



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

Curriculum vitae

Nombre: **Francisco Javier Aoiz Molerés**

Fecha: 10 enero 2019

Apellidos: AOIZ MOLERES

Nombre: FRANCISCO JAVIER

Situación profesional actual

Organismo: UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

Facultad, Escuela o Instituto: CIENCIAS QUIMICAS

Depto./Secc./Unidad estr.: QUIMICA FISICA I

Dirección postal: Ciudad Universitaria s/n, 28040 Madrid

Teléfono (indicar prefijo, número y extensión): 913944126

Fax: 913944135

Correo electrónico: aoiz@quim.ucm.es

Especialización (Códigos UNESCO): 2206,2210,220605,220607-1

Categoría profesional: Catedrático de Universidad

Fecha de inicio: 5 de junio de 2000

Situación administrativa

Plantilla

Contratado

Interino

Becario

Otras situaciones especificar:

Dedicación

A tiempo completo

A tiempo parcial

Líneas de investigación

Breve descripción, por medio de palabras claves, de la especialización y líneas de investigación actuales.

Dinámica molecular de las reacciones químicas. Espectroscopía láser. Haces moleculares. Método de trayectorias cuasiclásicas. Métodos mecanocuánticos de dispersión reactiva.

Formación Académica

Titulación Superior	Centro	Fecha
Ciencias Químicas	Universidad Complutense de Madrid	Junio 1976
Reválida de Grado con Tesina de Licenciatura	Universidad Complutense de Madrid	Enero 1977

Doctorado	Centro	Fecha
Ciencias Químicas	Universidad Complutense de Madrid	Marzo 1981

Actividades anteriores de carácter científico profesional

Puesto	Institución	Fechas
Profesor Ayudante contratado	Universidad Complutense de Madrid	1976-1980
Associated Researcher y Becario Fulbright/MEC	Columbia University	1981-1982
Profesor Encargado de curso	Universidad Complutense de Madrid	1983
Profesor Ayudante	Universidad Complutense de Madrid	1983-1984
Profesor Titular de Universidad	Universidad Complutense de Madrid	1984-2000
Profesor visitante	Universidad de Oxford	2005-2006

Idiomas (R = regular, B = bien, C = correctamente)

Idioma	Habla	Lee	Escribe
Inglés	C	C	C
Francés	R	C	B

Participación en Proyectos de I+D financiados en Convocatorias públicas.

(nacionales y/o internacionales)

Título del proyecto: Estudio experimental de colisiones atómico moleculares. PB78/2771

Entidad financiadora: C.A.I.C.Y.T.

Entidades participantes: UCM

Duración, desde: 1979 hasta: 1982 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Angel González Ureña

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Reaction dynamics with lasers and molecular beams. CHE-81-16386 y CHE-77-11384

Entidad financiadora: National Science Foundation. EE.UU

Entidades participantes: Columbia University

Duración, desde: 1980 hasta: 1983 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Prof. R. B. Bernstein

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Reacciones químicas con especies excitadas. Fluorescencia inducida por láser. PB81/963.

Entidad financiadora: C.A.I.C.Y.T.

Entidades participantes: UCM

Duración, desde: 1983 hasta: 1986 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Angel González Ureña

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Subvención a grupos investigadores de reciente creación.

Entidad financiadora: C.A.I.C.Y.T.

Entidades participantes: UCM

Duración, desde: Enero 1987 hasta: Junio 1988 Cuantía de la subvención: 1.5 Mptas

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes: 1

Título del proyecto: Experimentos con haces moleculares. Estudio de reacciones químicas por ionización superficial, quimiluminiscencia y fluorescencia inducida por láser. PB85/007

Entidad financiadora: C.A.I.C.Y.T.

Entidades participantes: UCM

Duración, desde: 1987 hasta: 1988 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Angel González Ureña

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Espectroscopía Láser-Raman coherente e IR por diferencia de frecuencias ópticas: Estudio de moléculas y complejos débilmente ligados en haces moleculares. PB87/0263

Entidad financiadora: C.I.C.Y.T.

Entidades participantes: CSIC, Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: Junio 1988 hasta: Junio 1990 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Dionisio Bermejo Plaza

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Espectroscopía de ionización multifotónica con espectrómetro de masas de tiempo de vuelo. OP89/0150

Entidad financiadora: C.I.C.Y.T.

Entidades participantes: UCM

Duración, desde: Abril 1990 hasta: Cuantía de la subvención: 35 Mptas

Investigador responsable: José Campos Gutierrez

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Estudio de moléculas estables e iones moleculares mediante espectroscopía láser de alta resolución y técnicas de haces moleculares. PB89/0041

Entidad financiadora: C.I.C.Y.T.

Entidades participantes: CSIC, Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: Junio 1990 hasta: Junio 1992 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Dionisio Bermejo Plaza

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Fenómenos de interacción plasma-pared en dispositivos de fusión termonuclear. Medida de parámetros del borde del plasma por haces atómicos y de fenómenos de sputtering, por espectrometría de masas. PB90/0622-C03-01

Entidad financiadora: D.G.I.C.Y.T.

Entidades participantes: UCM, CSIC, UPM
Duración, desde: Octubre 1991 hasta: Octubre 1992 Cuantía de la subvención: 3 Mptas
Investigador responsable: Francisco Javier Aoz Molerés
Número de investigadores participantes: 1

Título del proyecto: Estudios experimentales y cálculos teóricos sobre la dinámica de la reacción $D+H_2 \rightarrow HD+H$. Programa de Intercambio Hispano-Alemán Acciones Integradas. HA-063
Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia
Entidades participantes: CSIC, UCM, Universidad de Göttingen
Duración, desde: 1/1/1991 hasta: 31/12/1991 Cuantía de la subvención: 0.4 Mptas
Investigador responsable: Victor J. Herrero Ruíz de Loizaga
Investigador responsable alemán: J. P. Toennies
Número de investigadores participantes: 5

Título del proyecto: Estereodinámica de reacciones bimoleculares. Programa de Intercambio Hispano-Británico Acciones Integradas. 245A
Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia
Entidades participantes: UCM, Universidad de Nottingham
Duración, desde: Abril 1992 hasta: Marzo 1993 Cuantía de la subvención: 0.504 Mptas
Investigador responsable: Francisco Javier Aoz Molerés
Investigador responsable británico: John P. Simons
Número de investigadores participantes: 5

Título del proyecto: Estudio experimental por medio de haces moleculares y láseres y teóricos mediante simulación con trayectorias cuasiclásicas de la reacción $H+H_2$ y sus variantes isotópicas. Programa de Intercambio Hispano-Alemán Acciones Integradas. HA-074
Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia
Entidades participantes: UCM, Universidad de Bielefeld
Duración, desde: 1/1/1993 hasta: 31/12/1993 Cuantía de la subvención: 0.336 Mptas
Investigador responsable: Francisco Javier Aoz Molerés
Investigador responsable alemán: Karl H. Welge
Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: Espectroscopía de Ionización Multifotónica Resonante (REMPI) de Radicales. Cálculos de Dinámica de Reacciones Elementales. PB92/0219-C03-01
Entidad financiadora: D.G.I.C.Y.T.
Entidades participantes: Universidad Complutense, CSIC, UPM
Duración, desde: 1993 hasta: 1996 Cuantía de la subvención: UCM:13.110 Mptas
Investigador responsable: Francisco Javier Aoz Molerés
Número de investigadores participantes: UCM: 1

Título del proyecto: Estudio experimental por medio de haces moleculares y láseres y teóricos mediante simulación con trayectorias cuasiclásicas de la reacción $H+H_2$ y sus variantes isotópicas. Programa de Intercambio Hispano-Alemán Acciones Integradas. HA93-113
Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia
Entidades participantes: Universidad Complutense, Universidad de Bielefeld
Duración, desde: 1/1/1994 hasta: 31/12/1994 Cuantía de la subvención: 0.392 Mptas
Investigador responsable: Francisco Javier Aoz Molerés
Investigador responsable alemán: Karl H. Welge
Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: Estudio experimental con láseres y haces moleculares y cálculos teóricos de trayectorias cuasiclásicas y mecanocuánticas. Secciones diferenciales reactivas resueltas en estados finales para las reacciones $H+D_2 \rightarrow HD+D$ y $D+H_2 \rightarrow HD+H$. Programa de Intercambio Hispano-Alemán Acciones Integradas. HA94-135.
Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, CSIC, Universidad de Bielefeld
Duración, desde: 1/1/1995 hasta: 31/12/1995 Cuantía de la subvención: 0.420 Mptas
Investigador responsable: Francisco Javier Aoz Molerés
Investigador responsable alemán: Karl H. Welge
Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: Dinámica tridimensional de reacciones bimoleculares: Experimentos y simulación teórica. Programa de Intercambio Hispano-Británico Acciones Integradas HB95-190B.

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, CSIC, Universidad de Oxford
Duración, desde: 1/4/1995 hasta: 31/3/1996 Cuantía de la subvención:
Investigador responsable: Victor José Herrero Ruíz de Loizaga
Investigador responsable británico: M. Brouard
Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: "Exploring ab initio potential energy surfaces for elementary bimolecular reactions. Classical and quantum mechanical dynamical calculations and direct comparison with the experiments." Programa de Intercambio Hispano-Alemán Acciones Integradas HA95-135 y HA96-135B.

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, CSIC, Universidad de Stuttgart
Duración, desde: 1/1/1996 hasta: 31/12/1997 Cuantía de la subvención: 0.760 Mptas
Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés
Investigador responsable alemán: H.-J. Werner
Número de investigadores participantes: 4

Título del proyecto: Espectroscopía de Ionización Multifotónica Resonante (REMPI) de Radicales y Moléculas. Aplicación al estudio de reacciones elementales: Experimentos y cálculos teóricos. PB95/0918-C03

Entidad financiadora: D.G.I.C.Y.T.
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, CSIC, Universidad Politécnica de Madrid
Duración, desde: 1997 hasta: 1999 Cuantía de la subvención: 31.620 Mptas (UCM: 16.840 Mptas)
Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés
Número de investigadores participantes: UCM: 5

Título del proyecto: Cromatografía de gases y ablación láser con espectrometría de masas por tiempo de vuelo e ionización láser multifotónica (GC-LA/TOFMS-REMPI). Proyecto de Infraestructura científico-técnica IN97-0380. Programa Nacional de I+D en medio ambiente.

Entidad financiadora: D.G.I.C.Y.T.-Comunidad de Madrid-Universidad Complutense de Madrid
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid
Duración, desde: 1998 hasta: Cuantía de la subvención: 32 Mptas
Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés
Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Estudio de procesos de fotodisociación, reacciones elementales y transferencia de energía en fase gaseosa: experimentos con ionización multifotónica y cálculos teóricos PB98-0762-C03.

Entidad financiadora: D.G.I.C.Y.T.
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, (Coordinado CSIC, UPM)
Duración, desde: 2000 hasta: 2002 Cuantía de la subvención: 18 Mptas (UCM: 11Mptas)
Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés
Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Desarrollo de métodos analíticos por HPLC-DAD, GC-MS, GC-REMPI/TOFSMS para la determinación de hormonas sintéticas (trembolona, dietilestilbestrol, zeranol y similares) en piensos y agua destinada al consumo animal. O7G/0044/2000

Entidad financiadora: Consejería de Educación, Comunidad Autónoma de Madrid
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid
Duración, desde: 2001 hasta: 2002 Cuantía de la subvención: 3,564 Mptas.
Investigador responsable: Roberto Izquierdo Hornillos
Número de investigadores participantes: 10

Título del proyecto: Dinámica de reacciones químicas elementales. Estudios con haces moleculares y cálculos mecanocuánticos y de trayectorias cuasiclásicas para reacciones elementales de tres y cuatro átomos. Programa de Intercambio Hispano-Italiano Acciones Integradas HI1999-0081

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y cultura
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Universidad de Perugia
Duración, desde: 2000 hasta: Diciembre 2001 Cuantía de la subvención: 1,320 Mptas

Investigador responsable: F. Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: Dinámica y cinética de reacciones químicas elementales de 3 y 4 átomos. Estudios experimentales y cálculos teóricos. Programa de Intercambio Hispno-Alemán Acciones Integradas HA1999-0050

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y cultura

Entidades participantes: CSIC, Universidad Complutense de Madrid, Universidad de Heidelberg

Duración, desde: 2000 hasta: Diciembre 2001 Cuantía de la subvención: 1,320 Mptas.

Investigador responsable: Victor Herrero Ruíz de Loizaga

Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: REACTION DYNAMICS: Experimental and Theoretical Studies on the Dynamics of Reactions of Atoms and Radicals of Fundamental and Practical Importance. Research Training Network of the EC. Project HPRN-CT-1999-00007.

Entidad financiadora: UE

Entidades participantes: UCM, U. Perugia, U. Oxford, U. Bielefeld, U. Nijmegen, U. Stuttgart, U. Freiburg

Duración, desde: 2000 hasta: 2004 Cuantía de la subvención: 1.499.000 € (UCM: 150.000 €)

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Estudio experimental y teórico de la dinámica de fotodisociación y reacciones fotoinducidas con detección de moléculas y radicales por espectroscopía láser multifotónica. BQU2002-04627-C02-02.

Entidad financiadora: Mrio de Ciencia y Tecnología

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, (Coordinado UPM)

Duración, desde: 2003 hasta: 2005 Cuantía de la subvención: 150.000, €

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes: 9

Título del proyecto: Ayudas para la movilidad del profesorado en programas de doctorado para Universidades públicas para el curso 2002-2003. Curso Interuniversitario de Doctorado de Química Teórica y Computacional.

.Entidad financiadora: Mrio de Educación, Cultura y Deportes

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2002 hasta: 2003 Cuantía de la subvención: 16.240, EUR

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes: 9

Título del proyecto: Organización de XVIII European Conference on Molecular Energy Transfer. Acción especial (COMET) BQU2002-10494-E.

Entidad financiadora: Mrio de Ciencia y Tecnología

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid.

Duración, desde: 2003 hasta: 2003 Cuantía de la subvención: 10.000, €

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: Sistema Láser de Femtosegundo. UNCM00-33-009

.Entidad financiadora: Universidad Complutense de Madrid- Unión Europea

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2002 hasta: 2003 Cuantía de la subvención: 600.000, EUR

Investigadores responsables: Francisco Javier Aoiz Molerés y Luis Bañares Morcillo

Número de investigadores participantes: 4

Título del proyecto: Equipamiento para el Centro de Determinación Molecular. UNCM01-35-002

.Entidad financiadora: Universidad Complutense de Madrid- Unión Europea

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2002 hasta: 2003 Cuantía de la subvención: 227.772,10 EUR

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Organización de Reuniones Científicas y Congresos de la UCM-2002 para la organización del evento: "XVIII European Conference on Molecular Energy Transfer"

.Entidad financiadora: Universidad Complutense de Madrid

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid
Duración, desde: 2003 hasta: 2003 Cuantía de la subvención: 2.400,00 EUR
Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés
Número de investigadores participantes: 1

Título del proyecto: Proyecto de acondicionamiento y reubicación del Centro de determinación Estructural Molecular UNCMA-C002
Entidad financiadora: Universidad Complutense de Madrid- Unión Europea
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid
Duración, desde: 2003 hasta: 2004 Cuantía de la subvención: 2.123.857, EUR
Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés
Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Estudio de la Dinámica molecular de procesos químicos mediante técnicas láser de nanosegundo y femtosegundo y métodos teóricos. CTQ2005-08493-C01-01/BQU.
Entidad financiadora: Mrio de Educación y Ciencia. Plan Nacional de I+D+I
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, (Coordinado UPM)
Duración, desde: 2006 hasta: 2008 Cuantía de la subvención: 160.000, €
Investigador responsable: Luis Bañares Morcillo
Número de investigadores participantes: 11

Título del proyecto: Red Temática Quimiláser
Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia CTQ2004-22423-E
Entidades participantes: Universidad de Valladolid, Universidad Complutense de Madrid, etc.
Duración, desde: 2006 hasta: 2006 Cuantía de la subvención: 13.000 euros
Investigador principal: José Luis Alonso Hernández
Número de investigadores participantes:>10

Título del proyecto: Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación Universidad Complutense-Comunidad de Madrid IV PRICIT: Grupo de Dinámica molecular de las reacciones químicas y femtoquímica.
Entidad financiadora: Comunidad de Madrid-U.C.M. Grupo: 910729
Entidades participantes: Universidad de Complutense de Madrid
Duración, desde: 30/12/2005 hasta: 29/12/2006 Cuantía de la subvención: 15.210, euros
Investigador principal: Francisco Javier Aoiz Molerés
Número de investigadores participantes: 11

Título del proyecto: Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación Universidad Complutense-Comunidad de Madrid: Grupo Dinámica molecular de las reacciones químicas y femtoquímica.
Entidad financiadora: Comunidad de Madrid-U.C.M. Grupo: 910729
Entidades participantes: Universidad de Complutense de Madrid
Duración, desde: 1/1/2007 hasta: 31/12/2007 Cuantía de la subvención: 14.000, euros
Investigador principal: Francisco Javier Aoiz Molerés
Número de investigadores participantes: 10

Título del proyecto: Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación Universidad Complutense-Comunidad de Madrid: Grupo Dinámica molecular de las reacciones químicas y femtoquímica.
Entidad financiadora: Comunidad de Madrid-U.C.M. Grupo: 910729
Entidades participantes: Universidad de Complutense de Madrid
Duración, desde: 1/1/2008 hasta: 31/12/2008 Cuantía de la subvención: 9.3000, euros
Investigador principal: Francisco Javier Aoiz Molerés
Número de investigadores participantes: 10

Título del proyecto: "Dinámica de procesos químicos: Experimentos fotoiniciados con láseres de nanosegundo y femtosegundo y métodos teóricos".
Proyecto: **CTQ2008-02578/BQU** (Tipo C, 5 años).
Entidad financiadora: Mrio de Educación y Ciencia. Plan Nacional de I+D+I
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Universidad de Salamanca, Universidad del País Vasco.
Duración, desde: 1/1/2009 hasta: 31/12/2013 Cuantía de la subvención: 453.000, €
Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés
Número de investigadores participantes: 18

Título del proyecto: "Molecular Astrophysics: The Herschel and Alma era". CDS2009-00038

Proyecto **Consolider-Ingenio 2010**. Ministerio de Ciencia e Innovación.

Participantes: CSIC-CAB, Universidad Complutense de Madrid, Universidad de Valladolid, Universidad de Castilla la Mancha, CSIC, Instituto Geográfico Nacional, Universidad Pablo Olavide, Universidad de Murcia, Instituto de Astrofísica de Canarias.

Coordinador del Proyecto: José Cernicharo Quintanilla (CSIC-CAB)

Coordinador UCM: Francisco Javier Aoiz Molerés

Dates: 2010-2014 Soporte financiero total: 4.000.000 euros.

Número de investigadores UCM 11

Título del proyecto: "Dinámica de procesos moleculares mediante experimentos con láser y métodos teóricos."

Proyecto **CTQ2012-37404-C02-01**.

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad.

Participantes: Universidad Complutense de Madrid. Coordinado con la Universidad de Salamanca. ,

IP UCM y Coordinador de los subproyectos: F. Javier Aoiz Molerés

Dates: 2013-2015 Soporte financiero total: 217.000 euros.

Número de investigadores UCM 15

Título del proyecto: "Procesos moleculares fotoinducidos y colisionales por medio de experimentos láser y métodos teóricos."

Proyecto **CTQ2015-65033-P**.

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad.

Participantes: Universidad Complutense de Madrid

IPs: F. Javier Aoiz Molerés y Luis Bañares

Dates: 2015-2018. Soporte financiero total: 223.400 euros.

Número de investigadores 12

Publicaciones o Documentos Científico-Técnicos

(CLAVE: L = libro completo, CL = capítulo de libro, A = artículo, R = "review", E = editor,
S = Documento Científico-Técnico restringido.)

1.

Autores (p.o. de firma): A. González Ureña, F. J. Aoiz

Título: Simple Cross-section model for elementary reactions

Ref. revista: Chem. Phys. Lett. Libro

Clave: A Volumen: **51** Páginas, inicial: 281 final: 286 Fecha: 1977

2.

Autores (p.o. de firma): A. González Ureña, V.J. Herrero, F. J. Aoiz

Título: Dynamical model for the 'translational excitation features' in the atom Diatom reaction cross section

Ref. revista: Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **44** Páginas, inicial: 81 final: 91 Fecha: 1979

3.

Autores (p.o. de firma): A. González Ureña, V.J. Herrero, F. J. Aoiz

Título: A general discussion on kinetics of state selected species

Ref. revista: Faraday Discussions Chem. Soc. Libro

Clave: A Volumen: **67** Páginas, inicial: 138 final: 140 Fecha: 1979

4.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V.J. Herrero, A. González Ureña

Título: Observed translational energy dependence of the $K+C_2H_5I \rightarrow KI+C_2H_5$ reaction cross section from 0.17 to 0.55 eV (c.m.)

Ref. revista: Chem. Phys. Lett. Libro

Clave: A Volumen: **74** Páginas, inicial: 398 final: 399 Fecha: 1980

5.

Autores (p.o. de firma): A. González Ureña, F. J. Aoiz, V.J. Herrero

Título: Estudio de reacciones químicas por haces moleculares

Ref. revista: Revista de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales Libro

Clave: A Volumen: **74** Páginas, inicial: 339 final: 341 Fecha: 1980

6.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V.J. Herrero, A. González Ureña

Título: Molecular beam study of the $K+C_2H_5I \rightarrow KI+C_2H_5$ reaction cross section from 0.17 eV to 0.55 eV (c.m.)

Ref. revista: Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **59** Páginas, inicial: 61 final: 73 Fecha: 1981

7.

Autores (p.o. de firma): V. J. Herrero, F. L. Tabares, V. Sáez Rábanos, F. J. Aoiz, A. González Ureña

Título: Differential reaction cross section of the $C_2H_5X(X=Br,I)+KI \rightarrow C_2H_5 + KI$ systems

Ref. revista: Mol. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **44** Páginas, inicial: 1239 final: 1256 Fecha: 1981

8.

