (2018). Intramolecular Hydrogen Bond Activation: Thiourea-Organocatalyzed Enantioselective 1,3-Dipolar Cycloaddition of Salicylaldehyde-Derived Azomethine Ylides with Nitroalkenes. *ACS CATALYSIS* (ISSN: 21555435). 8 (3) : 1884-1890. DOI: 10.1021/acscatal.7b03553
28. Galván, I.; Cerezo, J.; Jorge, A.; Wakamatsu, K. (2018). Molecular vibration as a novel explanatory mechanism for the expression of animal colouration. *INTEGRATIVE BIOLOGY* (ISSN: 17579694 ). 10(8): 464-473. DOI: 10.1039/c8ib00100f
29. González, L.; Alcamí, M.; Martín, F. (2018). Tribute to Manuel Yáñez and Otilia Mó. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A* (ISSN: 00223654). 122(26): 5671-5672. DOI: 10.1021/acs.jpca.8b03669

30. Guerrero-Corella, A.; Esteban, F.; Iniesta, M.; Martín-Somer, A.; Parra, M.; Díaz-Tendero, S.; Fraile, A.; Alemán, J. (2018). 2-Hydroxybenzophenone as a Chemical Auxiliary for the Activation of Ketiminoesters for Highly Enantioselective Addition to Nitroalkenes under Bifunctional Catalysis. *ANGEWANDTE CHEMIE (INTERNATIONAL ED. IN ENGLISH)* (ISSN: 15213773). 57(19): 5350-5354. DOI: 10.1002/anie.201800435
31. Holzmeier, F.; Bello, R.; Hervé, M.; Achner, A.; Baumann, T.; Meyer, M.; Finetti, P.; Di Fraia, M.; Gauthier, D.; Roussel, E.; Plekan, O.; Richter, R.; Prince, K.; Callegari, C.; Bachau, H.; Palacios, A.; Martín, F.; Doweck, D. (2018). Control of H<sub>2</sub> Dissociative Ionization in the Nonlinear Regime Using Vacuum Ultraviolet Free-Electron Laser Pulses. *PHYSICAL REVIEW LETTERS* (ISSN: 00319007). 121(10): 103002. DOI: 10.1103/PhysRevLett.121.103002
32. IdBarkach, T.; Mahajan, T.; Chabot, M.; Béroff, K.; Aguirre, N.; Díaz-Tendero, S.; Launoy, T.; Padellec, A.; Perrot, L.; Bonnin, M.; Le, K.; Geslin, F.; de Sérévillle, N.; Hammache, F.; Jallat, A.; Meyer, A.; Charon, E.; Pino, T.; Hamelin, T.; Wakelam, V. (2018). Semiempirical breakdown curves of C<sub>2</sub>N<sup>(+)</sup> and C<sub>3</sub>N<sup>(+)</sup> molecules; application to products branching ratios predictions of physical and chemical processes involving these adducts. *MOLECULAR ASTROPHYSICS* (ISSN: 24056758). 12, 25-32. DOI: 10.1016/j.molap.2018.06.003
33. Jelovina, D.; Feist, J.; Martín, F.; Palacios, A. (2018). A pump-probe scheme with a single chirped pulse to image electron and nuclear dynamics in molecules. *NEW JOURNAL OF PHYSICS* (ISSN: 13672630). 20(12): 123004. DOI: 10.1088/1367-2630/aaf196
34. Jing, Q.; Bello, R.Y.; Martín, F.; Palacios, A.; Madsen, L.B. (2018). Monte Carlo wave-packet approach to trace nuclear dynamics in molecular excited states by XUV-pump-IR-probe spectroscopy. *PHYSICAL REVIEW A* (ISSN: 10502947). 97 (4) : 043426. DOI: 10.1103/PhysRevA.97.043426
35. Jorge, A.; Illescas, C.; Méndez, L.; Rabadán, I. (2018). Ionization and Single and Double Electron Capture in Proton-Ar Collisions. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A* (ISSN: 00223654), 122(9), 2523-2534. DOI: 10.1021/acs.jpca.7b11769
36. Klinker, M.; Marante, C.; Argenti, L.; González-Vázquez, J.; Martín, F. (2018). Partial cross sections and interfering resonances in photoionization of molecular nitrogen. *PHYSICAL REVIEW A* (ISSN: 10502947). 98(3): 033413. DOI: 10.1103/PhysRevA.98.033413
37. Klinker, M.; Marante, C.; Argenti, L.; González-Vázquez, J.; Martín, F. (2018). Electron Correlation in the Ionization Continuum of Molecules: Photoionization of N<sub>2</sub> in the Vicinity of the Hopfield Series of Autoionizing States. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS* (ISSN: 19487185), 9(4): 756-762. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.7b03220
38. Krim, L.; Jonusas, M.; Guillemin, J.; Yáñez, M.; Lamsabhi, A. (2018). Reduction of CO functional groups through H addition reactions a comparative study between H<sub>2</sub>CO + H,

CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CHO + H and CH<sub>3</sub>OCHO + H under interstellar conditions. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS (ISSN: 14639076). 20(30): 19971-19978. DOI: 10.1039/c8cp03249a

