

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 féreos”
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 CF_3Br con un láser Tea de 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^a 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: H₂O, D₂O, HDO, (CO₂)₂ y (N₂)₂”
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: H₂/Pd (111) y H₂/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-H₂”
 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 H₂ molecules from the NiAl(1110) surface”
 Director: Fernando Martín García

- **Alicia Palacios Cañas**
 “Ionización y disociación de H₂ y H₂⁺ 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 Cs₂NaYCl₆:Ln³⁺. Luminiscencia, estados localizados y excitones atrapados en Cs₂GeF₆:U⁴⁺"
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 U³⁺ y otros iones de elementos f en las configuraciones F_n F_n-1 D₁ y F_n-1 S₁ en Cs₂NaYCl₆.
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 C₄, C₅ y C₆".
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 H₂, HeH⁺ and H₂⁺ 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 H₂ 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 H₂O + A^{q+} y CO + C²⁺”

Directores: Luis F. Errea Ruiz e Ismanuel Rabadán Romero

- **Goar Sánchez Sanz**

“Estudio teórico ab initio de lantánidos pesados en sólidos: Yb²⁺ en haluros”

Directora: Zoila Barandiarán Piedra

- **M^a 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^a 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 N₂ 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 Martin García y Alicia Palacios Cañas
 - **Denis Jelovina**
“A full dimensional Discrete Variable Representation of H₂⁺ and H₂ photoionization”
Directores: Fernando Martin García y Alicia Palacios Cañas
 - **Daniel José Arizmendi Arrieta**
“Simulations of aqueous systems: from gas to the condensed phase”
Directora: Rita Prosmiiti
Tutor: Manuel Alcamí Pertejo

Año 2018

- **Serra Arslançan**
“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

- **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
- **Marcos del Cueto Cordones**
"Diffraction studies of atoms and molecules from surfaces using DFT-based potential energy surfaces"
Director: Cristina Díaz Banco y Fernando Martín García

Año 2020

- **Enrique Manuel Arpa González**
"Photophysics and photochemistry of small biomolecules"
Directora: Inés Corral Pérez

Año 2021

- **Paula Pla Terrada**
"Stability, reactivity and infrared spectra of carbonaceous molecules: from organic chemistry to astrophysics"

Directores: Manuel Alcamí Pertejo y Yang Wang

- **Arturo Sopena Moros**

“Study of relativistic effects in non-linear interaction between molecules and XUV/soft X-ray short laser pulses”

Directores: Fernando Martín García y Henri Bachau

Codirectores: Alicia Palacios Cañas y Fabrice Catoire

- **Ransel Barzaga Guzmán**

“Computational Study of the Adsorption of Molecules on Metal Surfaces. Characterization of Metal-Thiourea Derivatives Interactions”

Directores: Sergio Díaz-Tendero Victoria y Mayra P. Hernández Sánchez

Año 2022

- **Giovanni Consalvo Cistaro**

“Attosecond spectroscopy in the x-ray regime in complex systems”

Directores: Antonio Picón Alvarez y Fernando Martín García

- **Luz Adriana Cabrera Ramírez**

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

Directora: Aristera Prosmi

Tutor: Manuel Alcamí Pertejo

- **Raul Rodríguez Segundo**

“Development of scientific software and research in Aqueous Molecular Systems with environmental and energy impact”

Directora: Aristera Prosmi

Tutor: Manuel Alcamí Pertejo

- **Dmytro Ivashchenko**

“Improvement of methods for the structural characterisation of drug metabolites

based on collisional cross sections”

Directores: Alexandre Lopes de Magalhães e Inés Corral Pérez

- **Juan José Villaverde Mella**

“In silico tools used for the prediction of the environmental risk of pesticides under the EU legislation”

Directores: Pilar Sandín España y Al Mokhtar Lamsabhi

- **Gustavo Adolfo Cárdenas**

“Modeling the Interactions of Anticancer Compounds with DNA and Lipid Membranes”

Director: Juan José Nogueira Pérez

- **Eva Vos Esteban**

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

Directores: Inés Corral Pérez y Jesús González Vázquez

Año 2023

- **Darío Barreiro Lage**

“Design of computational strategies for the study of photo-induced reactivity in molecular clusters”

Director: Sergio Díaz-Tendero Victoria

- **Josep Vicent Borrás de Llano**

“Attosecond ionization dynamics of CO and N₂ in the vicinity of Feshbach resonances”

Directores: Jesús González Vázquez y Fernando Martín García

- **Pedro Fernández Milán**

“Photoionization of polyatomic molecules in the region of Feshbach resonances and beyond”

Directores: Jesús González Vázquez y Fernando Martín García