Autores (p.o. de firma): M. M. Oprysko, F. J. Aoiz, M. A. McMahan, R. B. Bernstein

Título: The reaction $Hg+I_2 \rightarrow HgI+I$ revisited

Ref. revista: J. Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **78** Páginas, inicial: 3816 final: 3831 Fecha: 1983

9.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. M. Oprysko, R. B. Bernstein

Título: Argon ion laser excitation of supersonic seeded molecular beams of I_2

Ref. revista: Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **79** Páginas, inicial: 321 final: 339 Fecha: 1983

10.

Autores (p.o. de firma): M. M. Oprysko, F. J. Aoiz, R. B. Bernstein, M. A. McMahan

Título: Search for the laser-induced crossed beam reaction of excited $I_2(B^3\Pi_0)$ with Hg

Ref. revista: Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **79** Páginas, inicial: 341 final: 350 Fecha: 1983

11.

Autores (p.o. de firma): V. Sáez Rábanos, F. J. Aoiz, V. J. Herrero, E. Verdasco, A. González Ureña

Título: Molecular beam study of the radical group effect in the $K+RI \rightarrow KI+R(R=CH_3, C_2H_5, nC_3H_7)$ reactive collisions

Ref. revista: Mol. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **59** Páginas, inicial: 707 final: 720 Fecha: 1986

12.

Autores (p.o. de firma): F.J. Aoiz, L. Bañares, F.L. Tabarés, A. González Ureña

Título: Reactor de flujo rápido de gases con descarga de microondas y detección por fluorescencia inducida por láser.

Aplicación a reacciones tipo NH_2+ molécula orgánica

Ref. revista: Studia Chemica Libro

Clave: A Volumen: **11** Páginas, inicial: 227 final: 235 Fecha: 1986

13.

Autores (p.o. de firma): E. Verdasco, V. Sáez Rábanos, F. J. Aoiz, A. González Ureña

Título: Influence of the radical group upon total reaction cross sections: molecular beam study of the $K+RI \rightarrow KI+R(R=CH_3, C_2H_5, C_3H_7)$ reactions

Ref. revista: Mol. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **62** Páginas, inicial: 1207 final: 1211 Fecha: 1987

14.

Autores (p.o. de firma): E. Verdasco, V. Sáez Rábanos, F. J. Aoiz, A. González Ureña

Título: Chemiluminescence from the $Ca^*(^3P)+SF_6$ reaction: absolute cross section, photon yields and electronic branching

Ref. revista: J. Phys. Chem. Libro

Clave: A Volumen: **91** Páginas, inicial: 2073 final: 2075 Fecha: 1987

15.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz

Título: Lasers in molecular beam experiments

Ref. revista: Libro: Capítulo en Lasers and their Applications

Clave: **CL** Volumen: Páginas, inicial: 408 final: 434 Fecha: 1987

Editorial (si libro): A. Y. Spasov, Ed.; World Scientific Publishing Co. ISBN 9971-50-320-4

Lugar de publicación: Singapore

16.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos

Título: Effect of rotation on the reactivity of the $D+H_2(v=1) \rightarrow HD+H$ system at translational energies 0.25, 0.35 and 0.45 eV

Ref. revista: Chem. Phys. Lett. Libro

Clave: A Volumen: **161** Páginas, inicial: 270 final: 276 Fecha: 1989

17.

Autores (p.o. de firma): V. J. Herrero, I. Tanarro, F. J. Aoiz, V. Sáez Rábanos

Título: Formación de agregados debilmente unidos en haces moleculares

Ref. revista: Revista de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales Libro

Clave: A Volumen: **84** Páginas, inicial: 381 final: 385 Fecha: 1990

18.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. Candela, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos

Título: Classical trajectory calculations for the $D+H_2(v=1, j=0) \rightarrow HD(v', j')+H$ reaction: differential and state-to-state cross sections in the 0.35-1.10 eV collision energy range

Ref. revista: Chem. Phys. Lett. Libro

Clave: A Volumen: **169** Páginas, inicial: 243 final: 251 Fecha: 1990

19.

Autores (p.o. de firma): Q. Xun Xu, R. S. Mackay, F. J. Aoiz, M. A. Quesada, P. J. Grunberg, R. B. Bernstein
Título: Measurement of the translational energy dependence of the cross section for the reaction $\text{Sr}+\text{CH}_3\text{I}\rightarrow\text{SrI}+\text{CH}_3$ from 0.1 to 1.0 eV

Ref. revista: Chem. Phys. Lett. Libro
Clave: A Volumen: **176** Páginas, inicial: 499 final: Fecha: 1991

20.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos
Título: Effects of translational, rotational and vibrational energy on the dynamics of the $\text{D}+\text{H}_2\rightarrow\text{HD}+\text{H}$ exchange reaction

Ref. revista: J. Chem. Phys. Libro
Clave: A Volumen: **94** Páginas, inicial: 7991 final: 8007 Fecha: 1991

21.

Autores (p.o. de firma): R. S. Mackay, Q. Xun Xu, F. J. Aoiz, R. B. Bernstein
Título: Dependence of the reaction cross section on the collision energy in the reactions of $\text{Sr}+\text{RX}\rightarrow\text{SrX}+\text{R}$ ($\text{R}=\text{C}_2\text{H}_5, n\text{-C}_3\text{H}_7, t\text{-C}_4\text{H}_9$): effect of the alkyl group

Ref. revista: J. Phys. Chem. Libro
Clave: A Volumen: **95** Páginas, inicial: 8226 final: Fecha: 1991

22.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos
Título: Classical collision complexes in the $\text{D}+\text{H}_2\rightarrow\text{HD}+\text{H}$ reaction

Ref. revista: J. Chem. Phys. Libro
Clave: A Volumen: **95** Páginas, inicial: 7767 final: 7768 Fecha: 1991

23.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos
Título: Comment on energy requirements and energy disposal in the QCT study of the $\text{D}+\text{H}_2$ reaction. Comparison with quantum mechanical results

Ref. revista: Faraday Discussions Chem. Soc. Libro
Clave: A Volumen: **92** Páginas, inicial: 376 final: 379 Fecha: 1991

24.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, Q. Xun Xu, R. S. Mackay
Título: Comment on excitation function of the $\text{Sr}+\text{HI}$ reaction

Ref. revista: Faraday Discussions Chem. Soc. Libro
Clave: A Volumen: **92** Páginas, inicial: 349 final: 351 Fecha: 1991

25.

Autores (p.o. de firma): Q. Xun Xu, R. S. Mackay, F. J. Aoiz, R. B. Bernstein
Título: Translational energy dependence of the reaction cross sections: $\text{Sr}+\text{CH}_3\text{I}, \text{CD}_3\text{I}, \text{CH}_3\text{Br}$

Ref. revista: J. Chem. Phys. Libro
Clave: A Volumen: **96** Páginas, inicial: 1896 final: 1991 Fecha: 1992

26.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, O. Puentedura, V. Sáez Rábanos
Título: State-resolved differential cross sections for the $\text{H}+\text{D}_2(v=0, j)\rightarrow\text{HD}(v', j')+\text{D}$ reaction from quasiclassical trajectory calculations

Ref. revista: Chem. Phys. Lett. Libro
Clave: A Volumen: **198** Páginas, inicial: 321 final: 327 Fecha: 1992

***27.**

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos
Título: Quasiclassical state-to-state cross sections for $\text{D}+\text{H}_2(v=0, j)\rightarrow\text{HD}(v', j')+\text{H}$. Formation and characteristics of short lived collision complexes

Ref. revista: Journal of Chemical Physics Libro
Clave: A Volumen: **97** Páginas, inicial: 7423 final: 7436 Fecha: 1992

28.-

Autores (p.o. de firma): R. Benito, F. J. Aoiz
Título: Classical trajectory calculations of chemical reactions

(si libro): Ref. revista: Libro: Capítulo en *Computational chemistry structure, Interactions on reactivity* (A, S. Fraga, Ed.)

Clave: **CL** Volumen: Páginas, inicial: 562 final: 591 Fecha: 1992
Editorial Elsevier. ISBN 0-444-885 12-9
Lugar de publicación: New York

29.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, M. M. Nogueira, V. Sáez Rábanos
Título: Quasi-classical trajectory study of the $F+H_2(D_2)\rightarrow HF(DF)+H(D)$ reaction. Vibrationally state resolved integral and differential cross sections.
Ref. revista: Chem. Phys. Lett.
Clave: A Volumen: **204** Páginas, inicial: 359 final: 367 Fecha: 1993

30.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, M. M. Nogueira, V. Sáez Rábanos
Título: Quasi-classical trajectory study of a two ends reaction: $F+HD\rightarrow HF(DF)+D(H)$. Comparison of vibrationally state resolved integral and differential cross sections on three different potential surfaces
Ref. revista: Chem. Phys. Lett.
Clave: A Volumen: **211** Páginas, inicial: 72 final: 81 Fecha: 1993

31.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. Brouard, P. A. Enriquez, R. Sayós
Título: Analysis of Doppler-broadened profiles generated from photoinitiated bimolecular reactions
Ref. revista: J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2
Clave: A Volumen: **89** Páginas, inicial: 1427 final: 1434 Fecha: 1993 DOI: 10.1039/ft9938901427.

32.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, O. Puentedura, V. Sáez Rábanos
Título: Angle-velocity contour maps for the $H+D_2\rightarrow HD+D$ reaction from quasiclassical trajectory calculations
Ref. revista: J. Chem. Phys.
Clave: A Volumen: **100** Páginas, inicial: 758 final: 759 Fecha: 1994

33.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, H. K. Buchenau, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos
Título: The $D+H_2(v=1,j)\rightarrow HD(v',j')+H$ reaction. A detailed quasiclassical trajectory study
Ref. revista: J. Chem. Phys.
Clave: A Volumen: **100** Páginas, inicial: 2789 final: 2799 Fecha: 1994

34.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos
Título: Short lived complexes in classical mechanics: the $D+H_2$ reaction
Ref. revista: Anales de Física
Clave: A Volumen: **90** Páginas, inicial: 293 final: 298 Fecha: 1994

35.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos
Título: Classical dynamics calculations for the $F+H_2\rightarrow HF+H$ reaction on two recent potential energy surfaces
Ref. revista: Chem. Phys. Lett.
Clave: A Volumen: **218** Páginas, inicial: 422 final: 432 Fecha: 1994

36.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, K. Stark, H.J. Werner
Título: Classical dynamics of the $F+H_2\rightarrow HF+H$ reaction on a new ab initio potential energy surface. A direct comparison with experiment
Ref. revista: Chem. Phys. Lett.
Clave: A Volumen: **223** Páginas, inicial: 215 final: 226 Fecha: 1994 DOI: 10.1016/0009-614

37.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero and V. Sáez Rábanos
Título: Energy dependence of the reaction cross section for the $F+H_2\rightarrow HF+H$ reaction from quasi-classical trajectory calculations
Ref. revista: Chem. Phys.
Clave: A Volumen: **187** Páginas, inicial: 227 final: 239 Fecha: 1994

38.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, M. J. D'Mello, V.J. Herrero, V. Sáez Rábanos, L. Schnieder, R.E. Wyatt

Título: Quantum mechanical and quasi-classical calculations for the $H+D_2 \rightarrow HD+D$ reaction. Reaction probabilities and differential cross sections

Ref. revista: J. Chem. Phys.

Clave: A Volumen: **101** Páginas, inicial: 5781 final: 5791 Fecha: 1994

39.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, K. Stark, H.-J. Werner

Título: A quasi-classical trajectory study of the $F+D_2 \rightarrow DF+D$ reaction on a new ab initio potential energy surface. A comparison with molecular beam experimental results

Ref. revista: J. Phys. Chem. Libro

Clave: A Volumen: **98** Páginas, inicial: 10665 final: 10670 Fecha: 1994

40.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, K. Stark, H.-J. Werner

Título: The $F+HD \rightarrow DF(HF)+H(D)$ reaction revisited. Quasi-classical trajectory study on an ab initio potential energy surface and comparison with molecular beam experiments

Ref. revista: J. Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **102** Páginas, inicial: 9248 final: 9262 Fecha: 1995

***41.**

Autores (p.o. de firma): L. Schnieder, K. Seekamp-Rahn, J. Borkowski, E. Wrede, K. H. Welge, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. J. D'Mello, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, R.E. Wyatt

Título: Experimental studies and theoretical predictions for the $H+D_2 \rightarrow HD+D$ reaction

Ref. revista: **Science** Libro

Clave: A Volumen: **269** Páginas, inicial: 207 final: 210 Fecha: 1995

42.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares

Título: Effect of reagent vibrational excitation on the dynamics of the $Cl+HD \rightarrow HCl(DCl)+H(D)$ reaction

Ref. revista: Chem. Phys. Lett. Libro

Clave: A Volumen: **247** Páginas, inicial: 232 final: 242 Fecha: 1995

43.

Autores (p.o. de firma): M. Faubel, B. Martínez-Haya, L. Y. Rusin, U. Tappe, J. P. Toennies, F. J. Aoiz, L. Bañares

Título: F- D_2 state resolved reactive scattering at 180 meV and 240 meV collision energies I: A high resolution crossed molecular beam experiment

Ref. revista: Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **207** Páginas, inicial: 227 final: 243 Fecha: 1996

44.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Faubel, B. Martínez-Haya, L. Y. Rusin, U. Tappe, J. P. Toennies

Título: F- D_2 state resolved reactive scattering at 180 meV and 240 meV collision energies II: Quasi-classical cross sections. A comparison with the experimental results

Ref. revista: Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **207** Páginas, inicial: 245 final: 259 Fecha: 1996

45.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, T. Díez-Rojo, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos

Título: Reaction cross section and rate constant calculations for the $D+H_2(v=0,1) \rightarrow HD+H$ reaction on three ab initio potential energy surfaces. A quasi-classical trajectory study

Ref. revista: J. Phys. Chem. Libro

46.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, K. Stark, H.-J. Werner

Título: "Reaction cross sections and rate constant calculations for the $F+H_2(D_2) \rightarrow HF(DF)+H(D)$ reactions from quasiclassical trajectory calculations on an ab initio potential energy surface."

Ref. revista: Chemical. Physics Letters. Libro

Clave: A Volumen: **254** Páginas, inicial: 341 final: 348 Fecha: 1996

47.

Autores (p.o. de firma): A.J. Alexander, F. J. Aoiz, M. Brouard, J.P. Simons

Título: "Product state-resolved stereodynamics: quasiclassical trajectory study of the reaction $O(^1D)+HD \rightarrow OH(OD)(v',j')+D(H)$."

Ref. revista: Chemical. Physics Letters Libro

Clave: A Volumen: **256** Páginas, inicial: 561 final: 568 Fecha: 1996

- 48.**
 Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. Brouard, P.A. Enríquez
 Título: "Product rotational polarization in photon-initiated bimolecular reactions."
 Ref. revista: J. Chem. Phys. Libro
 Clave: A Volumen: **105** Páginas, inicial: 4964 final: 4982 Fecha: 1996
-
- 49.**
 Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero
 Título: "Quasiclassical trajectory study of the $H+D_2 \rightarrow HD+D$ reaction at a collision energy of 2.2 eV. A comparison with experimental results."
 Ref. revista: J. Chem. Phys. Libro
 Clave: A Volumen: **105** Páginas, inicial: 6086 final: Fecha: 1996
-
- 50.**
 Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares
 Título: "Reaction cross sections and rate constant calculations for the $Cl+H_2(D_2) \rightarrow HCl(DCl)+H(D)$ reactions from quasiclassical trajectory calculations on an ab initio potential energy surface."
 Ref. revista: J. Phys. Chem. Libro
 Clave: A Volumen: **100** Páginas, inicial: 18108 final: 18115 Fecha: 1996
-
- *51.**
 Autores (p.o. de firma): M. Alagia, N. Balucani, L. Cartechini, P. Casavecchia, E. H. van Kleef, G. G. Volpi, F. J. Aoiz, L. Bañares, D. W. Schwenke, T. C. Allison, S. L. Mielke, D. G. Truhlar
 Título: Quantum, classical and experimental beam studies of the simplest Cl reaction
 Ref. revista: **Science** Libro
 Clave: A Volumen: **273** Páginas, inicial: 1519 final: 1522 Fecha: 1996
-
- 52.**
 Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, K. Stark, I. Tanarro, H.-J. Werner
 Título: "The $F+HD$ reaction: Cross sections and rate constants on an ab initio potential energy surface."
 Ref. revista: Chem. Phys. Lett. Libro
 Clave: A Volumen: **262** Páginas, inicial: 175 final: 182 Fecha: 1996
-
- 53.**
 Autores (p.o. de firma): A.J. Alexander, F. J. Aoiz, M. Brouard, I. Burak, Y. Fujimura, J. Short, J. P. Simons
 Título: "An experimental and quasiclassical study of the product state resolved stereodynamics of the reaction: $O(^1D)+H_2(v=0, j=0, 1) \rightarrow OH(X^2\Pi_{3/2}; v'=0, N', f)+H$."
 Ref. revista: Chemical. Physics Letters
 Clave: A Volumen: **262** Páginas, inicial: 589 final: 597 Fecha: 1996
-
- 54.**
 Autores (p.o. de firma): E. Wrede, L. Schnieder, K. H. Welge, F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero
 Título: High resolution study of the $H+D_2 \rightarrow HD+D$ reaction dynamics at a collision energy of 2.2 eV
 Ref. revista: Chemical. Physics Letters
 Clave: A Volumen: **265** Páginas, inicial: 129 final: 136 Fecha: 1997
-
- 55.**
 Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. Brouard, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, K. Stark
 Título: "Product rotational polarization. The stereodynamics of the $F+H_2$ reaction."
 Ref. revista: Chemical. Physics Letters
 Clave: A Volumen: **264** Páginas, inicial: 487 final: 494 Fecha: 1996
-
- 56.**
 Autores (p.o. de firma): E. Wrede, L. Schnieder, K. H. Welge, F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, V. Sáez Rábanos
 Título: The $H+D_2$ reaction in the vicinity of the conical intersection
 Ref. revista: J. Chem. Phys.
 Clave: A Volumen: **106** Páginas, inicial: 7862 final: Fecha: 1997
-
- 57.**
 Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, I. Tanarro
 Título: The $H+D_2 \rightarrow HD+D$ reaction. Quasiclassical trajectory study of cross sections, rate constants and kinetic isotope effect
 Ref. revista: J. Phys. Chem. A Libro
 Clave: A Volumen: **101** Páginas, inicial: 6165 final: 6176 Fecha: 1997

58.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, B. Martínez-Haya, J. F. Castillo, D. E. Manolopoulos, K. Stark, H.-J. Werner

Título: An ab initio simulation of molecular beam experiments for the $F+H_2 \rightarrow HF+H$ reaction

Ref. revista: J. Phys. Chem. A

Clave: A Volumen: 101 Páginas, inicial: 6403 final: Fecha: 1997

59.

Autores (p.o. de firma): A. J. Alexander, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Brouard, J. Short, J. P. Simons

Título: "Stereodynamics of the reaction $O(^1D_2)+H_2(v=0) \rightarrow OH(X^2\Pi_i; v'=0, N', f)+H$: State-resolved linear and rotational angular momentum distributions."

Ref. revista: J. Phys. Chem. A Libro

Clave: A Volumen: 101 Páginas, inicial: 7544 final: 7557 Fecha: 1997

60.

Autores (p.o. de firma): A. J. Alexander, F. J. Aoiz, M. Brouard, J. Short, J. P. Simons

Título: "The state resolved stereodynamics of an insertion reaction."

Ref. revista: Isr. J. Chem. Libro

Clave: A Volumen: 37 Páginas, inicial: 317 final: 327 Fecha: 1997

61.

Autores (p.o. de firma): A. J. Alexander, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Brouard, V. J. Herrero, J. P. Simons

Título: "Classical reaction probabilities, cross sections and rate constants for the $O(^1D)+H_2 \rightarrow OH+H$ reaction."

Ref. revista: Chem. Phys. Lett. Libro

Clave: A Volumen: 278 Páginas, inicial: 313 final: 324 Fecha: 1997

62.

Autores (p.o. de firma): A. J. Alexander, D. A. Blunt, M. Brouard, J. P. Simons, F. J. Aoiz, L. Bañares, Y. Fujimura, M. Tsubouchi.

Título: " $O(^1D)+H_2 \rightarrow OH(v', N')+H$: The anatomy of a reaction."

Ref. revista: Faraday Discuss. Chem. Soc.

Clave: A Volumen: 108 Páginas, inicial: 375 final: 386 Fecha: 1997

63.

Autores (p.o. de firma): L. Bañares, F. J. Aoiz, V. J. Herrero, M. J. D'Mello, B. Niederjohann, K. Seekamp-Rahn, E. Wrede, L. Schnieder.

Título: "Experimental and quantum mechanical study of the $H+D_2$ reaction near 0.5 eV: the assessment of the H_3 potential energy surfaces."

Ref. revista: J. Chemical. Physics.

Clave: A Volumen: 108 Páginas, inicial: 6160 final: Fecha: 1998

64.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, B. Friedrich, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, J. E. Verdasco

Título: "Effect of pendular orientation on the reactivity of $H+DCI$: A quasiclassical trajectory study."

Ref. revista: Chemical Physics Letters.

Clave: A Volumen: 289 Páginas, inicial: 132 final: 140 Fecha: 1998

65.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero

Título: "Recent results on quasi-classical trajectory computations of elementary reactions."

Ref. revista: Faraday Research Article, J. Chem. Soc. Faraday Trans.

Clave: R Volumen: 94 Páginas, inicial: 2483 final: 2500 Fecha: 1998

66.

Autores (p.o. de firma): J. F. Castillo, B. Hartke, H.-J. Werner, F. J. Aoiz, L. Bañares, B. Martínez-Haya

Título: "Quantum mechanical and quasi-classical simulations of molecular beam experiments for the $F+H_2 \rightarrow HF+H$ reaction on two ab initio potential energy surfaces."