39. Laina-Martín, V.; Del Río-Rodríguez, R.; Díaz-Tendero, S.; Fernández-Salas, JA.; Alemán, J. (2018). Asymmetric synthesis of Rauhut-Currier-type esters via Mukaiyama-Michael reaction to acylphosphonates under bifunctional catalysis. CHEMICAL COMMUNICATIONS (ISSN: 13597345). 54(99): 13941-13944. DOI: 10.1039/c8cc07561a

40. Lara-Astiaso, M.; Galli, M.; Trabattoni, A.; Palacios, A.; Ayuso, D.; Frassetto, F.; Poletto, L.; De Camillis, S.; Greenwood, J.; Decleva, P.; Tavernelli, I.; Calegari, F.; Nisoli, M.; Martín, F. (2018). Attosecond Pump-Probe Spectroscopy of Charge Dynamics in Tryptophan. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS (ISSN: 19487185). 9(16): 4570-4577. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.8b01786

41. Liu, Y.; Cerezo, J.; Lin, Na; Zhao, X.; Improta, R.; Santoro, F. (2018). Comparison of the results of a mean-field mixed quantum/classical method with full quantum predictions for nonadiabatic dynamics: application to the pi pi/n pi\* decay of. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS (ISSN: 1432881X). 137(3): 40. DOI: 10.1007/s00214-018-2218-z

42. Liu, Y.; Martínez-Fernández, L.; Cerezo, J.; Prampolini, G.; Improta, R.; Santoro, F. (2018). Multistate coupled quantum dynamics of photoexcited cytosine in gas-phase: Nonadiabatic absorption spectrum and ultrafast internal conversions. CHEMICAL PHYSICS (ISSN: 03010104). 515452-463. DOI: 10.1016/j.chemphys.2018.08.030

43. Marggi Poullain, S.; Chicharro, DV.; Navarro, E.; Rubio-Lago, L.; González-Vázquez, J.; Bañares, L. (2018). Photodissociation dynamics of bromiodomethane from the first and second absorption bands. A combined velocity map and slice imaging study. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS (ISSN: 14639076), 20 (5): 3490-3503. DOI: 10.1039/c7cp07077b

44. Martín, L.; Bello, RY.; Hogle, CW.; Palacios, A.; Tong, XM.; Sanz-Vicario, JL.; Jahnke, T.; Schoeffler, M.; Doerner, R.; Weber, Th; Martín, F.; Kapteyn, HC.; Murnane, MM.; Ranitovic, P. (2018). Revealing the role of electron-electron correlations by mapping dissociation of highly excited D-2(+) using ultrashort XUV pulses. PHYSICAL REVIEW A (ISSN: 10502947). 97 (6) : 062508. DOI: 10.1103/PhysRevA.97.062508

45. Martínez-Fernández, L.; Prampolini, G.; Cerezo, J.; Liu, Y.; Santoro, F.; Improta, R. (2018). Solvent effect on the energetics of proton coupled electron transfer in guanine-cytosine pair in chloroform by mixed explicit and implicit solvation models. CHEMICAL PHYSICS (ISSN: 03010104). 515493-501. DOI: 10.1016/j.chemphys.2018.07.012

46. Martín-Fernández, C.; Montero-Campillo, M.; Alkorta, I.; Elguero J. (2018). Weak interactions and cooperativity effects on disiloxane: a look at the building block of silicones. MOLECULAR PHYSICS (ISSN: 00268976), 116 (12): 1539-1550. DOI: 10.1080/00268976.2018.1433337