Ref. revista: Journal. Chemical Physics

Clave: A Volumen: 109 Páginas, inicial: 7224 final: 7237 Fecha: 1998

67.

Autores (p.o. de firma): M. Faubel, B. Martínez-Haya, L. Y. Rusin, U. Tappe, J. P. Toennies, F. J. Aoiz, L. Bañares

Título: "Rotational state resolved differential cross sections for the reaction $F+D_2 \rightarrow DF+D$ at collision energies 140-240 meV."

Ref. revista: J. Phys. Chem. A

Clave: A Volumen: 102 Páginas, inicial: 8695 final: 8707 Fecha: 1998

68.

Autores (p.o. de firma): J. J. Aoiz, J. F. Castillo, L. Bañares

Título: Chemical Reaction Theory. General Discussion

Ref. revista: Faraday Discuss. Chem Soc.

Clave: A Volumen: 110 Páginas, inicial: 215 final: 217 Fecha: 1998

69.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, J. F. Castillo, L. Bañares, B. Martínez-Haya

Título: Chemical Reaction Theory. General Discussion

Ref. revista: Faraday Discuss. Chem Soc.

Clave: A Volumen: 110 Páginas, inicial: 220 final: 222 Fecha: 1998

70.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares

Título: Chemical Reaction Theory. General Discussion

Ref. revista: Faraday Discuss. Chem Soc.

Clave: A Volumen: 110 Páginas, inicial: 245 final: 246 Fecha: 1998

71.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares

Título: Chemical Reaction Theory. General Discussion

Ref. revista: Faraday Discuss. Chem Soc.

Clave: A Volumen: 110 Páginas, inicial: 365 final: 365 Fecha: 1998

72.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero

Título: "Classical versus quantum mechanical calculations of the dynamics of elementary reactions: from state resolved cross sections to rate constants."

Ref. revista: Libro: Capítulo en *Advances in Classical Trajectory Methods Vol. III: Comparisons of Classical and Quantum Dynamics* (W. L. Hase, Ed)

Clave: CL Volumen: Páginas, inicial: 121 final: 182 Fecha: 1998

Editorial (si libro): JAI Press ISBN 0-7623-0445-6 Lugar de publicación: Connecticut, E.E.U.U.

73.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. T. Martínez, M. Menéndez, V. Sáez Rábanos and E. Verdasco.

Título: "Quasiclassical trajectory study of the Li+HF→LIF+H reaction."

Ref. revista: Chemical Physics Letters

Clave: A Volumen: 299 Páginas, inicial: 25 final: 34 Fecha: 1999

74.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, M. Menéndez and E. Verdasco.

Título: "Quantum mechanical and quasi-classical rate constant calculations for the O(³P)+HCl→OH+Cl."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics Libro

Clave: A Volumen: 1 Páginas, inicial: 1149 final: Fecha: 1999

75.

Autores (p.o. de firma): F.J. Aoiz, T. Díez-Rojo, V.J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, L. Ramonat, I. Tanarro and E. Verdasco.

Título: "Low temperature rotational relaxation of N₂ studied with resonance enhanced multiphoton ionization."

Ref. revista: J. Phys. Chem. A. Libro

Clave: A Volumen: 103 Páginas, inicial: 823 final: 831 Fecha: 1999

76.

Autores (p.o. de firma): E. Wrede, L. Schnieder, K. H. Welge, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, B. Martínez-Haya, V. J. Herrero.

Título: "The dynamics of the hydrogen exchange reaction at 2.20 eV collision energy: experimental and theoretical differential cross sections."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: 110 Páginas, inicial: 9971 final: 9981 Fecha: 1999

77.

Autores (p.o. de firma): B. Martínez-Haya, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, J. M. Launay.

Título: "Quantum mechanical and quasiclassical trajectory study of state-to-state differential cross section for the $F+D_2 \rightarrow DF+D$ reaction in the center-of-mass and laboratory frames."

Ref. revista: Phys. Chem. Chem. Phys.

Clave: A Volumen: 1 Páginas, inicial: 3415 final: 3427 Fecha: 1999

78.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, I. Tanarro, E. Verdasco

Título: "Reaction cross-sections for the $H+HCl(DCl)$ reaction: a quasiclassical trajectory study."

Ref. revista: Chem. Phys. Lett.

Clave: A Volumen: 306 Páginas, inicial: 179 final: 186 Fecha: 1999

79.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo

Título: Spin orbit effects in quantum mechanical rate constant calculations for the $F+H_2 \rightarrow HF+H$ reaction

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: 111 Páginas, inicial: 4013 final: 4024 Fecha: 1999

80.

Autores (p.o. de firma): M. P. De Miranda, F. J. Aoiz, L. Bañares, V. Sáez Rábanos

Título: "A unified quantal and classical treatment of the stereodynamics of elementary reactions. The state-resolved $k-k'-j'$ vector correlation for the $H+D_2(v=0, j=0)$ reaction."

Ref. revista: J. Chem. Phys.

Clave: A Volumen: 111 Páginas, inicial: 5368 final: 5383 Fecha: 1999 DOI:10.1063/1.479797

81.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero

Título: A theoretical study of the dynamics of the $O(^1D)+HD$ reaction at 0.196 eV collision energy. Comparison with experimental results

Ref. revista: Chem. Phys. Lett.

Clave: A Volumen: 310 Páginas, inicial: 277 final: 286 Fecha: 1999

82.

Autores (p.o. de firma): B. Martínez-Haya, I. Zapater, P. Quintana, M. Menéndez, E. Verdasco, J. Santamaría, L. Bañares and F. J. Aoiz.

Título: Photodissociation of Dimethyl Sulfide at 227.5 nm: Resonance Enhanced Multiphoton Ionization of the Methyl Fragment.

Ref. revista: Chemical Physics Letters

Clave: A Volumen: 311 Páginas, inicial: 159 final: 166 Fecha: 1999

83.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, V. J. Herrero

Título: Comment on "Reaction cross sections for the $H+D_2(v=0,1)$ system for collision energies up to 2.5 eV: A multiconfiguration time-dependent Hartree wave-packet propagation study" [J. Chem. Phys. 110, 241 (1999)]

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: 111 Páginas, inicial: 9891 final: 9892 Fecha: 1999

84.

Autores (p.o. de firma): P. Casavecchia, L. Cartechini, F. J. Aoiz, M. Alagia, N. Balucani, G. G. Volpi, L. Bañares, D. W. Schwenke, T. C. Allison, S. L. Mielke, D. G. Truhlar

Título: Stereochemistry and control in molecular reaction dynamics. General Discussion

Ref. revista: Faraday Discuss. Chem Soc.

Clave: A Volumen: 113 Páginas, inicial: 206 final: 209 Fecha: 1999

85.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo

Título: Stereochemistry and control in molecular reaction dynamics. General Discussion

Ref. revista: Faraday Discuss. Chem Soc. Libro

Clave: A Volumen: 113 Páginas, inicial: 209 final: 209 Fecha: 1999

86.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. P. de Miranda, L. Bañares
Título: Stereochemistry and control in molecular reaction dynamics. General Discussion
Ref. revista: Faraday Discuss. Chem Soc.
Clave: A Volumen: 113 Páginas, inicial: 210 final: 214 Fecha: 1999

87.

Autores (p.o. de firma): A. J. Alexander, R. N. Zare, F. J. Aoiz, S. A. Kandel, L. Bañares
Título: Stereochemistry and control in molecular reaction dynamics. General Discussion
Ref. revista: Faraday Discuss. Chem Soc.
Clave: A Volumen: 113 Páginas, inicial: 334 final: 336 Fecha: 1999

88.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. Menéndez, V. Sáez Rábanos and E. Verdasco.
Título: Stereochemistry and control in molecular reaction dynamics. General Discussion
Ref. revista: Faraday Disc. Chem. Soc.
Clave: A Volumen: 113 Páginas, inicial: 338 final: 339 Fecha: 1999

89.

Autores (p.o. de firma): S. A. Kandel, A. J. Alexander, Z.-H. Kim, R. N. Zare, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, V. Sáez Rábanos
Título: "Cl+HD(v=1;J=1,2) reaction dynamics: comparison between theory and experiment."
Ref. revista: Journal of Chemical Physics Libro
Clave: A Volumen: 112 Páginas, inicial: 670 final: 685 Fecha: 2000

90.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, E. Verdasco, V. Sáez Rábanos, H. J. Loesch, M. Menéndez and F. Stienkemeier.
Título: Experimental and theoretical study of the Li+HF(v=1)→LiF+H reaction.
Ref. revista: Phys. Chem. Chem. Phys. Libro
Clave: A Volumen: 2 Páginas, inicial: 541 final: 548 Fecha: 2000

91.

Autores (p.o. de firma): T. Martínez, M. L. Hernández, J. M. Alvaríño, A. Laganà, F. J. Aoiz, M. Menéndez, E. Verdasco
Título: Quasiclassical trajectory simulation of the O(¹D)+HCl→OH+Cl, ClO+H reactions on an improved potential energy surface.
Ref. revista: Phys. Chem. Chem. Phys. Libro
Clave: A Volumen: 2 Páginas, inicial: 589 final: 597 Fecha: 2000

92.

Autores (p.o. de firma): A. J. Alexander, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Brouard, J. P. Simons
Título: Product rotational angular momentum polarization in the reaction O(¹D)+H₂→OH+H
Ref. revista: Phys. Chem. Chem. Phys. Libro
Clave: A Volumen: 2 Páginas, inicial: 571 final: 581 Fecha: 2000

93.

Autores (p.o. de firma): M. Alagia, N. Balucani, L. Cartechini, P. Casavecchia, G. G. Volpi, F. J. Aoiz, L. Bañares, T. C. Allison, S. L. Mielke, D. G. Truhlar
Título: "Dynamics of the Cl+H₂/D₂ reaction: A comparison of crossed molecular beam experiments with quasiclassical and quantum mechanical calculations."
Ref. revista: Phys. Chem. Chem. Phys. Libro
Clave: A Volumen: 2 Páginas, inicial: 599 final: 612 Fecha: 2000

*94.

Autores (p.o. de firma): F. Fernández-Alonso, B. D. Bean, J. D. Ayers, A. E. Pomerantz, R. Zare, F. J. Aoiz, L. Bañares
Título: "Evidence for scattering resonances in the H+D₂ reaction."
Ref. revista: **Angewante Chemie Int. Edition** Libro
Clave: A Volumen: 39 Páginas, inicial: 2748 final: 2752 Fecha: 2000

95.

Autores (p.o. de firma): P. Quintana, R. F. Delmdahl, D. H. Parker, B. Martínez-haya, F. J. Aoiz, L. Bañares, E. Verdasco
Título: "Velocity map imaging and REMPI study of the photodissociation of CH₃SCH₃ from the first absorption band."
Ref. revista: Chemical. Physics Letters
Clave: A Volumen: 325 Páginas, inicial: 146 final: 152 Fecha: 2000

96.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Brouard, J. F. Castillo, V.J. Herrero
Título: The dynamics of the O(¹D)+HD reaction: A quasiclassical trajectory multisurface study

Ref. revista: J. Chem. Phys.

Clave: A Volumen: 113 Páginas, inicial: 5339 final: 5353 Fecha: 2000

97.

Autores (p.o. de firma): N. Balucani, L. Cartechini, P. Casavecchia, G. G. Volpi, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Menéndez, W. Bian and H.-J. Werner.

Título: "Dynamics of the Cl+D₂ reaction: a comparison of crossed molecular beam experiments with quasi-classical trajectory calculations on a new ab initio potential energy surface."

Ref. revista: Chemical Physics Letters

Clave: A Volumen: 328 Páginas, inicial: 500 final: 508 Fecha: 2000

98.

Autores (p.o. de firma): J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Santamaría

Título: "Quasi-classical trajectory study of the dynamics of the H+H₂O reaction: differential cross-sections and product rotational polarization."

Ref. revista: Chemical Physics Letters Libro

Clave: A Volumen: 329 Páginas, inicial: 517 final: 525 Fecha: 2000

99.

Autores (p.o. de firma): B. Martínez-Haya, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Quintana, E. Verdasco

Título: "Photodissociation of CD₃SCD₃ on the first absorption band: Translational and internal energy transfer to CD₃ fragment studied by resonant multiphoton ionization and time-of-flight spectroscopy."

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A Libro

Clave: A Volumen: 104 Páginas, inicial: 10150 final: Fecha: 2000

100.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, T. Bohm, A. Hanf, V. J. Herrero, K.-H. Jung, A. Läueter, K.-W. Lee, M. Menéndez, V. Sáez Rábanos, I. Tanarro, H.-R. Volpp and J. Wolfrum.

Título: "Experimental and theoretical reaction cross sections for the H + HCl reaction. "

Ref. revista: J. Phys. Chem. A. Libro

Clave: A Volumen: 104 Páginas, inicial: 10452 final: Fecha: 2000

*101.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, M. Brouard, W. Denzer, C. Vallance, P. Honvault, J.-M. Launay, A. J. Dobbyn, P. J. Knowles

Título: Insertion and abstraction pathways in the reaction O(¹D)+H₂→OH+H

Ref. revista: Phys. Rev. Lett.

Clave: A Volumen: 86 Páginas, inicial: 1729 final: 1732 Fecha: 2001

102.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, B. Martínez-Haya, M. P. de Miranda

Título: "The stereodynamics of the O(¹D)+HD reaction on the ground ¹A' and excited ¹A'' potential energy surfaces."

Ref. revista: J. Chem. Phys.

Clave: A Volumen: 114 Páginas, inicial: 8328 final: Fecha: 2001

103.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo

Título:

"On the existence of resonances in the H+D₂→HD(v'=0,j'=7)+D reaction at collision energies 0.64-1.30 eV."

Ref. revista: J. Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: 114 Páginas, inicial: 8237 final: 8239 Fecha: 2001

104.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. T. Martínez, V. Sáez Rábanos

Título: Quasi-classical treatment of the Stereodynamics of chemical reactions: k-r-k' vector correlation for the Li+HF(v=1,j=1) → LiF+ H reaction

Ref. revista: J. Chem. Phys.

Clave: A Volumen: 114 Páginas, inicial: 8880 final: 8896 Fecha: 2001

105.

Autores (p.o. de firma): F.J. Aoiz, L. Bañares, V.J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro and E. Verdasco.

Título: Low temperature rotational relaxation of N₂ in collisions with Ne.

Ref. revista: J. Phys. Chem. A. Libro

Clave: A Volumen: **105** Páginas, inicial: 6976 final: Fecha: 2001

106.

Autores (p.o. de firma): D. Skouteris, H.-J. Werner, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, M. Menéndez, N. Balucani, L. Cartechini and P. Casavecchia.

Título: "Experimental and theoretical differential cross sections for the reactions Cl+H₂/D₂."

Ref. revista: J. Chem. Phys.

Clave: Volumen: **114** Páginas, inicial: 10662 final: 10671 Fecha: 2001

107.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, M. Menéndez, D. Skouteris and H.-J. Werner.

Título: "A quantum mechanical and quasi-classical trajectory study of the Cl+H₂ reaction and its isotopic variants. Dependence of the integral cross section on the collision energy and reagent rotation."

Ref. revista: J. Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **115** Páginas, inicial: 2074 final: 2081 Fecha: 2001

108.

Autores (p.o. de firma): F. Fernández-Alonso, B. D. Bean, R. N. Zare, L. Bañares, F. J. Aoiz, J. F. Castillo

Título: "Forward scattering in the H+D₂→HD+D reaction: comparison between Photoloc experiments and theoretical predictions."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics Libro

Clave: A Volumen: 115 Páginas, inicial: 4534 final: 4544 Fecha: 2001

109.

Autores (p.o. de firma): F.J. Aoiz, L. Bañares, V.J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro and E. Verdasco.

Título: "Gas phase molecular relaxation at very low temperatures. A comparative study of N₂ and of its mixtures with He and Ne.

Ref. revista: Vacuum Libro

Clave: A Volumen: **64** Páginas, inicial: 417 final: 423 Fecha: 2002

110.

Autores (p.o. de firma): F.J. Aoiz, L. Bañares and J. F. Castillo.

Título: A quasi-classical trajectory study of the H+H₂O→OH+H₂ reaction dynamics at 1.4 eV collision energy on a new ab initio potential energy surface

Ref. revista: Chemical Physics Letters Libro

Clave: A Volumen: **356** Páginas, inicial: 120 final: 126 Fecha: 2002

111.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, P. Honvault, J. M. Launay, X. Liu, J. J. Lin, S. A. Harich, C. C. Wang, and Xueming. Yang.

Título: "The O(¹D)+H₂ reaction at 56 meV collision energy: a comparison between quantum mechanical, quasi-classical trajectory and crossed beam results."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **116** Páginas, inicial: 10692 final: 10703 Fecha: 2002

***112.**

Autores (p.o. de firma): N. Balucani, L. Cartechini, G. Capozza, E. Segoloni, P. Casavecchia, G. G. Volpi, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, J. M. Launay

Título: Quantum effects in the differential cross sections for the insertion reaction N(²D)+H₂.

Ref. revista: **Physical Review Letters** o

Clave: A Volumen: **89** Páginas, inicial: 013201-1 final: 013201-4 Fecha: 2002

113.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, D. Sokolovski

Título: Energy evolution of forward scattering in the H+D₂→HD(v'=3, j'=0)+D reaction.

Ref. revista: J. Chemical Physics

Clave: A Volumen: **117** Páginas, inicial: 2546 final: 2556 Fecha: 2002

114.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya

Título: A quasiclassical trajectory and quantum mechanical study of the $O(^1D)+D_2$ reaction dynamics. Comparison with high resolution molecular beam experiments.

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical . Physics

Clave: A Volumen: **117** Páginas, inicial:4379 final: 4385 Fecha: 2002

115.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares and J. F. Castillo, D. Sokolovski, F. Fernández-Alonso, B. D. Bean, J. D. Ayers, A. E. Pomerantz and R. N. Zare.

Título: "Observation of scattering resonances in the $H+D_2$ reaction: Direct probe of the HD_2 transition state geometry."

Ref. Libro: Capítulo en Femtochemistry and Femtobiology. Ultrafast Dynamics in Molecular Science. (A. Douhal and J. Santamaría, Eds)

Clave: **CL** Volumen: Páginas, inicial: 61 final: 72 Fecha: 2002

Editorial (si libro):World Scientific. ISBN 0-7623-0445-6 Lugar de publicación: New Jersey-Singapore-London-Hong Kong

116.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro, E. Verdasco.

Título: Low temperature rotational relaxation of N_2 in collisions with He.

Ref. revista: Chemical Physics Letters

Clave: A Volumen: **367** Páginas, inicial: 500 final:506 Fecha: 2003

117.

Autores (p.o. de firma): L. Bañares, F. J. Aoiz, P. Honvault, B. Bussery-Honvault, J. M. Launay

Título: "Quantum mechanical and quasi-classical trajectory study of the $C(^1D)+H_2$ reaction dynamics."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **118** Páginas, inicial: 565 final: 568 Fecha: 2003

118.

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, I. Burak, D. Minayev, C. Vallance, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, D. H. Zhang, M. A. Collins

Título: The dynamics of the $H+D_2O \rightarrow OD+HD$ reaction at 2..5 eV: Experiment and theory.

Ref. revista: Journal of Chemical Physics Libro

Clave: A Volumen: **118** Páginas, inicial:1162 final:1174 Fecha: 2003

***119.-**

Autores (p.o. de firma):M. Brouard, I. Burak, D. Minayev, P. O'Keeffe, S. Marinakis, C. Vallance, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, D. H. Zhang, D. Xie, M. Yang, S.-Y. Lee, M. A. Collins

Título: "The cross-section for the $H+H_2O$ abstraction reaction: experiment and theory."

Ref. revista: **Physical Review Letters** Libro

Clave: A Volumen: **90** Páginas, inicial: 093201-1 final: 093201-4 Fecha: 2003

120.-

Autores (p.o. de firma): J. F. Castillo, M. A. Collins, F. J. Aoiz, L. Bañares

Título: "Quasi-classical trajectory study of the dynamics of the $H+N_2O$ reaction on a new potential energy surface."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **118** Páginas, inicial: 7303 final : 7312 Fecha: 2003

121.-

Autores (p.o. de firma): S. A. Vázquez, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Santamaría, E. Martínez-Nuñez, A. Fernández-Ramos

Título: Quasi-classical trajectory study of H_2 elimination in the photodissociation of difluoroethylenes at 193 nm.

Ref. revista: J. Chemical Physics Libro

Clave: A Volumen: **118** Páginas, inicial: 6941 final: 6945 Fecha: 2003

122.-

Autores (p.o. de firma): J. Barr, I. Torres, L. Bañares, J. E. Verdasco, F. J. Aoiz

Título: "Near UV photodissociation of CD_3SCD_3 : CD_3 fragment (v,J) vector correlations."

Ref. revista: Chemical Physics Letters Libro

Clave: A Volumen: **373** Páginas, inicial: 550 al: 557 Fecha: 2003

123.-

Autores (p.o. de firma): L. Bañares, F. J. Aoiz, S. A. Vázquez, Tak-San Ho, Herschel Rabitz

Título: "Quasi-classical trajectory calculations on a fast analytic potential energy surface for the C(¹D)+H₂ reaction."

Ref. revista: Chemical Physics Letters Libro

Clave: A Volumen: **374** Páginas, inicial: 243 final: 251

Fecha: 2003

124.-

Autores (p.o. de firma): Tak-San Ho, Herschel Rabitz, F. J. Aoiz, L. Bañares, S. A. Vázquez, L. Harding

Título: "Implementation of a fast analytic ground state potential energy surface for the N(²D)+H₂ reaction."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **119** Páginas, inicial: 3063 final: 3070

Fecha: 2003

125.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, J. E. Verdasco, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, M. H. Alexander

Título: "Attractive and repulsive interactions in the inelastic scattering of NO+Ar. A comparison between classical trajectory and close-coupling quantum mechanical results."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics.

Clave: A Volumen: **119** Páginas, inicial: 5860 final: 5866

Fecha: 2003

126.-

Autores (p.o. de firma): Teresa Martínez, M.L. Hernández, J.M. Alvaríño, F.J. Aoiz and V. Sáez Rábanos

Título: A detailed study of the dynamics of the O(¹D)+HCl→OH+Cl, ClO+H reactions

Ref. revista: Journal of Chemical Physics Libro

Clave: A Volumen: **119** Páginas, inicial: 7871 final: 7886

Fecha: 2003

127.-

Autores (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos S. A. Vázquez, F. J. Aoiz, L. Bañares

Título: A direct classical trajectory study of HCl elimination from 193 nm photodissociation of vinyl chloride.

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry. A Libro

Clave: A Volumen: **107** Páginas, inicial: 7611 final: 7618

Fecha: 2003

128.-

Autores (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, M. N. D. S. Cordeiro, S. A. Vázquez, F. J. Aoiz, L. Bañares.

Título: A direct classical trajectory study of the acetone photodissociation on the triplet surface.

Ref. revista: Journal of Chemical Physics Libro

Clave: A Volumen: **119** Páginas, inicial: 10618 final: 10624

Fecha: 2003

129.-

Autores (p.o. de firma): L. Bañares, F.J. Aoiz, P. Honvault and J.M. Launay

Título: Dynamics of the S(¹D)+H₂ insertion reaction: A combined quantum mechanical and quasiclassical trajectory study.

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry Libro

Clave: A Volumen: **108** Páginas, inicial 1616 final: 1628

Fecha: 2004

130.-

Autores (p.o. de firma): A. E. Pomerantz, F. Ausfelder, R. N. Zare, S. Althorpe, F.J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo

Título: Disagreement between theory and experiment in the simplest chemical reactions: Collision energy dependent rotational distributions for H+D₂→HD(v'=3,j')+D

Ref. revista: Journal of Chemical Physics Libro

Clave: A Volumen: **120** Páginas, inicial 3244 final: 3254

Fecha: 2004

131.-

Autores (p.o. de firma): F. Ausfelder, A. E. Pomerantz, R. N. Zare, S. Althorpe, F.J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo

Título: Collision energy dependence of the HD(v'=2) product rotational distribution of the H+D₂ reaction in the range 1.30-1.89 eV.

Ref. revista: Journal of Chemical Physics Libro

Clave: A Volumen: **120** Páginas, inicial 3255 final: 3264

Fecha: 2004

132.-

Autores (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, S. A. Vázquez, F. J. Aoiz, L. Bañares, L. Bañares and J.F. Castillo
Título: "Further investigation of the HCl elimination in the photodissociation of vinyl chloride at 193 nm: A direct MP2/6-31G(d,p) trayectoruy study."

Ref. revista: Chemical Physics Letters

Clave: A Volumen: **386** Páginas, inicial: 225 final: 232 Fecha: 2004

133.-

Autores (p.o. de firma): G. A. Amaral, I. Torres, G. A. Pino, F. J. Aoiz, L. Bañares
Título: "Photodissociation dynamics of dimethyl sulfoxide-d₆ at 210 nm: Experimental evidence for a prompt anisotropic CD₃ channel."

Ref. revista: Chemical Physics Letters

Clave: A Volumen: **386** Páginas, inicial: 225 final: 232 Fecha: 2004

134.-

Autores (p.o. de firma): J. Barr, I. Torres, E. Verdasco, G. A. Pino, L. Bañares, F. J. Aoiz,
Título: "Photodissociation dynamics of dimethyl sulfide following excitation within the first absorption band."

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A Libro

Clave: A Volumen: **108** Páginas, inicial: 7936 final: 7948 Fecha: 2004

135.-

Autores (p.o. de firma): G. A. Pino, I. Torres, G. A. Amaral, F. J. Aoiz, L. Bañares
Título: "UV Photodissociation dynamics of CD₃SOCD₃: Photofragment translational and internal energy distribution."

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A Libro

Clave: A Volumen: **108** Páginas, inicial: 8048- final: 8057 Fecha: 2004

136.-

Autores (p.o. de firma): I. Torres, J. Barr, E. Verdasco, L. Bañares, F. J. Aoiz,
Título: "Near UV photodissociation of dimethyl sulphide: a direct mechanism on the second absorption band."

Ref. revista: Chemical Physics Letters

Clave: A Volumen: **394** Páginas, inicial: 307 final: 312 Fecha: 2004

137.-

Autores (p.o. de firma): J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. A. Collins
Título: "The H+N₂O→OH+N₂ reaction dynamics on an interpolated QCISD potential energy surface. A quasiclassical trajectory study."

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

Clave: A Volumen: **108** Páginas, inicial: 6611 final: 6623 Fecha: 2004

***138.-**

Autores (p.o. de firma): Marcelo P. de Miranda, and F. J. Aoiz
Título: Interpretation of quantum and classical angular momentum polarization moments.

Ref. revista: **Physical Review Letters**

Clave: A Volumen: **93** Páginas, inicial: 083201-1 final: 083201-4 Fecha: 2004

139.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos and J. E. Verdasco
Título: "Classical stereodynamics in Ar plus NO inelastic collisions."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **6** Páginas, inicial: 4407 final: 4415 Fecha: 2004

140.-

Autores (p.o. de firma): A. E. Pomerantz, F. Ausfelder, R. N. Zare, J.C. Juanes-Marcos, S. Althorpe, V. Sáez-Rábanos, F.J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo
Título: Rovibrational product state distribution for inelastic H+D₂ collisions.

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **121** Páginas, inicial: 6587 final: 6590 Fecha: 2004

141.-

Autores (p.o. de firma): Marcelo P. de Miranda, F. J. Aoiz, V. Sáez-Rábanos, M. Brouard
Título: Spatial distributions of angular momenta in quantum and quasiclassical stereodynamics.

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **121** Páginas, inicial: 9830 final: 9843 Fecha: 2004

142.-

Autores (p.o. de firma): Nadia Balucani, G. Capozza, L. Cartechini, A. Bergeat, R. Bobbenkamp, P. Casavecchia, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, B. Bussery-Honvault and J. M. Launay.

Título: Dynamics of the insertion $C(1D) + H_2$: A comparison of crossed molecular beam experiments with quasiclassical trajectory and quantum mechanical scattering calculations.

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: 6 Páginas, inicial: 4957 al: 4967 Fecha: 2004

143.-

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, S. Marinakis, L. Rubio Lago, F. Quadrini, D. Solaiman, C. Vallance, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo.

Título: "Cross sections for the $H+H_2O \rightarrow OH+H_2$ and $H+D_2 \rightarrow OD +HD$ abstraction reactions."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: 6 Páginas, inicial: 4991 final: 4999 Fecha: 2004

144.-

Autores (p.o. de firma): J. Klos, F. J. Aoiz, R. Cireasa, J. J. ter Meulen

Título: "Rotationally inelastic scattering of $OH(2I)$ by $HCl(1\Sigma)$: Comparison of experiment and theory."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: 6 Páginas, inicial: 4968 final: 4974 Fecha: 2004

145.-

Autores (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, S. A. Vázquez, I. Borges Jr., A. B. Rocha, C. M. Estévez, J. F. Castillo, and F. J. Aoiz

Título: On the conformational memory in the photodissociation of formic acid.

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

Clave: A Volumen: 109 Páginas, inicial: 2836 final: 2839 Fecha: 2005

146.-

Autores (p.o. de firma): Nadia Balucani, P. Casavecchia, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo

Título: Dynamics of the $O(1D) + D_2$ reaction: A comparison between crossed molecular beam experiments and quasiclassical trajectory calculations on the lowest three potential energy surfaces.

Ref. revista: Molecular Physics

Clave: A Volumen: 103 Páginas, inicial: 1703 al: 1714 Fecha: 2005

***147.-**

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero

Título: The $H+H_2$ reactive system. Progress in the study of the dynamics of the simplest reaction.

Ref. revista: International Review on Physical Chemistry

Clave: A Volumen: 24 Páginas, inicial: 119 final: 190 Fecha: 2005

148.-

Autores (p.o. de firma): J. Aldegunde, M. P. de Miranda, J. Haigh, B. Kendrick, V. Sáez-Rábanos and F. J. Aoiz

Título: How reactants polarization can be used to change and unravel chemical reactivity.

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

Clave: A Volumen: 109 Páginas, inicial: 6200 final: 6217 Fecha: 2005

149.-

Autores (p.o. de firma): Nadia Balucani, Giovanni Capozza, Enrico Segoloni, Andrea Russo, Rolf Bobbenkamp, Piergiorgio Casavecchia, Tomas Gonzalez-Lezana, Edward J. Rackham, Luis Bañares, and F. Javier Aoiz

Título: "Dynamics of the $C(1D)+D_2$ reaction: A comparison of crossed molecular beam experiments with quasi-classical trajectory and accurate statistical calculations."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: 122 Páginas, inicial: 234309-1 final: 234309-11 Fecha: 2005

150.-

Autores (p.o. de firma): Jiri Vanicek, W. H. Miller, J. F. Castillo and F. J. Aoiz

Título: Quantum instanton evaluation of the kinetic isotope effects.

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: 123 Páginas, inicial: 054108-1 final: 054108-14 Fecha: 2005

151.-

Autores (p.o. de firma): R. Bobbenkamp, A. Paladini, A. Russo, H. J. Loesch, M. Menéndez, E. Verdasco, F. J. Aoiz and H.-J. Werner.

Título: Effect of rotational energy on the reaction $\text{Li}+\text{HF}(v=0, j) \rightarrow \text{LiF}+\text{H}$: An experimental and computational study.

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **122** Páginas, inicial: 244304-1 final: 244304-18 Fecha: 2005

152.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. Sáez Rábanos, B. Martínez-Haya and T. González-Lezana

Título: Quasiclassical determination of reaction probabilities as a function of the total angular momentum.

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **123** Páginas, inicial: 0941901-1 final :0941901-14 Fecha: 2005

153.-

Autores (p.o. de firma): J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, E. Fernández-Ramos, S. Vázquez.

Título: Quasiclassical trajectory study of the $\text{F}+\text{CH}_4$ reaction dynamics on a dual-level interpolated potential energy surface.

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

Clave: A Volumen: **109** Páginas, inicial: 8459 final :8470 Fecha: 2005

154.-

Autores (p.o. de firma): G. A. Amaral, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, G. A. Pino, I. Tanarro, I. Torres, J. E. Verdasco.

Título: "Low-temperature rotational relaxation of CO in self collisions and in collisions with Ne and He."

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

Clave: A Volumen: **109** Páginas, inicial: 8459 final: 8470 Fecha: 2005

155.-

Autores (p.o. de firma): L. Bañares, F. J. Aoiz, T. González-Lezana, V. J. Herrero, I. Tanarro.

Título: "Influence of rotation and isotope effects on the dynamics of the $\text{N}(^2\text{D})+\text{H}_2$ reactive system and of its deuterated variants."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **123** Páginas, inicial: 224301-1 final : 224301-9 Fecha: 2005

156.-

Autores (p.o. de firma): L. Bañares, F. J. Aoiz, V. J. Herrero

Título: Latest findings on the dynamics of the simplest chemical reaction.

Ref. revista: Physica Scripta

Clave: A Volumen: **73** Páginas, inicial: C6 final: C13 Fecha: 2006

157.-

Autores (p.o. de firma): E. Martínez-Nuñez, S. Vázquez, F. J. Aoiz, and J. F. Castillo

Título: "Quasiclassical Trajectory study of the collision-induced dissociation dynamics of $\text{Ar} + \text{CH}_3\text{SH}^+$ using an ab initio interpolated potential energy surface."

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

Clave: A Volumen: **110** Páginas, inicial: 1225 final: 1231 Fecha: 2006

158.-

Autores (p.o. de firma): P. Honvault, B. Bussery-Honvault, J.-M. Launay, F. J. Aoiz, and L. Bañares

Título: "Quantum mechanical and quasiclassical trajectory scattering calculations for the $\text{C}(^1\text{D})+\text{H}_2$ reaction on the second excited $1^1\text{A}''$ potential energy surface."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **124** Páginas, inicial: 154314-1 final: 154314-7 Fecha: 2006

159.-

Autores (p.o. de firma): T. González-Lezana, O. Roncero, P. Honvault, J.-M. Launay, N. Bulut, F. J. Aoiz, and L. Bañares

Título: A detailed quantum mechanical and quasiclassical trajectory study on the dynamics of the $\text{H}^++\text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2+\text{H}^+$ exchange reaction.

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **125** Páginas, inicial: 094314-1 final: 094314- 16 Fecha: 2006

160.-

Autores (p.o. de firma): J. G. Izquierdo, G. Amaral, F. Ausfelder, F. J. Aoiz and L. Bañares.

Título: "Velocity map imaging study of the photodissociation of CH₃SH at 205 nm. Internal energy distribution of the SH fragment."

Ref. revista: ChemPhysChem

Clave: A Volumen: 7 Páginas, inicial: 1682 final: 1686 Fecha: 2006

161.-

Autores (p.o. de firma): J. F. Castillo, F. J. Aoiz and L. Bañares.

Título: "Quasiclassical trajectory study of the Cl+CH₄ reaction dynamics on a QCISD interpolated potential energy surface."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: 125 Páginas: 124316-1 final: 124316-10 Fecha: 2006

162.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. Brouard, C. J. Eyles, J. F. Castillo, and V. Sáez Rábanos.

Título: Cumulative reaction probabilities: A comparison between quasiclassical and quantum mechanical results.

Ref. revista: Journal of Chemical Physics Clave: A Volumen: 125 Páginas: 144105-1 final: 144105-12 Fecha: 2006

163.-

Autores (p.o. de firma): J. Aldegunde, J. M. Alvaríño, M. P. de Miranda, V. Sáez Rábanos and F. J. Aoiz.

Título: "Mechanism and control of the F+H₂ reaction at low and ultralow collision energies."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: 125 Páginas: 133104-1 final: 133104-9 Fecha: 2006

164.-

Autores (p.o. de firma): J. Aldegunde, J. M. Alvaríño, B. K. Kendrick, V. Sáez Rábanos, M. P. de Miranda and F. J. Aoiz.

Título: "Analysis of the H+D₂ reaction mechanism through consideration of the intrinsic reactant polarisation."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: 8 Páginas: 4881 final: 4896 Fecha: 2006

***165.-**

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares and V. J. Herrero

Título: The Dynamics of Insertion Reactions of H₂ Molecules with Excited Atoms.

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A (Feature Article)

Clave: A Volumen: 110 Páginas: 12546 final: 12565 Fecha: 2006

***166.-**

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. Sáez Rábanos, T. González-Lezana and D. E. Manolopoulos

Título: "A statistical quasiclassical trajectory model for atom-diatom insertion reactions."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics (Communication)

Clave: A Volumen: 126 Páginas: 161101-1 final: 161101-5 Fecha: 2007

***167.-**

Autores (p.o. de firma): J. Klos, F. J. Aoiz, J. E. Verdasco, M. Brouard, S. Marinakis, S. Stolte

Título: "Fully quantum state resolved inelastic scattering between He and NO(X²Π)".

Ref. revista: Journal of Chemical Physics (Communication)

Clave: A Volumen: 127 Páginas: 031102-1 final: 031102-4 Fecha: 2007 D.O.I. 10.1063/1.2756826

168.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, M. P. de Miranda and V. Sáez Rábanos

Título: "Constraints at the transition state of the D+H₂ reaction: quantum bottlenecks vs. stereodynamics."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: 9 Páginas: 5367-5373: Fecha: 2007 D.O.I. 10.1039/b709161c

169.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, T. González-Lezana and V. Sáez Rábanos

Título: A stringent test of the statistical quasiclassical trajectory model for the H₃⁺ exchange reaction: A comparison with rigorous statistical quantum mechanical results.

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: 127 Páginas: 174109 -1 final: 174109 -15 Fecha: 2007 D.O.I. 10.1063/1.2774982

- 170.-**
 Autores (p.o. de firma): Jesús Aldegunde, F. J. Aoiz, V. Sáez Rábanos, B. K. Kendrick, and M. P. de Miranda
 Título: "The canonical and other mechanisms of elementary chemical reactions."
 Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics
 Clave: A Volumen: **9** Páginas: 5794-5808 Fecha: 2007 D.O.I. 10.1039/b707190f
-
- 171.-**
 Autores (p.o. de firma): N. Bulut, J.F. Castillo, F. J. Aoiz and L. Bañares
 Título: Real wave packets and quasiclassical trajectory studies of the H⁺ + HLi reaction.
 Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics
 Clave: A Volumen: **10** Páginas: 821-827 Fecha: 2008 D.O.I. 10.1039/b712625e
-
- 172.-**
 Autores (p.o. de firma): E. Carmona-Novillo, T. Gonzalez-Lezana, O. Roncero, P. Honvault, J.-M. Launay, N. Bulut, F. Javier Aoiz, L. Bañares, A. Trottier, and E. Wrede
 Título: "On the dynamics of the H⁺ + D₂ (v=0, j=0) → HD + D⁺ reaction: A comparison between theory and experiment."
 Ref. revista: Journal of Chemical Physics
 Clave: A Volumen: **128** Páginas: 014304-1—014304-15 Fecha: 2008 D.O.I.: 10.1063/1.2812555
-
- 173.-**
 Autores (p.o. de firma): Jesús Aldegunde, F. Javier Aoiz, and Marcelo P. de Miranda
 Título: "Quantum mechanical limits to the control of atom-diatom chemical reactions through the polarisation of the reactants."
 Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics
 Clave: A Volumen: **10** Páginas: 1139-1150 Fecha: 2008 D.O.I.: 10.1039/b716482c
-
- 174.-**
 Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, and V. Sáez Rábanos.
 Título: "Cumulative reaction probabilities and transition state properties: A study of the F+H₂ reaction and its deuterated isotopic variants."
 Ref. revista: Journal of Chemical Physics
 Clave: A Volumen: **129** Páginas 024305-1--024305-9 Fecha: 2008 D.O.I: 10.1063/1.2952672
-
- 175.-**
 Autores (p.o. de firma): J. Klos, M. H. Alexander, M. Brouard, C. J. Eyles, and F. J. Aoiz
 Título: A new potential energy surface for OH(A ²Σ)-Ar: The van der Waals complex and scattering dynamics.
 Ref. revista: Journal of Chemical Physics
 Clave: A Volumen: **129** Páginas: 054301-1—054301-12 Fecha: 2008 D.O.I.: 10.1063/1.2957745
-
- 176.-**
 Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, T. González-Lezama, and V. Sáez-Rábanos.
 Título: "A comparison of quantum and quasiclassical statistical models for reactions of electronically excited atoms with molecular hydrogen".
 Ref. revista: Journal of Chemical Physics
 Clave: A Volumen: **129** Páginas: 094305-1, 094305-12 Fecha: 2008 D.O.I.: 10.1063/1.2969812
-
- *177.-**
 Autores (p.o. de firma): P.G. Jambrina, J. Aldegunde, J. F. Castillo, F. J. Aoiz, V. Sáez-Rábanos.
 Título: "Vibrationally inelastic collisions of H+D₂. A comparison of quantum mechanical, quasi-classical and experimental results."
 Ref. revista: Journal of Chemical Physics (Communication)
 Clave: A Volumen: **130**, Páginas: 031102-1, 031102-4 Fecha: 2009 D.O.I 10.1063/1.3065668
-
- 178.-**
 Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. Brouard, C. J. Eyles, J. Klos, and M. P. de Miranda.
 Título: "The collisional depolarization of ²S+¹Σ radicals by closed shell atoms: Theory and application to OH(A ²Σ⁺)+Ar".
 Ref. revista: Journal of Chemical Physics
 Clave: A Volumen: **130**, Páginas: 044305-1, 044305-12 Fecha: 2009 D.O.I.: 10.1063/1.3061496.
-
- 179.-**
 Autores (p.o. de firma): M. Brouard, A. Bryant, Y.-P. Chang, R. Cireasa, C. J. Eyles, A. M. Green, S. Marinakis, F. J. Aoiz, and J. Klos.
 Título: "Collisional depolarization of OH(A) with Ar: Experiment and theory".
 Ref. revista: Journal of Chemical Physics
 Clave: A Volumen: **130**, Páginas: 044306-1, 044306-13 Fecha: 2009 D.O.I.10.1063/1.3061551.

180.-

Autores (p.o. de firma): Pablo G. Jambrina, F. J. Aoiz, Chris Eyles, Victor Herrero, and Vicente Sáez-Rábanos
Título: "Cumulative reaction probabilities and transition state properties: A study of the $H^+ + H_2$ and $H^+ + D_2$ proton exchange reactions".

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **130**, Páginas: 184303-1--184303-10 Fecha: 2009 D.O.I.: 10.1063/1.3129343

181.-

Autores (p.o. de firma): T. González-Lezana, P. Honvault, P. G. Jambrina, F. J. Aoiz, and J.-M. Launay
Título: "Effects of the rotational excitation of D_2 and of the potential energy surface on the $H^+ + D_2 \rightarrow HD + D^+$ reaction".

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **131**, Páginas: 044315 Fecha: 2009 D.O.I.: 10.1063/1.3183538

182.-

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, H. Chadwick, Y.-P. Chang, R. Cireasa, C. J. Eyles, A. O. La Via, N. Screen, F. J. Aoiz, and J. Klos.

Título: "Collisional depolarization of NO(A) by He and Ar studied by quantum beat spectroscopy".

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **131**, Páginas: 104307 Fecha: 2009 D.O.I.: 10.1063/1.3212608

183.-

Autores (p.o. de firma): P. Bargaño, P. G. Jambrina, J. M. Alvarino, M. L. Hernández, F. J. Aoiz, M. Menéndez, E. Verdasco, and T. Gonzalez-Lezana.

Título: "The dynamics of the $O(^1D) + HCl \rightarrow OH + Cl$ reaction at 0.26 eV collision energy: A comparison between theory and experiment".