47. Martín-Fernández, C.; Montero-Campillo, MM.; Alkorta, I.; Yáñez, M.; Mó, O.; Elguero, J. (2018). Large Proton Affinity Enhancements Triggered by Non-Covalent Interactions. CHEMISTRY - A EUROPEAN JOURNAL (ISSN: 09476539), 24 (8): 1971-1977. DOI: 10.1002/chem.201705047
48. Martín-Somer, A.; Martens, J.; Grzetic, J.; Hase, WL.; Oomens, J.; Spezia, R. (2018). Unimolecular Fragmentation of Deprotonated Diproline [Pro<sup>2</sup>-H]-Studied by Chemical Dynamics Simulations and IRMPD Spectroscopy. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A (ISSN: 00223654), 122(10), 2612-2625. DOI: 10.1021/acs.jpca.7b11873
49. Merced Montero-Campillo, M.; Sanz, P.; Mo, O.; Yanez, M.; Alkorta, I.; Elguero, J. (2018). Alkaline-earth (Be, Mg and Ca) bonds at the origin of huge acidity enhancements. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS (ISSN: 14639076). 20 (4) : 2413-2420. DOI: 10.1039/c7cp07891a
50. Micciarelli, M.; Conte, R.; Suárez, J.; Ceotto, M. (2018). Anharmonic vibrational eigenfunctions and infrared spectra from semiclassical molecular dynamics. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS (ISSN: 00219606). 149(6): 064115. DOI: 10.1063/1.5041911
51. Mó, O.; Yáñez, M. (2018). Autobiographies of Manuel Yáñez and Otilia Mó. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A (ISSN: 00223654). 122(26): 5673-5678. DOI: 10.1021/acs.jpca.8b01395
52. Mó, O.; Yáñez, M. (2018). Publications of Manuel Yáñez and Otilia Mó. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A (ISSN: 00223654). 122(26): 5681-5697. DOI: 10.1021/acs.jpca.8b03863
53. Mó, O.; Yáñez, M. (2018). Students and Collaborators of Manuel Yáñez and Otilia Mó. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A (ISSN: 00223654). 122(26): 5679-5680. DOI: 10.1021/acs.jpca.8b01625
54. Montero-Campillo, M.; Alkorta, I.; Elguero, J. (2018). Binding indirect greenhouse gases OCS and CS<sub>2</sub> by nitrogen heterocyclic carbenes (NHCs). PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS (ISSN: 14639076). 20(29): 19552-19559. DOI: 10.1039/c8cp03217c
55. Montero-Campillo, M.; Alkorta, I.; Elguero, J. (2018). Fostering the Basic Instinct of Boron in Boron-Beryllium Interactions. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A (ISSN: 00223654). 122 (12) : 3313-3319. DOI: 10.1021/acs.jpca.8b01551
56. Montero-Campillo, M.; Brea, O.; Mó, O.; Alkorta, I.; Elguero, J.; Yáñez, M. (2018). Insólitos cambios en la reactividad intrínseca de las moléculas provocados por interacciones no covalentes. ANALES DE QUÍMICA (ISSN: 11302283). 114 (4) : 241-248.
57. Montero-Campillo, MM.; Mó, O.; Yáñez, M.; Alkorta, I.; Elguero, J. (2018). Be- and Mg-Based Electron and Anion Sponges. CHEMPHYSICHEM (ISSN: 14394235), 19(14), 1701-1706. DOI: 10.1002/cphc.201800292
58. Montero-Campillo, MM; Alkorta, I.; Elguero, J. (2018). Enhancement of Thermodynamic Gas-Phase Acidity and Basicity of Water by Means of Secondary

Interactions. CHEMPHYSICHEM (ISSN: 14394235). 19(19): 2486-2491. DOI: 10.1002/cphc.201800518

59. Moonshiram, D.; Garrido-Barros, P.; Gimbert-Suriñach, C.; Picón, A.; Liu, C.; Zhang, X.; Karnahl, M.; Llobet, A. (2018). Elucidating the Nature of the Excited State of a Heteroleptic Copper Photosensitizer by using Time-Resolved X-ray Absorption Spectroscopy. CHEMISTRY - A EUROPEAN JOURNAL (ISSN: 09476539). 24 (24) : 6464-6472. DOI: 10.1002/chem.201800330

60. Moral, O.; Call, A.; Franco, F.; Moya, A.; Nieto-Rodríguez, J.; Frías, M.; Fierro, J.; Costas, M.; Lloret-Fillol, J.; Alemán, J.; Mas-Ballesté, R. (2018). Bioinspired Electro-Organocatalytic Material Efficient for Hydrogen Production. CHEMISTRY - A EUROPEAN JOURNAL (ISSN: 09476539), 24(13), 3305-3313. DOI: 10.1002/chem.201705655

61. Mori-Sánchez, P; Cohen, A. (2018). Exact Density Functional Obtained via the Levy Constrained Search. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS (ISSN: 19487185). 9(17): 4910-4914. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.8b02332

62. Murillo-Sánchez, M.; Poullain, S.; Bajo, J.; Corrales, M.; González-Vázquez, J.; Solá, I.; Bañares, L. (2018). Halogen-atom effect on the ultrafast photodissociation dynamics of the dihalomethanes CH<sub>2</sub>Cl and CH<sub>2</sub>BrI. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS (ISSN: 14639076). 20(32): 20766-20778. DOI: 10.1039/c8cp03600d

63. Navarro, J.; Pizarra, M.; Nieto-Ortega, B.; Villalva, J.; Ayani, C.; Díaz, C.; Calleja, F.; Miranda, R.; Martín, F.; Pérez, E.; Vázquez de Parga, AL. (2018). Graphene catalyzes the reversible formation of a C–C bond between two molecules. SCIENCE ADVANCES (ISSN: 23752548). 4 (12) : EAAU9366. DOI: 10.1126/sciadv.aau9366

64. Pacile, D.; Eremeev, SV.; Caputo, M.; Pizarra, M.; De Luca, O.; Grimaldi, I.; Fujii, J.; Aliev, Z. S.; Babanly, MB.; Vobornik, I.; Agostino, RG.; Goldoni, A.; Chulkov, V.; Papagno, M. (2018). Deep Insight Into the Electronic Structure of Ternary Topological Insulators: A Comparative Study of PbBi<sub>4</sub>Te<sub>7</sub> and PbBi<sub>6</sub>Te<sub>10</sub>. PHYSICA STATUS SOLIDI - RAPID RESEARCH LETTERS. (ISSN: 18626254). 12(12): 1800341. DOI: 10.1002/pssr.201800341