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

Clave: A Volumen: **113**, Páginas: 14237-14250 Fecha: 2009 DOI: 10.1021/jp902336s

184.-

Autores (p.o. de firma): N. Bulut, J. F. Castillo, L. Bañares, and F. J. Aoiz

Título: "Quantum Mechanical Wave Packet and Quasiclassical Trajectory Calculations for the $Li + H_2^+$ Reaction".

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

Clave: A Volumen: **113**, Páginas: 14657-14663 Fecha: 2009 DOI: 10.1021/jp904429e

185.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz and J. E. Verdasco, M. Brouard, J. Klos, S. Marinakis, and S. Stolte

Título: "Inelastic Scattering of He Atoms and NO($X^2\Pi$) Molecules: The Role of Parity on the Differential Cross Section".

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

Clave: A Volumen: **113**, Páginas: 14636-14649 Fecha: 2009. DOI: 10.1021/jp9043732

186.-

Autores (p.o. de firma): M. L. Costen, R. Livingstone, K. G. McKendrick and G. Paterson, M. Brouard, H. Chadwick, Y.-P. Chang, C. J. Eyles, F. J. Aoiz, and J. Klos.

Título: "Elastic Depolarization of OH(A) by He and Ar: A Comparative Study"

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

Clave: A Volumen: **113**, Páginas: 15156-15170 Fecha: 2009 DOI: 10.1021/jp905348c

187.-

Autores (p.o. de firma): P. G. Jambrina, F. J. Aoiz, N. Bulut, S. C. Smith, G. G. Balint-Kurti, and M. Hankel.

Título: "The dynamics of the $H^+ + D_2$ reaction: A comparison of quantum mechanical wavepacket, quasi-classical and statistical-quasi-classical results."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **12** Páginas: 1102-1115 Fecha: 2010 DOI: 10.1039/b919914d

188.-

Autores (p.o. de firma): M. Agúndez, J. Cernicharo, M. Guélin, C. Kahane, E. Roue, J. Klos, F. J. Aoiz, F. Lique, N. Marcelino, J. R. Goicoechea, M. González García, C. A. Gottlieb, M. C. McCarthy, and P. Thaddeus.

Título: "Astronomical identification of CN^- , the smallest observed molecular anion".

Ref. revista: Astronomy and Astrophysics

Clave: A Volumen: **517** Páginas: L2/1-5 Fecha: 2010 DOI: 10.1051/0004-6361/201015186

189.-

Autores (p.o. de firma): N. Balucani, P. Casavecchia, F. J. Aoiz, L. Bañares, J.-M. Launay, B. Bussery-Honvault, P. Honvault.
Título: "Dynamics of the C(¹D)+H₂ reaction. A comparison of crossed molecular beam experiments with quantum mechanical and quasiclassical trajectory calculations on the first two singlet (1¹A' and 1¹A'") potential energy surfaces".

Ref. revista: Molecular Physics

Clave: A Volumen: **108** Páginas: 373-380

Fecha: 2010 DOI: 10.1080/00268970903476696

190.-

Autores (p.o. de firma): P. G. Jambrina, J. M. Alvaríño, F. J. Aoiz, V. J. Herrero, and V. Sáez-Rábanos.

Título: "Reaction dynamics of the D⁺+H₂ reaction: A comparison of theoretical approaches".

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **12** Páginas: 12591-12603

Fecha: 2010

DOI: 10.1039/c0cp00311e

191.-

Autores (p.o. de firma): J. Aldegunde, P. G. Jambrina, V. Sáez-Rábanos, M. P. De Miranda, and F. J. Aoiz.

Título: "Quantum mechanical mechanisms of inelastic and reactive H+D₂(v=0,j=2) collisions."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **12** Páginas: 13626-13636

Fecha: 2010

DOI:10.1039/c0cp00596g

192.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz and M. P. De Miranda.

Título: "Stereodynamics: Orientation and alignment in Chemistry". Chpt. 9 in "Tutorials in Reaction Dynamics". Eds. M. Brouard, and C. Vallance. Royal Society of Chemistry, Cambridge (2010)

Clave: **CL** Volumen: Páginas: 278-332

Fecha: 2010

ISBN: 978-0-85404-158-9

193.-

Autores (p.o. de firma): J. Aldegunde, P. G. Jambrina, M. P. De Miranda, V. Sáez-Rábanos, and F. J. Aoiz.

Título: "Stereodynamics of the F+HD (v=0,j=1) reaction: direct vs. resonant mechanisms."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **13** Páginas: 8345-8358

Fecha: 2011

DOI: 10.1039/c0cp02457k

194.-

Autores (p.o. de firma): P. Bargeño, P. G. Jambrina, J. M. Alvaríño, M. Menéndez, E. Verdasco, M. Hankel, S. C. Smith, F. J. Aoiz, and T. González-Lezana.

Título: "Energy dependent dynamics of the O(¹D)+HCl reaction".

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **13** Páginas: 8502-8514

Fecha: 2011

DOI: 10.1039/c0cp02619k

195.-

Autores (p.o. de firma): J. F. Castillo, F. J. Aoiz, and B. Martínez-Haya.

Título: "Theoretical study of the dynamics of the Cl+O₃ reaction I. *Ab initio* potential energy surface and quasiclassical trajectory results."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **13** Páginas: 8537-8548

Fecha: 2011

DOI: 10.1039/c0cp02793f

196.-

Autores (p.o. de firma): P. G. Jambrina, E. García, Victor Herrero, Vicente Sáez-Rábanos, and F. J. Aoiz.

Título: "Can quasiclassical trajectory calculations reproduce the extreme kinetic isotope effect observed in the muonic isotopologues of the H + H₂ reaction?"

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **135**, Páginas: 034310-1 a 034310-6

Fecha: 2011

D.O.I. 10.1063/1.3611400

197.-

Autores (p.o. de firma): L. González-Sánchez, J. Aldegunde, P. G. Jambrina, and F. J. Aoiz.

Título: "Dynamical regimes on the Cl+H₂ collisions: Inelastic rainbow scattering."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **135** Páginas: 064301-1 a 064301-10

Fecha: 2011

DOI:10.1063/1.3618721

198.-

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, H. Chadwick, C. J. Eyles, F. J. Aoiz, and J. Klos.

Título: "The *k-j-j'* vector correlation in inelastic and reactive scattering".

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **135**, Páginas: 084305-1 a 084305-13.

Fecha: 2011

DOI:10.1063/1.3625637

199.-

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, H. Chadwick, Y.-P. Chang, C. J. Eyles, F. J. Aoiz, and J. Klos.

Título: "Collisional angular momentum depolarization of OH(A) and NO(A) by Ar: A comparison of mechanisms."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **135**, Páginas: 084306-1 a 084306-17 Fecha: 2011 DOI:10.1063/1.3625638

***200.-**

Autores (p.o. de firma): C. J. Eyles, M. Brouard, C.-H. Yang, J. Klos, F. J. Aoiz, A. Gijsbertsen, A. E. Wisekerke, and S. Stolte.

Título: "Interference structures in the differential cross-sections for inelastic scattering of NO+Ar"

+ Ref. revista: **Nature Chemistry**

Clave: A Volumen: **3**, Páginas: 597-602 Fecha: 2011 DOI: 10.1038/NCHEM.1071

201.-

Autores (p.o. de firma): S. Marinakis, B. J. Howard, F. J. Aoiz, and J. Klos.

Título: "Product rotational alignment in NO(X) + Kr collisions."

Ref. revista: Chemical Physics Letters

Clave: A Volumen: **512**, Páginas: 161-166 Fecha: 2011 DOI: 10.1016/j.cplett.2011.07.011

202.-

Autores (p.o. de firma): M. Lara, P. G. Jambrina, A. J. C. Varandas, J.-M. Launay, and F. J. Aoiz.

Título: "On the role of dynamical barriers in barrierless reactions at low energies."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **135** Páginas: 134313-1 134313-14 Fecha: 2011 DOI:10.1063/1.3644337

203.-

Autores (p.o. de firma): J. Aldegunde, F. J. Aoiz, L. González_Sánchez P. G. Jambrina, M. P. de Miranda, and V. Sáez-Rábanos.

Título: "Orientation effects in Cl+H₂ inelastic collisions: characterization of the mechanisms"

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **14** Páginas: 2911-2920. Fecha: 2012 DOI: 10.1039/c2cp23252a

204.-

Autores (p.o. de firma): P. G. Jambrina, J. M. Alvaríño, D. Gerlich, M. Hankel, V. J. Herrero, and V. Sáez-Rábanos, and F. J. Aoiz.

Título: "Dynamics of the D⁺+ H₂ and H⁺ + D₂ reactions: A detailed comparison between theory and experiment."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **14** Páginas: 3346-3359 Fecha: 2012 DOI:10.1039/C2CP23479C

205.-

Autores (p.o. de firma): Emine Aslan, Niyazi Bulut, Jesús F. Castillo, L. Bañares, O. Roncero, and F. J. Aoiz.

Título: "Accurate Time Dependent Wave Packet Study of the Li+H₂⁺ reaction and its isotopic variants."

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

Clave: A Volumen: **116** Páginas: 132-138. Fecha: 2012 DOI: 10.1021/jp210254t

206.-

Autores (p.o. de firma): C. J. Eyles, M. Brouard, H. Chadwick, B. Hornung, B. Nichols, C.-H. Yang, J. Klos, F. J. Aoiz, A. Gijsbertsen, A. E. Wisekerke, and S. Stolte.

Título: "Fully Λ -doublet resolved state-to-state differential cross-sections for the inelastic scattering of NO(X) with Ar."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **14**, Páginas: 5403-5419 Fecha: 2012 DOI: 10.1039/c2cp23258h

207.-

Autores (p.o. de firma): C. J. Eyles, M. Brouard, H. Chadwick, F. J. Aoiz, J. Klos, X. Zhang, A. Gijsbertsen, and S. Stolte.

Título: "The effect of parity conservation on the spin-orbit conserving and spin-orbit changing differential cross sections for the inelastic scattering of NO(X) by Ar."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **14**, Páginas: 5420-5439 Fecha: 2012 DOI: 10.1039/c2cp23259f

208.-

Autores (p.o. de firma): R. Pérez de Tudela, F. J. Aoiz, Y. Suleimanov, and David Manolopoulos.
Título: "Chemical Reaction Rates from Ring Polymer Molecular Dynamics: Zero Point Energy Conservation in $\text{Mu} + \text{H}_2 \rightarrow \text{MuH} + \text{H}$."

Ref. revista: The Journal of Physical Chemistry Letters

Clave: A Volumen: **3** Páginas: 493-497 Fecha: 2012 DOI: 10.1021/jz201702q

209.-

Autores (p.o. de firma): Pablo G. Jambrina, Jacek Klos, F. Javier Aoiz and Marcelo P. de Miranda.

Título: "New findings regarding the NO angular momentum orientation in Ar—NO($X^2\Pi$) collisions."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **14** Páginas: 9826-9837 Fecha: 2012 DOI: 10.1039/C2CP41043E

210.-

Autores (p.o. de firma): P. G. Jambrina, J. Aldegunde, M. P. de Miranda, V. Sáez-Rábanos and F. J. Aoiz.

Título: "Three-vector correlation in statistical reactions: the role of the triatomic parity"

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **14** Páginas: 9977-9987 Fecha: 2012 DOI: 10.1039/C2CP41049D

***211.-**

Autores (p.o. de firma): Justin Jankunas, Richard N. Zare, Foudhil Bouakline, Stuart C. Althorpe, Diego Herráez-Aguilar, F. J. Aoiz.

Título: "Seemingly Anomalous Angular Distributions in H + D₂ Reactive Scattering."

Ref. revista: **Science**

Clave: A Volumen: **336** Páginas: 1687-1690 Fecha: 2012 DOI: 0.1126/science.1221329

212.-

Autores (p.o. de firma): Jacek Klos, F. J. Aoiz, M. Menéndez, M. Brouard, H. Chadwick, and C. J. Eyles.

Título: "Ab Initio studies of the interaction potential for the Xe—NO($X^2\Pi$) van der Waals complex: Bound states and fully quantum and quasi-classical scattering. New findings regarding the NO angular momentum orientation in Ar—collisions."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **137** Páginas: 014312 (01-14) Fecha: 2012 DOI: 10.1063/1.4731286

***213.-**

Autores (p.o. de firma): Zahra Homayoon, Pablo G. Jambrina, F. Javier Aoiz, and Joel M. Bowman.

Título: "Communication: Rate coefficients from quasiclassical trajectory calculations from the reverse reaction: The $\text{Mu} + \text{H}_2$ reaction re-visited."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics (Communication)

Clave: A Volumen: **137** Páginas: 021102 (1-4) Fecha: 2012 DOI: 10.1063/1.4734316

214.-

Autores (p.o. de firma): E. García, F. J. Aoiz, and A. Laganà.

Título: "A classical versus quantum mechanics study of the $\text{OH} + \text{CO} \rightarrow \text{H} + \text{CO}_2$ ($J=0$) reaction."

Ref. revista: Theoretical Chemistry Accounts

Clave: A Volumen: **131** Páginas: 1262 (1-11) Fecha: 2012 DOI: 10.1007/s00214-012-1262-3

215.-

Autores (p.o. de firma): Aditya N. Panda, Diego Herráez-Aguilar, Pablo G. Jambrina, Jesús Aldegunde, Stuart C. Althorpe and F. Javier Aoiz.

Título: "A state-to-state dynamical study of the $\text{Br} + \text{H}_2$ reaction: comparison of quantum and classical trajectory results."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **14** Páginas: 13067-13075 Fecha: 2012 DOI: 10.1039/C2CP41825H

216.-

Autores (p.o. de firma): P. G. Jambrina, E. García, V. J. Herrero, V. Sáez-Rábanos, and F. J. Aoiz.

Título: "Dynamics of the reactions of muonium and deuterium atoms with vibrationally excited hydrogen molecules: tunneling and vibrational adiabaticity."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **14** Páginas: 14596-14604 Fecha: 2012 DOI: 10.1039/C2CP42130E

***217.-**

Autores (p.o. de firma): E. Aslan, N. Bulut, J. F. Castillo, L. Bañares, F. J. Aoiz, and O. Roncero.

Título: "Accurate time-dependent wave packet study of the $\text{H}^+ + \text{LiH}$ reaction at early universe conditions."

Ref. revista: The Astrophysical Journal.

- Clave: A Volumen: **759** Páginas: 31 (6pp) Fecha: 2012 DOI:10.1088/0004-637X/759/1/31
-
- *218.-**
 Autores (p.o. de firma): J. Aldegunde, D. Herráez-Aguilar, P. G. Jambrina, F. J. Aoiz, J. Jankunas, and R. N. Zare
 Título: "H + D₂ Reaction Dynamics in the Limit of Low Product Recoil Energy".
 Ref. revista: Journal of Physical Chemistry Letters
 Clave: A Volumen: **3(20)** Páginas: 2959-2963 Fecha: 2012 DOI: 10.1021/jz301192f217
-
- 219.-**
 Autores (p.o. de firma): H. Chadwick, M. Brouard, Y.-P. Chang, C. J. Eyles, T. Perkins, S. A. Seamons, J. Klos, M. H. Alexander, and F. J. Aoiz
 Título: "A new potential energy surface for OH(A ²Σ⁺)-Kr: The van der Waals complex and inelastic scattering"
 Ref. revista: Journal of Chemical Physics
 Clave: A Volumen: **137** Páginas: 154305 Fecha: 2012 DOI:10.1063/1.4757859
-
- 220.-**
 Autores (p.o. de firma): Pablo G. Jambrina, M. Lara, M. Menéndez, J.-M. Launay, and F. J. Aoiz.
 Título: "Rate coefficients from quantum and quasi-classical cumulative reaction probabilities for the S(¹D) + H₂ reaction."
 Ref. revista: Journal of Chemical Physics
 Clave: A Volumen: **137** Páginas: 164314 Fecha: 2012 DOI: 10.1063/1.4761894
-
- 221.-**
 Autores (p.o. de firma): P. G. Jambrina, I. Montero, F. J. Aoiz, J. Aldegunde, and J. M. Alvaríño
 Título: "Elucidation of the O(¹D) + HF → F + OH mechanism by means of quasiclassical trajectories."
 Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics
 Clave: A Volumen: **14** Páginas:16338-16348 Fecha: 2012 DOI: 10.1039/c2cp42287e
-
- 222.-**
 Autores (p.o. de firma): Yury V. Suleimanov, Ricardo Pérez de Tudela, Pablo G. Jambrina, Jesús F. Castillo, Vicente Sáez-Rábanos, David E. Manolopoulos, and F. Javier Aoiz
 Título: "A ring polymer molecular dynamics study of the isotopologues of the H + H₂ reaction."
 Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics
 Clave: A Volumen: **15** Páginas:3655-3665 Fecha: 2013 DOI: 10.1039/c2cp44364c
-
- 223.-**
 Autores (p.o. de firma): M. Brouard, H. Chadwick, C. J. Eyles, B. Hornung, Nichols, F. J. Aoiz, P. G. Jambrina, and S. Stolte
 Título: "Rotational alignment effects in NO(X) + Ar inelastic collisions: An experimental study"
 Ref. revista: Journal of Chemical Physics
 Clave: A Volumen: **138** Páginas: 104310-1/104310-13 Fecha: 2013 DOI: 10.1063/1.4792159
-
- 224.-**
 Autores (p.o. de firma): M. Brouard, H. Chadwick, C. J. Eyles, B. Hornung, B. Nichols, F. J. Aoiz, P. G. Jambrina, Stolte, and M. P. de Miranda.
 Título: "Rotational alignment effects in NO(X) + Ar inelastic collisions: An theoretical study"
 Ref. revista: Journal of Chemical Physics
 Clave: A Volumen: **138** Páginas: 104309-1/104309-15 Fecha: 2013 DOI: 10.1063/1.4792158
-
- 225.-**
 Autores (p.o. de firma): L. González-Sánchez, J. Aldegunde, P. G. Jambrina, and F. J. Aoiz.
 Título: "Reaction Dynamics and Mechanism of the Cl + HD(v = 1) Reaction: A Quantum Mechanical Study"
 Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A
 Clave: A Volumen: **117** Páginas: 7030-7041 Fecha: 2013 DOI: 10.1021/jp312758r
-
- 226.-**
 Autores (p.o. de firma): D. Herráez-Aguilar, J. Aldegunde, V. Sáez-Rábanos, M. P. de Miranda, and F. J. Aoiz.
 Título: "The reactive collision mechanism evinced: stereodynamical control of the elementary Br+H₂→H+HBr reaction"
 Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics
 Clave: A Volumen: **15** Páginas: 13513 – 13522 Fecha: 2013 DOI: 10.1039/ c3cp51271a.
-
- 227.-**
 Autores (p.o. de firma): M. Brouard, H. Chadwick, C. J. Eyles, B. Hornung, B. Nichols, J. M. Scott, F. J. Aoiz, J. Klos, S. Stolte and X. Zhang.
 Título: "The fully quantum state-resolved inelastic scattering of NO(X) + Ne: experiment and theory"
 Ref. revista: Molecular Physics
 Clave: A Volumen: **111** Páginas: 1759– 1771 Fecha: 2013 DOI: 10.1080/00268976.2013.783940.
-

228.-

Autores (p.o. de firma): J. Aldegunde, P.G. Jambrina, E. García, V.J. Herrero, V. Sáez-Rábanos and F.J. Aoiz.
Título: **Topical Review:** Understanding the reaction between muonium atoms and hydrogen molecules: zero point energy, tunnelling, and vibrational adiabaticity”
Ref. revista: Molecular Physics
Clave: A Volumen: **111** Páginas: 3169 – 3181 Fecha: 2013 DOI: 10.1080/00268976.2013.815399.

***229.-**

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, B. Hornung, and F. J. Aoiz
Título: “Origin of collision- induced molecular orientation ”
Ref. revista: Physical Review Letters
Clave: A Volumen: **111** Páginas: 183202 (1-4) Fecha: 2013 DOI: 10.1103/PhysRevLett.111.183202

230.-

Autores (p.o. de firma): Julia H. Lehman, Marsha I. Lester, Jacek Klos, Millard H. Alexander, Paul J. Dagdigian, Diego Herráez-Aguilar, F. Javier Aoiz, Mark Brouard, Helen Chadwick, Tom Perkins, Scott A. Seamons
Título: “Electronic Quenching of OH A $2\Sigma^+$ Induced by Collisions with Kr Atoms”
Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A
Clave: A Volumen: **117** Páginas: 13481 Fecha: 2013 DOI: 10.1021/jp407035p

231.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, J. Aldegunde, V. J. Herrero, V. Sáez-Rábanos
Título: “Comparative dynamics of the two channels of the reaction of D+MuH”
Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics
Clave: A Volumen: **16** Páginas: 9808-9818 Fecha: 2014 DOI: 10.1039/C3CP53908C.

232.-

Autores (p.o. de firma): R. Pérez de Tudela, Y. V. Suleimanov, M. Menéndez, J. F. Castillo and F. J. Aoiz
Título: “A ring polymer molecular dynamics study of the Cl+O₃ reaction.”
Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics
Clave: A Volumen: **16** Páginas: 2920-2927 Fecha: 2014 DOI: 10.1039/C3CP54405B.