65. Párraga, H.; Arranz, FJ.; Benito, RM.; Borondo, F. (2018). Above Saddle-Point Regions of Order in a Sea of Chaos in the Vibrational Dynamics of KCN. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A (ISSN: 00223654). 122 (13) : 3433-3441. DOI: 10.1021/acs.jpca.8b00113

66. Picón, A.; Bostedt, C.; Hernández-García, C.; Plaja, L. (2018). Auger-induced charge migration. PHYSICAL REVIEW A (ISSN: 10502947). 98(4): 043433. DOI: 10.1103/PhysRevA.98.043433

67. Pizarra, M.; Bernardo-Gavito, R.; Navarro, J.; Black, A.; Díaz, C.; Calleja, F.; Granados, D.; Miranda, R.; Martín, F.; Vázquez de Parga, AL. (2018). Coverage evolution of the unoccupied Density of States in sulfur superstructures on Ru(0001). APPLIED SURFACE SCIENCE (ISSN: 01694332). 433 : 300-305. DOI: 10.1016/j.apsusc.2017.10.069

68. Pizarra, M.; Díaz, C.; Bernardo-Gavito, R.; Jesus Navarro, J.; Black, A.; Calleja, F.; Granados, D.; Miranda, R.; Vázquez de Parga, AL.; Martín, F. (2018). Electronic Properties

of Sulfur Covered Ru(0001) Surfaces. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A (ISSN: 00223654). 122 (8) : 2232-2240. DOI: 10.1021/acs.jpca.7b11586

69. Pla, P.; Wang, Y.; Alcamí, M. (2018). Simple bond patterns predict the stability of Diels-Alder adducts of empty fullerenes. CHEMICAL COMMUNICATIONS (ISSN: 13597345), 54 (33): 4156-4159. DOI: 10.1039/c8cc01709c

70. Plésiat, E.; Lara-Astiaso, M.; Decleva, P.; Palacios, A.; Martín, F. (2018). Real-Time Imaging of Ultrafast Charge Dynamics in Tetrafluoromethane from Attosecond Pump-Probe Photoelectron Spectroscopy. CHEMISTRY - A EUROPEAN JOURNAL (ISSN: 09476539), 24(46), 12061-12070. DOI: 10.1002/chem.201802788

71. Prado, Carlos A.; Carlo, Gabriel G.; Benito, R. M.; Borondo, F. (2018). Role of short periodic orbits in quantum maps with continuous openings. PHYSICAL REVIEW E (ISSN: 1063651X). 97(4), -1120. DOI: 10.1103/PhysRevE.97.042211

72. Ramírez-Jiménez, R.; Franco, M.; Rodrigo, E.; Sainz, R.; Ferritto, R.; Lamsabhi, A.; Aceña, J.; Cid, M. (2018). Unexpected reactivity of graphene oxide with DBU and DMF<sup>+</sup>. JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY A (ISSN: 09599428). 6 (26) : 12637-12646. DOI: 10.1039/c8ta03529f

73. Ramos, M.; Díaz, C.; Martínez, AE.; Martín, F.; Busnengo, HF. (2018). Thickness-Dependent Reactivity of O-2 on Cu Layers Grown on Ru(0001) Surfaces. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C (ISSN: 19327447). 122(27): 15529-15538. DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b04354

74. Revuelta, F.; Chacón, R.; Borondo, F. (2018). Dynamical localization in nonideal kicked rotors. PHYSICAL REVIEW E (ISSN: 1063651X). 98(6): 062202. DOI: 10.1103/PhysRevE.98.062202

75. Salpin, J.; Haldys, V.; Steinmetz, V.; León, E.; Yañez, M.; Montero-Campillo, M. (2018). Protonation of methyluracils in the gas phase: The particular case of 3-methyluracil. INTERNATIONAL JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY (ISSN: 13873806). 429 : 47-55. DOI: 10.1016/j.ijms.2017.05.004

76. Salpin, J.; Latrous, L.; Haldys, V.; Lamsabhi, A. (2018). Interactions of Dimethyltin(IV) with Uracil As Studied in the Gas Phase. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A (ISSN: 00223654). 122 (4) : 992-1003. DOI: 10.1021/acs.jpca.7b11510

77. Sanz, P.; Montero-Campillo, MM.; Mo, O.; Yanez, M.; Alkorta, I.; Elguero, J. (2018). Intramolecular magnesium bonds in malonaldehyde-like systems: a critical view of the resonance-assisted phenomena. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS (ISSN: 1432881X). 137 (7) : ARTN 97. DOI: 10.1007/s00214-018-2274-4

78. Sindona, A.; Cupolillo, A.; Alessandro, F.; Pisarra, M.; Coello Fiallos, D.C.; Osman, SM.; Caputi, LS. (2018). Interband pi-like plasmon in silicene grown on silver. PHYSICAL REVIEW B (ISSN: 01631829). 97 (4) : 041401. DOI: 10.1103/PhysRevB.97.041401