233.-

Autores (p.o. de firma): H. Chadwick, M. Brouard, Y.-Pin Chang, C. Eyles, G. McCrudden, T. Perkins, S. Seamons, J. Klos, M. H. Alexander, Paul Dagdigian, Diego Herráez-Aguilar, and F. J. Aoiz
Título: “The collisional depolarization of OH(A $2\Sigma^+$) and NO(A $2\Sigma^+$) with Kr.”
Ref. revista: Journal Chemical Physics
Clave: A Volumen: **140** Páginas: 054306-1—054306-14 Fecha: 2014 DOI: 10.1063/1.4863446

***234.-**

Autores (p.o. de firma): Justin Jankunas, Mahima Sneha, Richard N. Zare, Foudhil Bouakline, Stuart C. Althorpe, Diego Herráez-Aguilar, and F. J. Aoiz.
Título: “Perspective - Physical Sciences – Chemistry: Is the simplest chemical reaction really so simple?”
Ref. revista: Proceedings of the National Academic of Sciences (PNAS)
Clave: A Volumen: **111** (1) Páginas: 15-20 Fecha: 2014 DOI: 10.1073/pnas.1315725111
(Journal Impact factor 9.737)

235.-

Autores (p.o. de firma): H. Chadwick, M. Brouard, T. Perkins, and F. J. Aoiz
Título: “Collisional depolarisation in electronically excited radicals.”
Ref. revista: International Reviews in Physical Chemistry
Clave: A Volumen: **33** Páginas: 79 Fecha: 2014 DOI: 10.1080/0144235X.2014.891855

236.-

Autores (p.o. de firma): Helen Chadwick, Bethan Nichols, Sean D. S. Gordon, Balazs Hornung, Eleanor Squires, Mark Brouard, Jacek Klos, Millard H. Alexander, F. Javier Aoiz, and Steven Stolte.
Título: “Inelastic Scattering of NO by Kr: Rotational Polarization over a Rainbow.”
Ref. revista: The Journal Physical Chemistry Letters,
Clave: A Volumen: **5** Páginas: 3296-3301 Fecha: 2014 DOI: 10.1021/jz501621c

237.-

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, H. Chadwick, S. D. S. Gordon, B. Hornung, B. Nichols, J. Klos, F. J. Aoiz, and S. Stolte
Título: "Fully quantum state-resolved inelastic scattering of NO(X) + Kr: Differential cross sections and product rotational alignment."

Ref. revista: Journal Chemical Physics

Clave: A Volumen: **141** Páginas: 164306-1—164306-14 Fecha: 2014 DOI: 10.1063/1.4897558

***238.-**

Autores (p.o. de firma): S. Gómez-Carrasco a, N. Bulut, O. Roncero, Alfredo Agudo, F. Javier Aoiz, Jesús F. Castillo, Javier R. Goicochea, Benjamin Godard, Mireya Etxaluz and José Cernicharo.

Título: "OH⁺ in Astrophysical Media: State-to-state formation rates, Einstein coefficients and inelastic collision rates with He"

Ref. revista: The Astrophysical Journal

Clave: A Volumen: **794** Páginas: 33 (16pp) Fecha: 2014 (October) DOI:10.1088/0004-637X/794/1/33

239.-

Autores (p.o. de firma): D. Herráez-Aguilar, P. G. Jambrina, M. Menéndez, J. Aldegunde, R. Warmbier and F. J. Aoiz

Título: "Effect of the reactants internal excitation on the dynamics of the C⁺ + H₂ reaction"

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **16** Páginas: 24800 - 24812 Fecha: 2014 DOI: 10.1039/c4cp03289f

240.-

Autores (p.o. de firma): Ricardo Pérez de Tudela, Yury V. Suleimanov, Jeremy O. Richardson, Vicente Sáez Rábanos, William H. Green, and F. J. Aoiz

Título: "Stress Test for Quantum Dynamics Approximations: Deep Tunneling in the Muonium Exchange Reaction D + HMu → DMu + H"

Ref. revista: The Journal of Physical Chemistry Letters

Clave: A Volumen: **5** Páginas: 4219–4224 Fecha: 2014 D.O.I.: 10.1021/jz502216g

***241.-**

Autores (p.o. de firma): B. Nichols, H. Chadwick, S. D. S. Gordon, C. J. Eyles, B. Hornung, M. Brouard, M. H. Alexander, F. J. Aoiz, A. Gijbbersen, and S. Stolte.

Título: "Steric effects and quantum interference in the inelastic scattering of NO(X)+Ar"

Ref. revista: **Chemical Science**

Clave: A Volumen: **6** Páginas: 2202-2210 Fecha: 2015 DOI: 10.1039/c4sc03842h

242.-

Autores (p.o. de firma): M. Lara, P. G. Jambrina, J.-M. Launay, and F. J. Aoiz

Título: "Beyond universality: Parametrizing ultracold complex-mediated reactions using statistical assumptions"

Ref. revista: Physical Review A (Communication)

Clave: A Volumen: **91** Páginas: 030701(R) Fecha: 2015 (March) DOI: 10.1103/PhysRevA.91.030701

243.-

Autores (p.o. de firma): N. Bulut, J.F. Castillo, P. G. Jambrina, J. Klos, O. Roncero, F. J. Aoiz, and L. Bañares

Título: "Accurate Time-Dependent Wave Packet Calculations for the O⁺ + H₂ → OH⁺ + H Ion-Molecule Reaction"

Ref. revista: The Journal of Physical Chemistry A

Published on line: March 30, 2015 (Article)

Clave: A Volumen: **119** Páginas: 11951 Fecha: 2015 DOI: 10.1021/acs.jpca.5b00815

244.-

Autores (p.o. de firma): T. Perkins, D. Herráez-Aguilar, G. McCrudden, J. Klos, F.J. Aoiz, and M. Brouard

Título: "Surface-hopping trajectories for OH (A²Σ⁺) + Kr: Extension to the 1A" state"

Ref. revista: The Journal Chemical Physics

Clave: A Volumen **142** Páginas: 144307 Fecha: 2015 DOI: 10.1063/1.4916972

***245.-**

Autores (p.o. de firma): Pablo G. Jambrina, Diego Herráez-Aguilar, F. Javier Aoiz, Mahima Sneha, Justinas Jankunas, and Richard N. Zare

Título: "Quantum interference between H + D₂ quasiclassical reaction mechanisms"

Ref. revista: **Nature Chemistry**.

Published online: 29 June 2015

Clave: A Volumen **7**, Páginas: 661–667 Fecha: 2015 DOI: 10.1038/NCHEM.2295

246.-

Autores (p.o. de firma): J. Aldegunde, L. González-Sánchez, P. G. Jambrina, V. Sáez-Rábanos, and F. J. Aoiz
Título: "A semiclassical treatment of the $\ell - j$ correlation in atom-diatom collisions"
Ref. revista: Journal of Chemical Physics
Clave: A Volumen **143** Páginas: 064302-1-- 064302-12 Fecha: 2015 DOI: doi: 10.1063/1.4928283

247.-

Autores (p.o. de firma): M. Menéndez, J. F. Castillo, B. Martínez-Haya, and F. J. Aoiz
Título: "The Cl + O₃ reaction: a detailed QCT simulation of molecular beam experiments"
Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics
Clave: A Volumen: **17** Páginas: 25471- 25482 Fecha: 2015 DOI: 10.1039/c5cp04323a

248.-

Autores (p.o. de firma): J. Aldegunde, P. G. Jambrina, L. González-Sánchez, V. J. Herrero, and F. J. Aoiz
Título: "Influence of the Reactants Rotational Excitation on the H + D₂($v = 0, j$) Reactivity".
Ref. revista: The Journal of Physical Chemistry A
Published on line: August 25, 2015 (Article)
Clave: A Volumen: **119** Páginas:12245 Fecha: 2015 DOI: 10.1021/acs.jpca.5b06286

249.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. Brouard, S. D. S. Gordon, B. Nichols, S. Stolte and V. Walpole
Título: "**Perspective**: A new perspective: imaging the stereochemistry of molecular collisions"
Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics
Published 11/11/2015
Clave: A Volumen: **17** Páginas: 30210--30228 Fecha: 2015 DOI: 10.1039/C5CP03273C

250.-

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, H. Chadwick, S.D.S. Gordon, B. Hornung, B. Nichols, F.J. Aoiz, and S. Stolte
Título: "Rotational orientation effects in NO(X) + Ar inelastic collisions"
Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A
First published online:
Clave: A Volumen: **119** Páginas: 12404-12416 Fecha: 2015 DOI: 10.1021/acs.jpca.5b07846

251.-

Autores (p.o. de firma): M. Lara, P. G. Jambrina, F. J. Aoiz, and J.-M. Launay
Título: "Cold and ultracold dynamics of the barrierless D⁺⁺ H₂ reaction: Quantum reactive calculations for $\sim R^{-4}$ long range interaction potentials"
Ref. revista: Journal of Chemical Physics
Clave: A Volumen: **143** Páginas: 204305 Fecha: 2015 (December) DOI: 10.1063/1.4936144

***252.-**

Autores (p.o. de firma): Pablo G. Jambrina, J. Aldegunde, F. Javier Aoiz, Mahima Sneha, and Richard N. Zare
Título: "Effects of reagent rotation on interferences in the product angular distributions of chemical reactions"
Ref. revista: **Chemical Science**
Published online
Clave: A Volumen **7** Páginas: 642-649 Fecha: 2016 DOI: 10.1039/C5SC03373J

253.-

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, H. Chadwick, S.D.S. Gordon, B. Hornung, B. Nichols, F.J. Aoiz, and S. Stolte
Título: "Stereodynamics in NO(X) + Ar inelastic collisions"
Ref. revista: Journal of Chemical Physics
Clave: A Volumen: **144** Páginas: 224301 (1-17) Fecha: 2016 (8/06/16) DOI: 10.1063/1.4952649

254.-

Autores (p.o. de firma): Mahima Sneha, Hong Gao, Richard N. Zare, P. G. Jambrina, M. Menéndez, and F. J. Aoiz
Título: "Multiple scattering mechanisms causing interference effects in the differential cross sections of H + D₂ \rightarrow HD($v = 4, j$) + D at 3.26 eV collision energy"
Ref. revista: Journal of Chemical Physics
Clave: A Volumen **145** Páginas: 024308 (1-9) Fecha: 2016 (13/7/16) DOI: 10.1063/1.495294

255.-

Autores (p.o. de firma): V. Sáez-Rábanos, J. E. Verdasco, F. J. Aoiz and V. J. Herrero

Título: "Influence of vibration in the reactive scattering of D + MuH: the effect of dynamical bonding."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **18** Páginas: 13530-13537 Fecha: 2016 DOI: 10.1039/c6cp01305h

256.-

Autores (p.o. de firma): Yury V. Suleimanov, F. Javier Aoiz, and Hua Guo

Título: **Feature Article**: "Chemical Reaction Rate Coefficients from Ring Polymer Molecular Dynamics: Theory and Practical Applications."

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

First published online:

Clave: A Volumen: **120** Páginas: 8488-8502 Fecha: 2016 (14/09) DOI: 10.1021/acs.jpca.6b07140

***257.-**

Autores (p.o. de firma): P.G. Jambrina, A. Zanchet, J. Aldegunde, M. Brouard, F.J. Aoiz

Título: "Product lambda-doublet ratios as an imprint of chemical reaction mechanism"

Ref. revista: **Nature Communications**

Published online

Clave: A Volumen **7** Páginas: 13439 (1-8) Fecha: 2016 (11/11) DOI: 10.1038/ncomms13439

258.-

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, S. D. S. Gordon, A. Hackett Boyle, C. G. Heid, B. Nichols, V. Walpole, F. J. Aoiz, and S. Stolte

Título: "Integral steric asymmetry in the inelastic scattering of NO($X^2\Pi$)"

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Published online

Clave: A Volumen **146** Páginas: 014302 (1-17) Fecha: 2017 (3/1) DOI: 10.1063/1.4972565

259.-

Autores (p.o. de firma): P.G. Jambrina, M. Menéndez, and F.J. Aoiz

Título: "The dynamics of the Hg + Br₂ reaction. Elucidation of the reaction mechanism for Br exchange reaction"

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Published online

Clave: A Volumen **19** Páginas: 16433-16445 Fecha: 2017 DOI: 10.1039/C7CP01871A

260.-

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, S. D. S. Gordon, B. Nichols, E. Squires, F. J. Aoiz, and S. Stolte

Título: "Angular distributions for the inelastic scattering of NO($X^2\Pi$) with O₂($X^3\Sigma^-_g$)"

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Published online

Clave: A Volumen **146** Páginas: 204304 (1-12) Fecha: 2017 DOI: 10.1063/1.4983706

261.-

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, Lawlor, G. McCrudden, T. Perkins, S. A. Seamons, P. Stevenson, H. Chadwick, and F. J. Aoiz.

Título: "An experimental study of OH($A^2\Sigma^+$) + H₂: Electronic quenching, rotational energy transfer, and collisional depolarization."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Published online

Clave: A Volumen **146** Páginas: 244313 (1-10) Fecha: 2017 DOI: 10.1063/1.4989567

262.-

Autores (p.o. de firma): F. Javier Aoiz, and Richard N. Zare.

Título: "Quantum interference in chemical reactions"

Ref. revista: Physics Today

Clave: A Volumen **71** Páginas: 70-71 Fecha: FEB 2018 DOI: doi.org/10.1063/PT.3.3855

263.-

Autores (p.o. de firma): P.G. Jambrina, M. Menéndez, E. García, and F.J. Aoiz
Título: "Lambda-Doublet Propensities for Reactions on Competing A' and A'' Potential Energy Surfaces: O(³P) + N₂ and O(³P) + HCl."

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

Published online

Clave: A Volumen **122** Páginas: 2739-2750 Fecha: MAR 15 2018 DOI: 10.1021/acs.jpca.7b11826

***264.-**

Autores (p.o. de firma): P.G. Jambrina, M. Menéndez, and F.J. Aoiz

Título: "Angular momentum–scattering angle quantum correlation: a generalized deflection function."

Ref. revista: Chemical Science

Published online

Clave: A Volumen **9** Páginas: 4837-4850 Fecha: 2018 DOI: 10.1039/c7sc05489k

***265.-**

Autores (p.o. de firma): Thomas R. Sharples, Joseph G. Leng, Thomas F. M. Luxfor, Kenneth. G. McKendrick, Pablo G. Jambrina, F. Javier Aoiz, David W. Chandler and Matthew L. Costen.

Título: "Non-intuitive rotational reorientation in collisions of NO(A ²Σ⁺) with Ne from direct measurement of a four-vector correlation."

Ref. revista: **Nature Chemistry**

Published print/online

Clave: A Volumen **10** Páginas: 1148–1153 Fecha: 27/8/2018 DOI: 10.1038/s41557-018-0121-9

266.-

Autores (p.o. de firma): J. Klos, G. McCrudden, M. Brouard, T. Perkins, S. A. Seamons, D. Herráez-Aguilar and F. J. Aoiz.

Título: "Experimental and theoretical studies of the Xe–OH(A/X) quenching system."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Published print/online

Clave: A Volumen **149** Páginas: 184301-1 -- 184301-13 Fecha: 2018 DOI: 10.1063/1.5051068

267.-

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, S. D. S. Gordon, B. Nichols, V. Walpole, F. J. Aoiz and S. Stolte

Título: "Differential steric effects in the inelastic scattering of NO(X) + Ar: spin–orbit changing transitions"

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Published online

Clave: A Volumen Páginas: Fecha: 2019 DOI: 10.1039/c8cp06225k

268.-

Autores (p.o. de firma): P. G. Jambrina, M. Menéndez, A. Zanchet, E. García and F. J. Aoiz

Título: "How reactant polarization can be used to change the effect of interference on reactive collisions"

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Published online

Clave: A Volumen Páginas: Fecha: 2019 DOI: 10.1039/C8CP06892E

Estancias en Centros extranjeros

(estancias continuadas superiores a un mes)

CLAVE: D = doctorado, P = postdoctoral, I = invitado, C = contratado, O = otras (especificar).

Centro: Department of Chemistry. University of Columbia
Localidad: Nueva Cork País E.E.U.U Fecha: 1/1/1981-31/12/1982 Duración: 2 años
Tema: Haces moleculares y Química del láser
Clave: P

Centro: Department of Chemistry. University of California at Los Angeles (UCLA)
Localidad: Los Angeles País E.E.U.U Fecha: 1/5/1991-1/10/1991 Duración (semanas): 24
Tema: Dinámica de reacciones químicas con haces moleculares y detección por ionización multifotónica
Clave: I

Centro: Physical and Theoretical Chemistry Laboratory. Oxford University
Localidad: Oxford País: Reino Unido Fecha: 1/5/1995-1/10/1995 Duración (semanas): 24
Tema: Reacciones químicas fotoiniciadas con láseres
Clave: I

Centro: Department of Chemistry. Physical and Theoretical Chemistry Laboratory. Oxford University
Localidad: Oxford País: Reino Unido Fecha: 15/9/2005- 31/7/2006 Duración: 10,5 meses
Tema: Experimental and theoretical studies of reaction dynamics in gas phase.
Clave: I (En estancia de año sabático)

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Contribuciones a Congresos

1.

Autores: A. González Ureña, F. J. Aoiz, F. L. Tabarés
Título: Modelo dinámico de moléculas esféricas para reacciones químicas bimoleculares
Tipo de participación: Comunicación oral
Congreso: 75 Aniversario de R.S.E.F.Q., Simposio 27
Publicación:
Lugar celebración: Madrid Fecha: Octubre de 1978

2.

Autores: A. González Ureña, F. J. Aoiz, F. L. Tabarés, V. Sáez Rábanos, V. J. Herrero
Título: Construcción y puesta a punto de una máquina de haces moleculares
Tipo de participación: Comunicación oral
Congreso: 75 Aniversario de R.S.E.F.Q., Simposio 27
Publicación:
Lugar celebración: Madrid Fecha: Octubre de 1978

3.

Autores: A. González Ureña, V. J. Herrero, F. J. Aoiz, V. Sáez Rábanos, F. L. Tabarés
Título: Angular momentum conservation in reactive collisions cross sections for the alkali atom-alkyl iodide reactions
Tipo de participación: Poster
Congreso: Faraday Discussions Chem. Soc.
Publicación:
Lugar celebración: Birmingham, Reino Unido Fecha: Abril 1979

4.

Autores: A. González Ureña, V. J. Herrero, F. J. Aoiz, V. Sáez Rábanos
Título: Dispersión reactiva de yoduro potásico en las reacciones $K+C_2H_5I(CH_3I) \rightarrow KI+C_2H_5(CH_3)$ a 0.39 eV
Tipo de participación: Poster
Congreso: 3º Encuentro Nacional de Química
Publicación:
Lugar celebración: Coimbra, Portugal Fecha: Abril 1980

5.

Autores: F. J. Aoiz, V. J. Herrero, A. González Ureña
Título: Molecular beam studies of $K+C_2H_5X(X=I,Br) \rightarrow KX+C_2H_5$ systems
Tipo de participación: Comunicación oral
Congreso: 3º European Study Conference on Low Energy Molecular Collisions. Molec III
Publicación:
Lugar celebración: Oxford, Inglaterra Fecha: Septiembre 1980

6.

Autores: V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, F. J. Aoiz, F. L. Tabares, A. González Ureña
Título: Differential reaction cross section of the $K+C_2H_5X(X=I,Br) \rightarrow KX+C_2H_5$ systems
Tipo de participación: Poster
Congreso: VIII International Symposium on Molecular Beams
Publicación:
Lugar celebración: Cannes, Francia Fecha: Abril 1981

7.

Autores: V. Sáez Rábanos, F. J. Aoiz, V. J. Herrero, E. Verdasco, A. González Ureña
Título: Molecular beam study of the radical group effect in the $K+RI \rightarrow KI+R$ reactive collisions
Tipo de participación: Comunicación oral
Congreso: 9th International Symposium on Gas Kinetics
Publicación:
Lugar celebración: Burdeos, Francia Fecha: 20-25 Julio 1986

8.

Autores: E. Verdasco, V. Sáez Rábanos, F. J. Aoiz, A. González Ureña
Título: Reaction dynamics of translational and electronic excitation in $Ca(^3P)+SF_6$ collisions
Tipo de participación: Comunicación oral
Congreso: XI International Symposium on Molecular Beams
Publicación:
Lugar celebración: Edimburgo, Reino Fecha: Julio 1987

9.

Autores: F. J. Aoiz, V. J. Herrero
Título: Trajectory calculations for the $D+H_2(v=1) \rightarrow DH+D$ reaction: effect of translation and rotation on reactivity in the post-threshold region
Tipo de participación: Poster
Congreso: III European Conference on Atomic and Molecular Physics
Publicación:
Lugar celebración: Burdeos, Francia Fecha: Abril 1989

10.

Autores: F. J. Aoiz
Título: Excitation functions of $Sr+CH_3X$ reactions
Tipo de participación: Conferencia invitada
Congreso: Nato Advanced Research Workshop on Dynamical Stereochemistry
Publicación:
Lugar celebración: Santa Cruz, E.E.U.U Fecha: Noviembre 1990

11.

Autores: F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos
Título: QCT study of the $D+H_2 \rightarrow HD+H$ reaction. Influence of rotational, vibrational and translational energy on the reactivity
Tipo de participación: Poster
Congreso: XIII International Symposium on Molecular Beams
Publicación:
Lugar celebración: El Escorial, España Fecha: 2-7 de Junio de 1991

12.

Autores: F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos
Título: Quasiclassical state resolved cross sections for the reaction $D+H_2(v=0,j=0) \rightarrow HD(v',j')+H$ reaction. Evidence for classical collision complexes
Tipo de participación: Poster
Congreso: XIV International Symposium on Molecular Beams
Publicación:
Lugar celebración: Asilomar, Pacific Grove. E.E.U.U Fecha: 7-12 Junio 1992

13.

Autores: F. J. Aoiz, V. J. Herrero, M. Nogueira, V. Sáez Rábanos

Título: The $F+H_2 \rightarrow HF+H$ reaction and its isotopic variants. New quasiclassical trajectory calculations on different potential energy surfaces

Tipo de participación: Poster

Congreso: XV International Symposium on Molecular Beams

Publicación:

Lugar celebración: Berlin. Alemania

Fecha: 16-21 Mayo 1993

14.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, K. Stark, H.-J. Werner

Título: Classical dynamics of the $F+H_2 \rightarrow HF+H$ reaction and its isotopic variants on recent semi-empirical and ab initio potential energy surfaces. A direct comparison with experimental results

Tipo de participación: Poster

Congreso: Gordon Conference on Atomic and Molecular Interactions

Publicación:

Lugar celebración: New London, New Hampshire, E.E.U.U. Fecha: 3-8 Julio 1994

15.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, K. Stark, H.-J. Werner

Título: The $F+H_2 \rightarrow HF+H$ reaction dynamics from quasi-classical trajectory calculations on a ab initio potential energy surface. A comparison with experimental results

Tipo de participación: Poster

Congreso: 10th European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC)

Publicación:

Lugar celebración: Salamanca, España

Fecha: Agosto 1994

16.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, M. J. D'Mello, V.J. Herrero, O. Puentedura, V. Sáez Rábanos. R.E. Wyatt

Título: Quasi-classical trajectory and quantum mechanical study of the $H+D_2 \rightarrow HD+D$ reaction. Comparison with laser-molecular beam experiments

Tipo de participación: Poster

Congreso: 10th European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC)

Publicación:

Lugar celebración: Salamanca, España

Fecha: Agosto 1994

17.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos

Título: Quasi-classical trajectory study of the two ends reaction $F+HD \rightarrow HF(DF)+D(H)$ on an ab initio potential energy surface. Comparison with molecular beam experiments

Tipo de participación: Poster

Congreso: Stereodynamics and Active Control in Chemical Reactions

Publicación:

Lugar celebración: Orsay-Gif sur Yvette, Francia

Fecha: 12-15 Diciembre 1994

18.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Alagia, N. Balucani, P. Casavecchia, E. H. van Kleef, G.G. Volpi

Título: Dynamics of the $Cl+H_2(D_2)$ reactions. A comparison between molecular beam experiments and quasi-classical trajectory calculations on a new ab initio potential energy surface

Tipo de participación: Poster

Congreso: Stereodynamics and Active Control in Chemical Reactions

Publicación:

Lugar celebración: Orsay-Gif sur Yvette, Francia

Fecha: 12-15 Diciembre 1994

*19.

Autores: F. J. Aoiz

Título: D+H₂ QCT rate constants. A comparison with quantum mechanical results

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: CCP6 Conference on Reaction Dynamics

Publicación:

Lugar celebración: Nottingham, Reino Unido

Fecha: August 1995

20.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares

Título: Effect of the vibrational excitation on the Cl+HD→HCl(DCl)+D(H) reaction

Tipo de participación: Poster

Congreso: 8th European Workshop on Molecular Spectroscopy and Photon induced Dynamics

Publicación:

Lugar celebración: Oxford, Gran Bretaña

Fecha: 3-7 Septiembre 1995

21.

Autores: T. Díez-Rojo, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Menéndez, P. Quintana y E. Verdasco, V. J. Herrero e I. Tanarro, y V. Sáez Rábanos.

Título: Espectroscopia de ionización multifotónica resonante (REMPI). Puesta a punto y primeros resultados.

Tipo de participación: Comunicación oral.

Congreso: XV Reunión Nacional de Espectroscopia.

Publicación:

Lugar celebración: Oviedo, España.

Fecha: 15-20 Septiembre 1996

22.

Autores: A. Alexander, F. J. Aoiz, M Brouard, I. Burak, Y. Fujimura, J.P. Short, J. P. Simons

Título: The Ins and Outs of Collision Complexes

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: Stereo Dynamics of Chemical Reactions.

Publicación:

Lugar celebración: Bielefeld, Alemania

Fecha: 1-5 Diciembre 1996

23.

Autores: F. J. Aoiz

Título: Stereodynamics of simple chemical reactions: Quasi-classical trajectory determination and analysis of the angular momentum polarization

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: Stereo Dynamics of Chemical Reactions.

Publicación:

Lugar celebración: Bielefeld, Alemania

Fecha: 1-5 Diciembre 1996

24.

Autores: F. J. Aoiz, M. Menéndez and E. Verdasco, V. Sáez Rábanos, B. Berning and H.-J. Werner, and H.J. Loesch.

Título: Influence of the rotational and translational energy on the reaction cross-section for Li+HF reaction on a new ab initio potential energy surface. A comparison with experimental results.

Tipo de participación: Poster

Congreso: Stereo Dynamics of Chemical Reactions.

Publicación:

Lugar celebración: Bielefeld, Alemania

Fecha: 1-5 Diciembre 1996

25.

Autores: A. Alexander, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Brouard, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, J. P. Simons

Título: Two and three vector correlations in the dynamics of some elementary reactions

Tipo de participación: Poster

Congreso: Stereo Dynamics of Chemical Reactions.

Publicación:

Lugar celebración: Bielefeld, Alemania

Fecha: 1-5 Diciembre 1996

26.

Autores: M. Alagia, N. Balucani, L. Cartechini, P. Casavecchia, E. H. van Kleef, G. G. Volpi, F. J. Aoiz, L. Bañares, D. W. Schwenke, T. C. Allison, S. L. Mielke, D. G. Truhlar

Título: Dynamics of the simplest chlorine atom reaction: an experimental and theoretical study

Tipo de participación: Poster

Congreso: Stereo Dynamics of Chemical Reactions.

Publicación:

Lugar celebración: Bielefeld, Alemania

Fecha: 1-5 Diciembre 1996

27.

Autores: F. J. Aoiz

Título: Comparison of QCT-QM theory for some elementary reactions with an emphasis on the calculation of $k(T)$

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: Gas Kinetics Discussion Group of the Royal Society of Chemistry: Theory and Experiment in Chemical Kinetics

Publicación:

Lugar celebración: Londres, Gran Bretaña

Fecha: 3 Enero 1997

28.

Autores: F. J. Aoiz

Título: Quantal and classical stereodynamics of elementary chemical reactions

Tipo de participación: Conferencia invitada (Key Lecture)

Congreso: 9th European Workshop on Molecular Spectroscopy and Photon induced dynamics (PHID9)

Publicación:

Lugar celebración: Toulouse, Francia

Fecha: 7-11 Noviembre 1997

29.

Autores: A. J. Alexander, F. J. Aoiz, L. Bañares, D. A. Blunt, M. Brouard, Y. Fujimura, J. P. Simons

Título: $O(^1D)+H_2 \rightarrow OH(v',N')+H$: The anatomy of a reaction

Tipo de participación: Poster

Congreso: 9th European Workshop on Molecular Spectroscopy and Photon induced dynamics (PHID9)

Publicación:

Lugar celebración: Toulouse, Francia

Fecha: 7-11 Noviembre 1997

30.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares

Título: Classical and quantal dynamics of elementary reactions

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: III Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics

Publicación:

Lugar celebración: Mira, Portugal

Fecha: 4-7 Mayo 1998

31.

Autores: F. J. Aoiz, M. Menéndez, E. Verdasco and V. Sáez Rábanos.

Título: The Dynamics of the Li+HF reaction. Quasiclassical trajectory studies on several potential energy surfaces and comparison with experimental results.

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: III Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics

Publicación:

Lugar celebración: Mira, Portugal

Fecha: 4-7 Mayo 1998

32.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares

Título: Classical and quantal dynamics of elementary reactions

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: Workshop on Computational Chemistry

Publicación:

Lugar celebración: Miraflores, Madrid, España

Fecha: 18-20 Junio 1998

33.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, E. Verdasco

Título: A quasi-classical trajectory study of the O+H₂/D₂ reactions: cross sections and rate constants

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: 15th International Symposium on Gas Kinetics

Publicación:

Lugar celebración: Bilbao, España

Fecha: 6-12 Septiembre 1998

34.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero

Título: The assessment of the H₃ ab initio potential energy surfaces. State resolved differential cross sections versus thermal rate constants

Tipo de participación: Poster

Congreso: 15th International Symposium on Gas Kinetics

Publicación:

Lugar celebración: Bilbao, España

Fecha: 6-12 Septiembre 1998

35.

Autores: B. Niederjohann, K. Seekamp-Rahn, E. Wrede, L. Schnieder, L. Bañares, F. J. Aoiz, M. J. D'Mello, V.J. Herrero

Título: Assessment of the H₃ potential energy surfaces: experimental and quantum mechanical results for the H+D₂→HD+D reaction at low collision energies

Tipo de participación: Poster

Congreso: 12th European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC XII)

Publicación:

Lugar celebración: Bristol, Inglaterra

Fecha: 6-11 Septiembre 1998

36.

Autores: E. Wrede, L. Schnieder, K. H. Welge, F. J. Aoiz, L. Bañares, B. Martínez-Haya, J. F. Castillo, V.J. Herrero

Título: The Hydrogen exchange reaction at high energies: experimental and theoretical cross sections and the influence of the geometric phase effect

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: 12th European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC XII)

Publicación:

Lugar celebración: Bristol, Inglaterra

Fecha: 6-11 Septiembre 1998

37.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, T. Díez-Rojo, V.J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro, J. E. Verdasco

Título: Espectroscopía de ionización multifotónica resonante (REMPI) de radicales y moléculas

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: XVI Reunión Nacional de Espectroscopía

Publicación:

Lugar celebración: Sevilla, España

Fecha: 20-25 Septiembre 1998

38.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, T. Díez-Rojo, V.J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, L. Ramonat, I. Tanarro, J. E. Verdasco

Título: Relajación molecular en expansiones supersónicas de nitrógeno

Tipo de participación: Poster

Congreso: XVI Reunión Nacional de Espectroscopía

Publicación:

Lugar celebración: Sevilla, España

Fecha: 20-25 Septiembre 1998

39.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, T. Díez-Rojo, V.J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro, E. Verdasco

Título: Low temperature rotational relaxation of N₂ and N₂-He mixtures in free jets studied by resonance enhanced multiphoton ionization

Tipo de participación: Poster

Congreso: XVIII Symposium on Molecular Beams

Publicación:

Lugar celebración: Ameland, Holanda

Fecha: 30 Mayo-4 Junio 1999

40.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, E. Verdasco, I. Zapater

Título: Photodissociation of dimethyl sulfide at 220-230 nm studied by 2+1 resonance enhanced multiphoton ionization of the CH₃ radical in a molecular beam

Tipo de participación: Poster

Congreso: XVIII Symposium on Molecular Beams

Publicación:

Lugar celebración: Ameland, Holanda

Fecha: 30 Mayo-4 Junio 1999

41.

Autores: M. Alagia, N. Balucani, L. Cartechini, P. Casavecchia, E. H. van Kleef, G. G. Volpi, F. J. Aoiz, L. Bañares, D. W. Schwenke, T. C. Allison, S. L. Mielke, D. G. Truhlar

Título: The reaction Cl+H₂: A crossed molecular beam, quasiclassical trajectory and quantum mechanical scattering study

Tipo de participación: Poster

Congreso: XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)

Publicación:

Lugar celebración: Asis, Italia

Fecha: 20-25 Junio 1999

42.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo

Título: Spin-orbit effects in quantum mechanical rate constant calculations for the F+H₂→HF+H reaction

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)

Publicación:

Lugar celebración: Asis, Italia

Fecha: 20-25 Junio 1999

43.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, V. J. Herrero

Título: The dynamics of the O(¹D)+HD reaction studied by the quasi-classical trajectory surface hopping method on new ab initio potential energy surfaces. Simulation of Doppler-selected time-of-flight measurements

Tipo de participación: Poster

Congreso: XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)

Publicación:

Lugar celebración: Asis, Italia

Fecha: 20-25 Junio 1999

44.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, B. Martínez-Haya, V. J. Herrero, B. Niederjohann, E. Wrede, K. Seekamp-Rahn, L. Schnieder, K. H. Welge

Título: The assessment of the H₃ ab initio potential energy surfaces. State-resolved differential cross sections versus thermal rate constants

Tipo de participación: Poster

Congreso: XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)

Publicación:

Lugar celebración: Asis, Italia

Fecha: 20-25 Junio 1999

45.

Autores: B. Niederjohann, E. Wrede, K. Seekamp-Rahn, L. Schnieder, K. H. Welge, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, B. Martínez-Haya, V. J. Herrero

Título: The hydrogen exchange reaction: experimental and theoretical cross sections and the influence of the geometrical phase effect

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)

Publicación:

Lugar celebración: Asis, Italia

Fecha: 20-25 Junio 1999

46.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, T. Díez-Rojo, V.J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro, E. Verdasco

Título: Low temperature rotational relaxation of N₂ and N₂-He, Ne, Ar mixtures in free jets studied by resonance enhanced multiphoton ionization

Tipo de participación: Poster

Congreso: XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)

Publicación:

Lugar celebración: Asis, Italia

Fecha: 20-25 Junio 1999

47.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Menéndez

Título: Quasi-classical trajectory study of the Cl+H₂,D₂,HD reactions: cross sections and rate constants

Tipo de participación: Poster

Congreso: XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)

Publicación:

Lugar celebración: Asis, Italia

Fecha: 20-25 Junio 1999

48.

Autores: J. M. Alvaríño, F. J. Aoiz, M. L. Hernández, A. Laganà, T. Martínez, M. Menéndez, E. Verdasco

Título: Quasiclassical dynamics and stereodynamics of the O(¹D)+HCl reaction

Tipo de participación: Poster

Congreso: XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)

Publicación:

Lugar celebración: Asis, Italia

Fecha: 20-25 Junio 1999

49.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo

Título: Study of spin-orbit effects in the F+H₂ reaction from quantum mechanical rate constant calculations

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: 5th Workshop on Quantum Reactive Scattering

Publicación:

Lugar celebración: Perugia, Italia

Fecha: 25-27 Junio 1999

50.

Autores: B. Martínez-Haya, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, J. M. Launay

Título: QM and QCT studies of state-to-state differential cross sections for the F+D₂ reaction

Tipo de participación: Poster

Congreso: 5th Workshop on Quantum Reactive Scattering

Publicación:

Lugar celebración: Perugia, Italia

Fecha: 25-27 Junio 1999

51.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, B. Martínez-Haya, M. P. de Miranda, V. Sáez Rábanos

Título: Quantal and classical treatments of the stereodynamics of elementary chemical reactions: State resolved k-k'-j' vector correlations

Tipo de participación: Poster

Congreso: Faraday Discussions 113. Stereochemistry and control in molecular reaction dynamics

Publicación:

Lugar celebración: Leeds, Reino Unido

Fecha: 5-7 Julio 1999

52.

Autores: F. J. Aoiz

Título: Classical and quantal stereodynamics of elementary reactions

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: J. P. Simons. A celebratory meeting of dynamics and spectroscopy

Publicación:

Lugar celebración: Oxford, Reino Unido

Fecha: 13-14 Septiembre 1999

53.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, E. Verdasco, I. Zapater

Título: Photodissociation of dimethyl sulfide at 220-230 nm studied by 2+1 resonance enhanced multiphoton ionization of the CH₃ radical in a molecular beam

Tipo de participación: Poster

Congreso: J. P. Simons. A celebratory meeting of dynamics and spectroscopy

Publicación:

Lugar celebración: Oxford, Reino Unido

Fecha: 13-14 Septiembre 1999

54.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, C. Vallance, W. Denzer, M. Brouard, P. Honvault, J.-M. Launay

Título: Quantum mechanical, quasiclassical trajectory and experimental studies of the O(¹D)+H₂O(OH(v=4,j))+H reaction

Tipo de participación: Poster

Congreso: DYNAM 2000. La dynamique chimique à l'aube du nouveau millénaire

Publicación:

Lugar celebración: Arcachon, Francia

Fecha: 31 Mayo-3 Junio 2000

55.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Brouard, J. F. Castillo, V. J. Herrero, P. Honvault, J.-M. Launay

Título: A quasiclassical trajectory surface hopping and quantum mechanical study of the dynamics of the O(¹D)+H₂, HD reactions on new ab initio potential energy surfaces. A comparison with experimental results

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: 16th International Symposium on Gas Kinetics

Publicación:

Lugar celebración: Cambridge, Reino Unido

Fecha: 23-27 Julio 2000

56.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, M. Menéndez, V. Sáez Rábanos, I. Tanarro, E. Verd

Título: Quasiclassical trajectory study of the Cl+H₂ and H+HCl reactions and their isotopic variants on a new ab initio potential energy surface

Tipo de participación: Poster

Congreso: 16th International Symposium on Gas Kinetics

Publicación:

Lugar celebración: Cambridge, Reino Unido

Fecha: 23-27 Julio 2000

57.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro, E. Verdasco

Título: Low temperature rotational relaxation of N₂ and of mixtures of N₂ with He and Ne in free jets studied by resonance enhanced multiphoton ionization

Tipo de participación: Poster

Congreso: 16th International Symposium on Gas Kinetics

Publicación:

Lugar celebración: Cambridge, Reino Unido

Fecha: 23-27 Julio 2000

58.

Autores: B. Martínez-Haya, P. Quintana, F. J. Aoiz, L. Bañares, E. Verdasco, M. Menéndez, R. F. Delmdahl, D. H. Parker, P. Samartzis, D. J. Smith, T. N. Kitsopoulos

Título: Fotodisociación del CH₃SCH₃ en la primera banda de absorción

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: XVII Reunión Nacional de Espectroscopía

Publicación:

Lugar celebración: León, España

Fecha: 24-29 Septiembre 2000

59.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro, J. E. Verdasco

Título: Estudio por fotoionización resonante (REMPI) de la relajación rotacional del N₂ por colisiones con gases nobles a baja temperatura

Tipo de participación: Poster

Congreso: XVII Reunión Nacional de Espectroscopía

Publicación:

Lugar celebración: León, España

Fecha: 24-29 Septiembre 2000

* 60.

Autores: **F. J. Aoiz**

Título: Photodissociation of DMS in the A-band

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: IMAGINE 4th TMR Network Meeting

Publicación:

Lugar celebración: Fodele (Creta), Grecia

Fecha: 21-25 Octubre 2000

61.

Autores: M. Alagia, N. Balucani, L. Cartechini, P. Casavecchia, E. H. van Kleef, G. G. Volpi, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Menéndez, W. Bian and H.-J. Werner

Título: Dynamics of the $\text{Cl}+\text{H}_2/\text{D}_2$ reaction: A comparison of crossed molecular beam experiments with quasiclassical trajectory and quantum mechanical calculations on a new ab initio potential energy surface

Tipo de participación: Poster

Congreso: MOLEC 2000. European Conference on Dynamics of Molecular Collisions

Publicación:

Lugar celebración: Jerusalem, Israel

Fecha: 17-22 Septiembre 2000

62.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, B. Martínez-Haya, M. Brouard, W. Denzer, C. Vallance, P. Honvault, J. M. Launay, V. J. Herrero

Título: A quasi-classical trajectory and quantum mechanical study of the stereodynamics of the $\text{O}(^1\text{D})+\text{H}_2,\text{HD}$ reactions on new ab initio potential energy surfaces. Theoretical predictions and comparison with experimental results

Tipo de participación: Poster

Congreso: Stereodynamics of chemical reactions

Publicación:

Lugar celebración: El Escorial, España

Fecha: 1-5 Diciembre 2000

63.

Autores: M. Alagia, N. Balucani, L. Cartechini, P. Casavecchia, E. H. van Kleef, G. G. Volpi, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Menéndez, W. Bian and H.-J. Werner

Título: Dynamics of the $\text{Cl}+\text{H}_2/\text{D}_2$ reaction: A comparison of crossed molecular beam experiments with quasiclassical trajectory and quantum mechanical calculations on a new ab initio potential energy surface

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: Stereodynamics of chemical reactions

Publicación:

Lugar celebración: El Escorial, España

Fecha: 1-5 Diciembre 2000

64.

Autores: F. J. Aoiz, M.T. Martínez and V. Sáez Rábanos.

Título: Quasi-classical treatment of the Stereodynamics of chemical reactions :k-r-k' vector correlations for the $\text{Li}+\text{HF}(v=1, j=1)\rightarrow\text{LiF}+\text{H}$ reaction. Tipo de participación: Poster

Congreso: Stereodynamics of chemical reactions

Publicación:

Lugar celebración: El Escorial, España

Fecha: 1-5 Diciembre 2000

* 65.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo

Título: Classical and quantum dynamical study of the dynamics of elementary reactions.

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: 2001 Pasadena Workshop on Quantum Reaction Dynamics

Publicación:

Lugar celebración: Pasadena, EE.UU

Fecha: 10-13 Enero 2001

66.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, M. Menéndez, N. Balucani, L. Cartechini, P. Casavecchia, G. G. Volpi, D. Skouteris, W. Bian and H.-J. Werner

Título: The $\text{Cl}+\text{H}_2/\text{D}_2$ reaction dynamics: a combined theoretical and experimental study

Tipo de participación: Poster

Congreso: 2001 Pasadena Workshop on Quantum Reaction Dynamics

Publicación:

Lugar celebración: Pasadena, EE.UU

Fecha: 10-13 Enero 2001

67.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, D. Sokolovski
Título: The H+D₂ quantum reaction dynamics in the collision energy range 0.5-2.2 eV. A search for dynamical resonances
Tipo de participación: Poster
Congreso: 2001 Pasadena Workshop on Quantum Reaction Dynamics
Publicación:
Lugar celebración: Pasadena, EE.UU Fecha: 10-13 Enero 2001

68.

Autores: J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Santamaría
Título: Quasi-classical trajectory study of the H+H₂O and H+D₂O reactions
Tipo de participación: Poster
Congreso: 2001 Pasadena Workshop on Quantum Reaction Dynamics
Publicación:
Lugar celebración: Pasadena, EE.UU Fecha: 10-13 Enero 2001

* 69.

Autores: **F. J. Aoiz**
Título: A reaction with several paths: Dynamics and stereodynamics of the O(¹D)+H₂ reaction.
Tipo de participación: Conferencia invitada
Congreso: Gordon Research Conference on Molecular Energy Transfer
Publicación:
Lugar celebración: Ventura, E.E.U.U. Fecha: 14-19 Enero 2001

70.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, B. Martínez-Haya, P. Quintana, E. Verdasco
Título: The photodissociation of CH₃SCH₃ and CD₃SCD₃ in the first absorption band studied by velocity map ion imaging and REMPI
Tipo de participación: Poster
Congreso: Gordon Research Conference on Molecular Energy Transfer
Publicación:
Lugar celebración: Ventura, E.E.U.U. Fecha: 14-19 Enero 2001

71.