79. Sofikitis, D.; Suárez, J.; Schmidt, JA.; Rakitzis, TP.; Farantos, SC.; Janssen, MHM. (2018). Exit-channel recoil resonances by imaging the photodissociation of single quantum-state-selected OCS molecules. *PHYSICAL REVIEW A* (ISSN: 10502947). 98(3): 033417. DOI: 10.1103/PhysRevA.98.033417
80. Suárez, J.; Méndez, L.; Rabadán, I. (2018). Nonadiabatic fragmentation of H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> and isotopomers. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS* (ISSN: 14639076), 20 (45): 28511-28522. DOI: 10.1039/c8cp03725f
81. Suárez, N.; Chacón, A.; Pisanty, E.; Ortmann, L.; Landsman, AS.; Picon, A.; Biegert, J.; Lewenstein, M.; Ciappina, MF. (2018). Above-threshold ionization in multicenter molecules: The role of the initial state. *PHYSICAL REVIEW A* (ISSN: 10502947). 97 (3) : 033415. DOI: 10.1103/PhysRevA.97.033415
82. Villaverde, J.; Sandín-España, P.; Alonso-Prados, J.; Lamsabhi, A.; Alcamí, M. (2018). Computational Study of the Structure and Degradation Products of Alloxidim Herbicide. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A* (ISSN: 00223654). 122 (15) : 3909-3918. DOI: 10.1021/acs.jpca.8b00865
83. Villaverde, JJ.; Sandin-Espana, P.; Alonso-Prados, JL.; Lamsabhi, AM.; Alcamí, M. (2018). Pesticide byproducts formation: Theoretical study of the protonation of alloxidim degradation products. *COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY* (ISSN: 2210271X), 144: 11439-19. DOI: 10.1016/j.comptc.2018.08.006
84. Wang, Y. (2018). Maximum bonding fragment orbitals for deciphering complex chemical interactions. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS* (ISSN: 14639076). 20 (20) : 13792--13809. DOI: 10.1039/c8cp01808a
85. Wang, Y.; Díaz-Tendero, S.; Alcamí, M.; Martín, F. (2018). Topology-Based Approach to Predict Relative Stabilities of Charged and Functionalized Fullerenes. *JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION* (ISSN: 15499618), 14(3), 1791-1810. DOI: 10.1021/acs.jctc.7b01048
86. Zurrón, O.; Picon, A.; Plaja, L. (2018). Theory of high-order harmonic generation for gapless graphene. *NEW JOURNAL OF PHYSICS*. (ISSN: 13672630). 20(5): 053033. DOI: 10.1088/1367-2630/aabec7

## **OTRAS PUBLICACIONES**

### **Artículo de divulgación**

1. Alcamí Pertejo, Manuel ; Martín García, Fernando (2018). OTILIA MÓ Y MANUEL YÁÑEZ: Docentes, investigadores y promotores de la Química Teórica en España y Europa. *ENCUENTROS MULTIDISCIPLINARES* (ISSN: 11399325) 20(60) (SEGUNDO NÚMERO EXTRAORDINARIO).

### **Capítulos de Libro**

2. Díaz, C.; Wang, Y. and Martín, F. (2018). Including London Dispersion Forces in Density Functional Theory (DFT+D): Applications to Molecule(Atom)/Surface Phenomena.



ENCYCLOPEDIA OF INTERFACIAL CHEMISTRY: SURFACE SCIENCE AND ELECTROCHEMISTRY. EDITOR: KLAUS WANDEL. VOL. 4.1 : 75-83.

3. Palacios, A.; Sanz-Vicario, J.; Martín F. (2018). Theoretical Methods for Attosecond Coupled Electron-nuclear Dynamics in Molecular Photoionization. RSC THEORETICAL AND COMPUTATIONAL CHEMISTRY SERIES (ISSN: 20413181 ). 2018-JANUARY(13): 218-274. DOI: 10.1039/9781788012669-00218

#### Corrección

4. Waitz, M.; Bello, R. Y.; Metz, D.; Lower, J.; Trinter, F.; Schober, C.; Keiling, M.; Lenz, U.; Pitzer, M.; Mertens, K.; Martins, M.; Viefhaus, J.; Klumpp, S.; Weber, T.; Schmidt, L. Ph. H.; Williams, J. B.; Schoeffler, M. S.; Serov, V. V.; Kheifets, A. S. (2018). Imaging the square of the correlated two-electron wave function of a hydrogen molecule (vol 8, 2018). NATURE COMMUNICATIONS (ISSN: 20411723). 9 : ARTN 2259. DOI: 10.1038/s41467-018-04740-5

#### Meeting-Abstract

5. Mori-Sanchez, Paula; Cohen, Aron (2018). Calculating the Levy constrained search for the exact functional of density functional theory. ACS NATIONAL MEETING BOOK OF ABSTRACTS (ISSN: 00657727). 255.

6. Sindona A; Pisarra M; Falcone G; Gomez C; Mazzei F; Cistaro G; Bellucci S (2018). Plasmon properties of doped or gated graphene nanoribbon arrays with armchair shaped edges. 2017 IEEE MTT-S INTERNATIONAL MICROWAVE WORKSHOP SERIES ON ADVANCED MATERIALS AND PROCESSES FOR RF AND THZ APPLICATIONS, IMWS-AMP 2017 (ISBN: 9781538604809). 2018-JANUARY : 1-3. DOI: 10.1109/IMWS-AMP.2017.8247337

### 3.PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

El Departamento para 2018 ha tenido vigentes 25 proyectos de investigación.

**Relación de Proyectos de Investigación vigentes en 2018<sup>1</sup>.** Ordenación alfabética por título

#### 1. Cálculo de datos atómicos y moleculares fundamentales para la modelización del borde del plasma en iter

**Referencia:** ENE2014-52432-R

**Vigencia:** 2015 - 2018

**Investigadores:** Méndez Ambrosio, Luis (IP); Suárez Corujo, Jaime; Jorge Palacios, Alba María; Illescas Rojas, Clara Matilde; Rabadán Romero, Ismanuel; Errea Ruiz, Luis

**Entidades participantes:** Departamento de Química; Teoría de Colisiones Atómicas y Moleculares (Grupo)

**Financiador:** Programa Estatal de Fomento de la Investigación Científica y Técnica de Excelencia 2013-2016 (Programa Financiador competitivo); Ministerio de Economía y Competitividad

---

<sup>1</sup> En el apartado Financiador, hemos optado por unificar el nombre del Ministerio de Economía y Competitividad, ya que en estos años ha variado su nombre (Ministerio de Economía y Competitividad; Ministerio de Economía, Industria y Competitividad)

## 2. Caos cuántico y clásico en sistemas dinámicos y complejidad

Referencia: MTM2015-63914-P

Vigencia: 2016 - 2018

Investigadores: Borondo Rodríguez, Florentino

Entidades participantes: Departamento de Química; Caos Cuántico (Grupo)

Financiador: Ministerio de Economía y Competitividad

## 3. Captura de la dinámica electrónica correlacionada usando pulsos de attosegundos de frecuencia instantánea variable: una nueva estrategia

Referencia: FIS2017-92382-EXP

Vigencia: 2018 - 2019

Investigadores: Feist, Johannes Maximilian (IP); Palacios Cañas, Alicia

Entidades participantes: Departamento de Química; Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada

Financiador: Universidad Autónoma de Madrid

## 4. Cátedra UAM-FUJITSU en Computación Científica y Big Data

Referencia: FUAM 120600

Vigencia: 2014 - 2018

Investigadores: Martín García, Fernando (IP)

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

Financiador: Fundación Universidad Autónoma de Madrid

## 5. Computación en ciencia de attosegundos y de materiales

Referencia: PEJD-2016/IND-3217

Vigencia: 2017 - 2018

Investigadores: Martín García, Fernando (IP)

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

Financiador: Comunidad Autónoma de Madrid

## 6. Computación en Ciencia de Attosegundos y de materiales: Afrontando los nuevos retos de la física y la química actuales

Referencia: FIS2016-77889-R

Vigencia: 2016 - 2019

Investigadores: Martín García, Fernando (IP1); Palacios Cañas, Alicia (IP2); Díaz Blanco, Cristina; Corral Pérez, Inés; González Vázquez, Jesús; Wang, Yang

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

Financiador: Ministerio de Economía y Competitividad

## 7. Computación en ciencia de attosegundos y de materiales: afrontando los nuevos retos de la física y la química actuales

Referencia: UAM/086

Vigencia: 2017 - 2020

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

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

Financiador: Universidad Autónoma de Madrid

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

Referencia: FIS2017-84684-R

Vigencia: 2018 - 2020

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

Entidades participantes: Departamento de Química; Teoría de Colisiones Atómicas y

Moleculares (Grupo); Teoría de Colisiones Atómicas y Moleculares (Grupo)  
**Financiador:** Ministerio de Economía y Competitividad

**9. Disociación homolítica de enlaces O-H: Aplicaciones prácticas e implicaciones en Química, Física y Bioquímica**

**Referencia:** P12-FQM-790

**Vigencia:** 2014 - 2019

**Investigadores:** Marcos Laguna, María Luisa

**Entidades participantes:** Departamento de Química

**Financiador:** Universidad de Granada

**10. Erasmus+ Master "Theoretical Chemistry and Computational Modelling"**

**Referencia:** EMJMD-EPQR – 2015 – 1694

**Vigencia:** 2015 - 2019

**Investigadores:** Yáñez Montero, Manuel (IP)

**Entidades participantes:** Departamento de Química; Estructura Molecular y Reactividad Química (Grupo)

**Financiador:** Comisión Europea - Education, Audiovisual and Culture Executive Agency

**11. European Joint Doctorate "Theoretical Chemistry and Computational Modelling"**

**Referencia:** ITN-EJD GA 642294-TCCM

**Vigencia:** 2015 - 2018

**Investigadores:** Yáñez Montero, Manuel (IP); Martín García, F; Corral Pérez, Inés; Alcamí Pertejo

**Entidades participantes:** Departamento de Química; Física Atómica y Molecular de Sistemas no Ligados (Grupo); Estructura Molecular y Reactividad Química (Grupo)

**Financiador:** Comisión Europea

**12. Imaging-xchem: a computational package for ultrafast electronic control of chemistry**

**Referencia:** ERC-PoC-GA 780284

**Vigencia:** 2017 - 2019

**Investigadores:** Martín García, Fernando (IP); González Vázquez, Jesús; Klinker, Markus; Plésiat, Etienne; Corral Pérez, Inés; Argenti, Luca; Marante Valdés, Carlos Antonio

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

**Financiador:** European Research Council

**13. IMDEA Nanociencia. Apoyo a Centros de Excelencia Severo Ochoa**

**Referencia:** SEV-2016-0686

**Vigencia:** 2017 - 2021

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

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

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

**14. International Associated Laboratory on "Fragmentation DYNAMics of complex Molecular systems**

**Referencia:** LIA-DYNAMICS

**Vigencia:** 2013 - 2020

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

**Entidades participantes:** Departamento de Química

**Financiador:** Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS)

**15. Materiales avanzados de carbono para fotovoltaica molecular (FOTOCARBON)**

**Referencia:** S2013/MIT-2841

**Vigencia:** 2014 - 2018

**Investigadores:** Yáñez Montero, Manuel (IP); Torres Cebada, Tomas (IP); Marcos Laguna, María Luisa; Arslançan, Serra; Oriana Brea Noriega; Lamsabhi, Al Mokhtar; Montero Campillo, M<sup>a</sup> de

la Merced; Mo Romero, Otilia; Corral Pérez, Inés; Aljarilla Jiménez, Ana Isabel; Escosu  
**Entidades participantes:** Departamento de Química; Departamento de Química Orgánica; Ftalocianinas, Nanociencia y Materiales Moleculares (Grupo); Estructura Molecular y Reactividad Química (Grupo)  
**Financiador:** Comunidad Autónoma de Madrid

**16. Materiales metal-orgánicos bioinspirados e inteligentes con comportamiento estímulo-respuesta**

**Referencia:** MAT2016-75883-C2-2-P **Vigencia:** 2016 - 2019  
**Investigadores:** Amo Ochoa, María Pilar (IP); García Vegas, Verónica; Conesa Egea, Javier; Moreno Barahona, Consuelo; Marcos Laguna, María Luisa; Delgado Gil, Salome  
**Entidades participantes:** Departamento de Química; Departamento de Química Inorgánica; Nanomateriales de Baja Dimensionalidad (Grupo); Metales de Transición en Química de Clusters y Supramolecular (Grupo)  
**Financiador:** Ministerio de Economía y Competitividad

**17. Modificación de la reactividad y diseño de nuevos materiales mediante enlaces de Berilio y otras interacciones no-covalentes**

**Referencia:** CTQ2015-63997-C2-1-P **Vigencia:** 2016 - 2019  
**Investigadores:** Yáñez Montero, Manuel (IP); Arlanscan, Serra; Brea Noriega, Oriana; Corral Pérez, Inés; Lamsabhi, Al Mokhtar; Mo Romero, Otilia  
**Entidades participantes:** Departamento de Química; Estructura Molecular y Reactividad Química (Grupo)  
**Financiador:** Ministerio de Economía y Competitividad

**18. Molecular Electron Dynamics investigated by Intense Fields and Attosecond Pulses (MEDEA)**

**Referencia:** MSCA-ITN-ETN, GA 641789 **Vigencia:** 2015 - 2018  
**Investigadores:** Sansone, G. (IP); Martín García, Fernando  
**Entidades participantes:** Departamento de Química; Física Atómica y Molecular de Sistemas no Ligados (Grupo)  
**Financiador:** European Commission. Innovative Training Network (ITN). Programme Horizon 2020.

**19. Nuevas fronteras del nanomagnetismo fundamental y aplicado. NANOFRONTMAG**

**Referencia:** P2013/MIT-2850 **Vigencia:** 2014 - 2018  
**Investigadores:** Miranda Soriano, Rodolfo (IP); Agrait de la Puente, Nicolás; Suderow Rodríguez, Hermann; Ramos Ruíz, Miguel Ángel; Guillamón Gómez, Isabel; Vieira Días, Sebastián; Álvarez Alonso, Jesús; De Miguel Ilorete, Juan José; Farías Tejerina, Daniel; Fernández Cu  
**Entidades participantes:** Departamento de Química; Departamento de Física de la Materia Condensada; Magnetotransporte (Grupo); Física Atómica y Molecular de Sistemas no Ligados (Grupo); Electrónica Unimolecular (Grupo); Bajas Temperatura  
**Financiador:** Comunidad Autónoma de Madrid

**20. Proyecto ITN-JD en química teórica orientada al diseño molecular**

**Referencia:** EUIN2017-87323 **Vigencia:** 2017 - 2018  
**Investigadores:** Alcami Pertejo, Manuel (IP); Yáñez Montero, Manuel; Mo Romero, Otilia; Palacios Cañas, Alicia; Díaz Blanco, Cristina; Martín García, Fernando; González Vázquez, Jesús  
**Entidades participantes:** Departamento de Química; Modelización de Fullerenos y Nanotubos (Grupo)  
**Financiador:** Ministerio de Economía y Competitividad

#### 21. Red temática sobre Dinámica, Tractores, No lineal. Caos y estabilidad

Referencia: MTM2016-81902-REDT

Vigencia: 2017 - 2019

Investigadores: Borondo Rodríguez, Florentino

Entidades participantes: Departamento de Química. Caos Cuántico (Grupo)

Financiador: Ministerio de Economía, Industria y Competitividad

#### 22. Sistemas moleculares complejos en condiciones atípicas: ionización y excitación de moléculas, agregados y materiales híbridos

Referencia: CTQ2016-76061-P

Vigencia: 2016 - 2019

Investigadores: Alcami Pertejo, Manuel (IP); Díaz-Tendero Victoria, Sergio (IP2)

Entidades participantes: Departamento de Química; Modelización de Fullerenos y Nanotubos (Grupo)

Financiador: Ministerio de Economía y Competitividad

#### 23. Stability and transitions in physical processes - TRAX

Referencia: GA 734557

Vigencia: 2017 - 2021

Investigadores: Borondo Rodríguez, Florentino (IP)

Entidades participantes: Departamento de Química; Caos Cuántico (Grupo)

Financiador: Comisión Europea

#### 24. Transferencia de energía y electrones en materiales solidos luminiscentes activados por lantanidos multivalentes

Referencia: MAT2017-83553-P

Vigencia: 2018 - 2021

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

Entidades participantes: Departamento de Química Física Aplicada; Departamento de Química; Química Cuántica de Estado Sólido (Grupo)

Financiador: Ministerio de Economía y Competitividad

#### 25. Ultrahigh pressure chemistry at the nanoscale

Referencia: MDM-2014-0377.

Vigencia: 2017 - 2019

Investigadores: Gómez Herrero, Julio (IP); Segovia Cabrero, María Pilar; Farias Tejerina, Daniel; García Michel, Enrique; Martín García, Fernando; Zamora Abanades, Félix Juan

Entidades participantes: Departamento de Química; Departamento de Química Inorgánica; Departamento de Física de la Materia Condensada; Nanomateriales de Baja Dimensionalidad (Grupo); Física Atómica y Molecular de Sistemas no Ligados (Grupo); Estructura Electrónica de Superficies e Interfases (Grupo)

Financiador: Universidad Autónoma de Madrid

## 4. TESIS DOCTORALES

En 2018, se han defendido 3 tesis doctorales en el departamento

**Relación de Tesis doctorales** - Ordenación alfabética por título

### 1. Attosecond spectroscopy of ultrafast charge dynamics in biomolecules

Autoría: Lara Astiaso, Manuel

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

<http://hdl.handle.net/10486/686511>

*Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional*

## 2. Dynamics of charged biomolecules: Fragmentation, molecular growth and solvation=Dinámica de biomoléculas cargadas: fragmentación, crecimiento molecular y solvatación

Autoría: d'Angelo, Giovanna

Dirigida por: Alcamí Pertejo, Manuel; Fernandes, Pedro Alexandrino

<http://hdl.handle.net/10486/686675>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

## 3. Influence of purine and pyrimidine functionalization on the photostability and photoreactivity of DNA and RNA nucleobase derivatives

Autoría: Arslançan, Serra

Dirigida por: Corral Pérez, Inés

<http://hdl.handle.net/10486/684256>

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

## 6.PDI PERMANENTE DEL DEPARTAMENTO

### Relación de investigadores del Departamento de Química, tenidos en cuenta para la Memoria de Investigación de 2018.

ALCAMI PERTEJO, M.	<a href="https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-259527">https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-259527</a>
BARANDIARAN PIEDRA, Z.	<a href="https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-259553">https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-259553</a>
BORONDO RODRIGUEZ, F.	<a href="https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-260097">https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-260097</a>
DIAZ-TENDERO VICTORIA, S.	<a href="https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-262857">https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-262857</a>
ERREA RUIZ, L.	<a href="https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-259727">https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-259727</a>
ILLESCAS ROJAS, C.M.	<a href="https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-258663">https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-258663</a>
LAMSABHI , A.M.	<a href="https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-279708">https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-279708</a>
MARCOS LAGUNA, M.L.	<a href="https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-261507">https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-261507</a>
MARTIN GARCIA, F.	<a href="https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-260298">https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-260298</a>
MENDEZ AMBROSIO, L.	<a href="https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-261510">https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-261510</a>
MORI SANCHEZ, P.	<a href="https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-264490">https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-264490</a>
RABADAN ROMERO, I.	<a href="https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-260037">https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-260037</a>
SEIJO LOCHE, L.I.	<a href="https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-261529">https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-261529</a>
YAÑEZ MONTERO, M.	<a href="https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-258992">https://portalcientifico.uam.es/ipublic/agent-personal/profile/iMarinaID/04-258992</a>



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