Autores: J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Santamaría
Título: The dynamics and stereodynamics of the H+H₂O and H+D₂O reactions studied by quasi-classical trajectory calculations
Tipo de participación: Poster
Congreso: Gordon Research Conference on Molecular Energy Transfer
Publicación:
Lugar celebración: Ventura, E.E.U.U. Fecha: 14-19 Enero 2001

72.

Autores: J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Santamaría
Título: A quasi-classical trajectory study of the H+N₂O reaction
Tipo de participación: Poster
Congreso: Gordon Research Conference on Molecular Energy Transfer
Publicación:
Lugar celebración: Ventura, E.E.U.U. Fecha: 14-19 Enero 2001

73.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, D. Sokolovski, F. Fernández-Alonso, B. D. Bean, R. N. Zare
Título: Observation of scattering resonances in the H+D₂ reaction: a new spectroscopy of the transition state region
Tipo de participación: Poster
Congreso: Vth Femtochemistry Conference
Publicación:
Lugar celebración: Toledo, España Fecha: 2-6 Septiembre 2001

- 74.- Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, J.-M. Launay
Reaction dynamics of insertion reactions: quasiclassical trajectory and quantum mechanical study of the $O(^1D)+H_2$, $N(^2D)+H_2$ and $C(^1D)+H_2$ reactions
5th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics
Tipo de participación: *presentación oral*
Lisboa, Portugal 23-26 Marzo 2002
-
- 75.- Autores: J. Barr, I. Torres, P. Quintana, F. J. Aoiz, L. Bañares, E. Verdasco, B. Martínez-Haya
Título: Recoil energy, rovibrational population, and alignment of CD_3 fragments following the near ultraviolet photodissociation of dimethyl sulfide- d_6
5th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics
Tipo de participación: *poster*
Lisboa, Portugal 23-26 Marzo 2002
-
- 76.- Autores: J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares
Título: A quasiclassical trajectory study of the $H+H_2O$ and $H+D_2O$ reactions
5th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics
Tipo de participación: *poster*
Lisboa, Portugal 23-26 Marzo 2002
-
- *77. Autores: **F. J. Aoiz**
Título: Dynamics of elementary reactions.
Tipo de participación: Conferencia invitada
Congreso: Gordon Research Conference on Atomic and Molecular Interactions
Lugar: Bristol, Rhode Island. EE.UU 7-12 Julio 2002
-
- 78.- Autores: P. Honvault, J.-M. Launay, F. J. Aoiz, L. Bañares
Título: Quantum-mechanical and quasi-classical trajectory studies of the insertion reaction $S(^1D)+H_2 \rightarrow SH+H$
Congreso: MOLEC 2002. European Conference on Dynamics of Molecular Collisions
Tipo de participación: *poster*
Lugar: Estambul, Turquía. 1-5 Septiembre 2002
-
- 79.- Autores: G. Capozza, N. Balucani, E. Segoloni, R. Bobbenkamp, A. Russo, P. Casavecchia, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, J.-M. Launay
Título: Crossed beam experiments versus quantum and quasiclassical trajectory scattering calculations on an *ab initio* potential energy surface for the prototype insertion reaction $C(^1D)+H_2(D_2)$
Congreso: MOLEC 2002. European Conference on Dynamics of Molecular Collisions
Tipo de participación: *poster*
Lugar: Estambul, Turquía. 1-5 Septiembre 2002
-
- 80.- Autores: G. Capozza, N. Balucani, E. Segoloni, P. Casavecchia, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, J.-M. Launay
Título: Quantum effects in the differential cross sections for the insertion reaction $N(^2D)+H_2$
Congreso: MOLEC 2002. European Conference on Dynamics of Molecular Collisions
Tipo de participación: *poster*
Lugar: Estambul, Turquía. 1-5 Septiembre 2002
-
- * 81.- Autores: **F. J. Aoiz**, L. Bañares, E. Verdasco, V. Sáez Rábanos, M. P. Miranda
Título: Stereodynamics of elementary reactions and inelastic processes: $H+D_2$ and $Ar+NO$
Congreso: STEREOYNAMICS 2002.
Tipo de participación: *Conferencia invitada*
Lugar: Schoorl, Holanda. 1-6 Diciembre 2002
-
- 82.- Autores: F. J. Aoiz, M. T. Martínez, V. Sáez Rábanos, J.M. Alvariño, M.L. Hernández
Título: Stereodynamics of the $O(^1D)+HCl \rightarrow ClO(OH)+H(Cl)$ reaction.
Congreso: STEREOYNAMICS 2002.
Tipo de participación: *Poster*

Lugar: Schoorl, Holanda. 1-6 Diciembre 2002

-
- 83.- G. Capozza, N. Balucani, E. Segoloni, R. Bobbenkamp, A. Russo, P. Casavecchia, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, B. Bussery-Honvault, J.-M. Launay
Crossed beam experiments versus quantum and quasiclassical trajectory scattering calculations on an ab initio potential energy surface for the prototype insertion reaction $C(^1D)+H_2(D_2)$
Stereodynamics of Chemical Reactions
Schoorl, Holanda. 1-6 Diciembre 2002
Clave: poster
-
- 84.- Autores: G. Capozza, N. Balucani, E. Segoloni, R. Bobbenkamp, A. Ruso, L. Cartechini, P. Casavecchia, L. Bañares, F. J. Aoiz, P. Honvault, B. Bussery-Honvault, J.-M. Launay
Título: The dynamics of prototype Insertion reactions: Crossed beam experiments versus quantum and quasiclassical calculations on ab initio potential energy surfaces for $C(^1D)+H_2$ and $N(^2D)+H_2$
Congreso: XX International Symposium on Molecular Beams
Tipo de participación: poster
Lugar: Lisboa, Portugal 8-13 junio 2003
-
- 85.- Autores: M. Alexander, F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, J. E. Verdasco
Título: Inelastic scattering of NO by Ar. A comparison between classical trajectories and close-coupling state-resolved differential cross sections.
Congreso: XVII International Conferenc on Molecular Energy Transfer (COMET)
Tipo de participación: poster
Lugar: El Escorial, Madrid, 15-20 junio 2003
-
- 86.- Autores: J.M. Alvaríño, F. J. Aoiz, M.L. Hernández, M. T. Martínez, M. Menéndez, V. Sáez Rábanos
Título: A detailed study of the dynamics of the $O(^1D)+HCl \rightarrow OH+Cl$, $ClO+H$ reactions.
Congreso: XVII International Conferenc on Molecular Energy Transfer (COMET)
Tipo de participación: poster
Lugar: El Escorial, Madrid, 15-20 junio 2003
-
- 87.- Autores: G. Amaral, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, G. Pino, I. Torres
Título: The photodissociation of CD_3SOCD_3 at 220 nm: Internal and translational energy distributions of the CD_3 fragment.
Congreso: XVII International Conferenc on Molecular Energy Transfer (COMET)
Tipo de participación: poster
Lugar: El Escorial, Madrid, 15-20 junio 2003
-
- 88.- Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, I. Torres, J. E. Verdasco
Título: Rotational alignment of the CD_3 fragment following the near UV photodissociation of CD_3SCD_3 ..
Congreso: XVII International Conferenc on Molecular Energy Transfer (COMET)
Tipo de participación: poster
Lugar: El Escorial, Madrid, 15-20 junio 2003
-
- 89.- Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Menéndez, K. A. Peterson, J. E. Verdasco
Título: A quasiclassical trajectory study of the dynamics of the $O(^1D)+HBr \rightarrow OH(OBr)+Br(H)$ reactions on an ab initio potential energy surface.
Congreso: XVII International Conferenc on Molecular Energy Transfer (COMET)
Tipo de participación: poster
Lugar: El Escorial, Madrid, 15-20 junio 2003
-
- 90.- Autores: L. Bañares, F. J. Aoiz
Título: A quasiclassical trajectory time resolved study of the dynamics of insertion reactions.
Congreso: XVII International Conferenc on Molecular Energy Transfer (COMET)
Tipo de participación: poster
Lugar: El Escorial, Madrid, 15-20 junio 2003
-
- 91.- Autores: J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. A. Collins
Título: Ab initio potential energy surface and quasiclassical trajectory study of the dynamics of the $H+N_2O$ reaction.
Congreso: XVII International Conferenc on Molecular Energy Transfer (COMET)
Tipo de participación: poster
Lugar: El Escorial, Madrid, 15-20 junio 2003
-
- 92.- Autores: E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, S. A. Vázquez, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. N. D. S. Cordeiro
Título: A direct classical trajectory study of the acetone photodissociation on the triplet surface.

- Congreso: *XVII International Conferenc on Molecular Energy Transfer (COMET)*
 Tipo de participación: *poster*
 Lugar: El Escorial, Madrid, 15-20 junio 2003
-
- 93.- Autores: S. A. Vázquez, Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo
 Título: A direct classical trajectory study of the HCl elimination from the 193 nm photodissociation of vinyl chloride.
 Congreso: *XVII International Conferenc on Molecular Energy Transfer (COMET)*
 Tipo de participación: *poster*
 Lugar: El Escorial, Madrid, 15-20 junio 2003
-
- 94.- F. J. Aoiz, L. Bañares
Time-resolved dynamics of insertion reactions. Quasiclassical trajectory study and comparison with quantum mechanical and experimental results
XXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. 6th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2003
 Madrid, España. 7-11 Julio 2003
 Clave: *poster*
-
- 95.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, I. Torres, E. Verdasco
Near UV photodissociation of CD₃SCD₃: CD₃ fragment (v,J) vector correlations
XXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. 6th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2003
 Madrid, España. 7-11 Julio 2003
 Clave: *poster*
-
- 96.- G. Amaral, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, G. Pino, I. Torres
Photodissociation of CD₃SOCD₃ at 220 nm: internal and translational energy distribution of the CD₃ fragment
XXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. 6th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2003
 Madrid, España. 7-11 Julio 2003
 Clave: *poster*
-
- 97.- E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, S. A. Vázquez, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Santamaría-Antonio
Quasi-classical trajectory study of H₂ elimination in the photodissociation of difluoroethylenes at 193 nm
XXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. 6th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2003
 Madrid, España. 7-11 Julio 2003
 Clave: *poster*
-
- 98.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. A. Collins
Ab initio potential energy surface and quasi-classical trajectory study of the dynamics of the H+N₂O reaction
XXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. 6th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2003
 Madrid, España. 7-11 Julio 2003
 Clave: *poster*
-
- *99- Autores: **F.J. Aoiz**, M. P. Miranda, L. Bañares
 Título: "Stereodynamics of simple reactions: how the direction of the initial rotation does control the reactivity"
 Congreso: American Chemical Society annual meeting
 Tipo de participación: *Conferencia invitada*
 Lugar: Anaheim, California (USA) 28 marzo- 3 abril 2004
-
- 100.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, S. Vázquez, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos
Quasiclassical trajectory studies of the F+CH₄ reaction using an ab initio potential energy surface constructed by interpolation
27th International Symposium on Free Radicals
 Taipei, Taiwan. 25-30 Julio 2004
 Clave: *poster*
-
- 101.- N. Balucani, G. Capozza, E. Segoloni, L. Cartechini, R. Bobbenkamp, P. Casavecchia, L. Bañares, F. J. Aoiz, P. Honvault, B. Bussery-Honvault, J.-M. Launay
The dynamics of prototype insertion reactions: Crossed beam experiments versus quantum and quasiclassical trajectory scattering calculations on ab initio potential energy surfaces for C(¹D)+H₂ and N(²D)+H₂
27th International Symposium on Free Radicals
 Taipei, Taiwan. 25-30 Julio 2004
 Clave: *poster*

-
- 102.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares
Quasiclassical trajectory studies of the Cl+CH₄ reaction using an ab initio potential energy surface constructed by interpolation
 27th International Symposium on Free Radicals
 Taipei, Taiwan. 25-30 Julio 2004
 Clave: *poster*
-
- *103.- Autores: **F. J. Aoiz**, L. Bañares, J. Barr, I. Torres, G. A. Pino, G. A. Amaral
 Título: "Photodissociation dynamics of polyatomic molecules containing sulfur: An experimental study."
 Congreso: 27th International Symposium on Free Radicals.
 Tipo de participación: *Conferencia invitada*
 Lugar: Taipei, Taiwan. 25-30 de Julio 2004
-
- 104.- Autores: J. Aldegunde, J.M. Alvaríño, M.P. Miranda, F. J. Aoiz
 Título: "Stereodynamics of the H+D₂ reaction: how the direction of the initial rotation does control the reactivity."
 Congreso: 18th International Symposium on Gas Kinetics
 Tipo de participación: *Poster*
 Lugar: Bristol, UK. 7-12 de Agosto 2004
-
- *105.- Autores: R. Bobbenkamp, H.J. Loesch, M. Menéndez, E. Verdasco, and F. J. Aoiz.
 Título: "The dynamics of the reactive process Li+HF→LiF+H: new experimental and theoretical results".
 Congreso: *STEREODYNAMICS 2002*.
 Tipo de participación: *Conferencia invitada*
 Lugar: Osaka, Japón. 2-6 de Diciembre 2004
-
- *106.- Autores: F. J. Aoiz, M. P. Miranda, V. Sáez Rábanos and J. Aldegunde
 Título: "Effect of the polarization of the initial rotational angular momentum on the reactivity: How reactants polarization can be used to control chemical reaction."
 Congreso: *CCP6 Workshop on Semiclassical and other methods for understanding Molecular Collisions and Chemical Reactions.*
 Tipo de participación: *Conferencia invitada*
 Lugar: Belfast, Gran Bretaña. 2-5 de Abril 2005
-
- *107.- Autores: M. P. Miranda, F. J. Aoiz, V. Sáez Rábanos, M. Brouard and J. Aldegunde
 Título: "Stereodynamical portraits and the chemical shapes of bimolecular collisions. Congreso: *CCP6 Workshop on Semiclassical and other methods for understanding Molecular Collisions and Chemical Reactions.*
 Tipo de participación: *Conferencia invitada*
 Lugar: Belfast, Gran Bretaña. 2-5 de Abril 2005
-
- *108.- Autores: F. J. Aoiz
 Título: "How the direction of the rotational angular momentum affects and controls the reactivity: Stereodynamics of simple chemical reactions"
 Congreso: XXI International Symposium on Molecular Beams
 Tipo de participación: *Conferencia invitada*
 Lugar: Hersonissos, Creta, Grecia. 15-20 de Mayo 2005
-
- 109.- Autores: A. E. Pomerantz, F. Ausfelder, R. N. Zare, J.C. Juanes-Marcos, S. Althorpe, V. Sáez Rábanos, F.J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo.
 Título: "Quantum state distributions for reactive and inelastic H+D₂ collisions."
 Congreso: XXI International Symposium on Molecular Beams
 Tipo de participación: *Poster*
 Lugar: Hersonissos, Creta, Grecia. 15-20 de Mayo 2005
-
- 110.- Autores: Nadia Balucani, Giovanni Capozza, Enrico Segoloni, L. Cartechini, Rolf Bobbenkamp, Piergiorgio Casavecchia, Luis Bañares, F. Javier Aoiz, B. Bussery-Honvault and J. M. Launay.
 Título: "Crossed beam experiments versus quantum and quasiclassical trajectory scattering calculations on *ab initio* potential energy surfaces for the C(¹D)+H₂ and N(²D)+H₂."
 Congreso: XXI International Symposium on Molecular Beams
 Tipo de participación: *Poster*
 Lugar: Hersonissos, Creta, Grecia. 15-20 de Mayo 2005
-
- 111.- Autores: R. Bobbenkamp, M. Menéndez, E. Verdasco, F. J. Aoiz, R. Bobbenkamp and H.J. Loesch,
 Título: "Experimental and theoretical study of the influence of reagent rotation on the Li+HF(v=0,j)→LiF+H reaction."
 Congreso: XXI International Symposium on Molecular Beams
 Tipo de participación: *Poster*

- Lugar: Hersonissos, Creta, Grecia. 15-20 de Mayo 2005
-
- *112.- Autores: F. J. Aoiz
 Título: "Some examples of experimental and theoretical studies of the dynamics of photodissociation and chemical reactions."
 Congreso: 34° Congreso Nazionale de la Divisione di Chimica Fissica de la Società Italiana de Chimica.
 Tipo de participación: *Conferencia invitada*
 Lugar: Siena, Italia. 20-24 de Junio 2005
-
- *113.- Autores: F. J. Aoiz
 Título: "Quasiclassical trajectory studies of the dynamics of 4 and 6 atoms reactions using potential energy surfaces by interpolation of *ab initio* data."
 Congreso: VIII Quantum Reactive Scattering
 Tipo de participación: *Conferencia invitada*
 Lugar: Santa Cruz, California, USA. 15-19 de Julio 2005
-
- 114.- Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, T. González-Lezama, V. J. Herrero, I. Tanarro.
 Título: "Influence of rotation and isotope effect on the dynamics of the N(²D)+H₂ reactive system. Congreso: VIII Quantum Reactive Scattering
 Tipo de participación: *Poster*
 Lugar: Santa Cruz, California, USA. 15-19 de Julio 2005
-
- 115.- Autores: J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, S. Vázquez, E. Martínez Núñez, A. Fernández-Ramos.
 Título: "The F+CH₄(CD₄) reaction dynamics using an *ab initio* potential energy surface constructed by interpolation."
 Tipo de participación: *Poster*
 Lugar: Santa Cruz, California, USA. 15-19 de Julio 2005
-
- 116.- Autores: F. J. Aoiz
 Título: "Stereodynamics of simple collision processes: Effect of the polarization of the initial angular momentum on the H+D₂(v=0, j=2) reactive and inelastic collisions."
 Congreso: CCP6 Workshop on Vector correlations and alignment in Chemistry.
 Tipo de participación: *Conferencia invitada*
 Lugar: Bristol, U.K. 24-27 de Julio 2005
-
- *117.- Autores: F. J. Aoiz, J. F. Castillo, L. Bañares.
 Título: "The dynamics of 4 and 6 atom reactions on interpolated *ab initio* potential energy surfaces".
 Congreso: ESPA 2006
 Tipo de participación: *Conferencia invitada*
 Lugar: Santiago de Compostela, Spain 18-21 de Julio 2006
-
- 118.- Autores: J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares.
 Título: "Quasiclassical trajectory studies of the Cl+CH₄ reaction using an *ab initio* potential energy surface constructed by interpolation".
 Congreso: ESPA 2006
 Tipo de participación: *Poster*
 Lugar: Santiago de Compostela, Spain 18-21 de Julio 2006
-
- *119.- Autores: F. J. Aoiz.
 Título: "Cumulative reaction probabilities: A comparison between Quasiclassical and Quantum mechanical results."
 Congreso: XII Dalian Institute of Chemical Physics Symposium on Molecular Physics
 Tipo de participación: *Conferencia Invitada*
 Lugar: Dalian, P. R. of China. 13-15 de Octubre 2006
-
- *120.- Autores: F. J. Aoiz, M. P. Miranda, J. Aldegunde, V. Sáez Rábanos and J. M. Alvario.
 Título: "Stereodynamics and mechanism of elementary chemical reactions: How the direction of the rotational angular momentum affects and controls the reactivity."
 Congreso: Stereodynamics 2006
 Tipo de participación: *Conferencia Invitada*
 Lugar: Arcachon, France 10-14 de Noviembre 2006
-
- *121.- Autores: F. J. Aoiz, T. González-Lezana and V. Sáez Rábanos.
 Título: "A statistical trajectory model for insertion reactions: A comparison with rigorous statistical quantum mechanical results."
 Congreso: IXth Workshop on Quantum Reactive Scattering.
 Tipo de participación: *Conferencia Invitada*
 Lugar: Clare Collage, Cambridge, United Kingdom 18-22 July 2007
-

- 122.- Autores: E. Carmona-Novillo, T. González-Lezana, O. Roncero, P. Honvaults, J. M. Launay, N. Bulut, F.J. Aoiz, L. Bañares, A. Trottier and E. Wrede.
Título: "The $H^+ + D_2(v=0, j=0)$ reaction: A comparison between theory and experiment."
Congreso: IXth Workshop on Quantum Reactive Scattering.
Tipo de participación: Poster
Lugar: Clare Collage, Cambridge, United Kingdom 18-22 July 2007
-
- 123.- Autores: N. Bulut, J. F. Castillo, F.J. Aoiz and L. Bañares.
Título: "Reaction dynamics and kinetics of the $LiH + H^+$ reaction by time-dependent real wave packet and quasiclassical trajectory calculations."
Congreso: IXth Workshop on Quantum Reactive Scattering.
Tipo de participación: Poster
Lugar: Clare Collage, Cambridge, United Kingdom 18-22 July 2007
-
- *124.- Autores: F.J. Aoiz
Título: "A combined study of the dynamics of insertion reactions."
Congreso: XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química.
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: Campus de Toledo UCLM, Toledo, España, 9-14 Septiembre 2007
-
- *125.- Autores: F.J. Aoiz
Título: "Stereodynamics of inelastic and reactive processes."
Congreso: International Symposium of Stereodynamics of Chemical Reactions (Stereodynamics 2008)
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: Dalian, Liaoning, P. R. China, 13-18 Octubre 2008
-
- 126.- Autores: J. Klos, M. Brouard, R. Muckle, E. Verdasco, and F.J. Aoiz
Título: Inelastic Scattering of rare gas atoms with NO(X) molecules revisited."
Congreso: XXIII International Symposium of Molecular Beams. (ISMB 2009))
Tipo de participación: *Presentación oral Invitada*.
Lugar: Dalian, Liaoning, P. R. China, 1-5 Junio 2009
-
- 127.- Autores: D. Zhang, A. Ballast, M. Brouard, F.J. Aoiz, D. Ding, and S. Stolte
Título: "Doublet and Multiplet structures in the rotational rainbows of quantum mechanically state-to-state resolved rotationally inelastic DCSSs."
Congreso: XXIII International Symposium of Molecular Beams. (ISMB 2009))
Tipo de participación: *Presentación oral Invitada*.
Lugar: Dalian, Liaoning, P. R. China, 1-5 Junio 2009
-
- *129.- Autores: F.J. Aoiz, P. G. Jambrina, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, and M. Hankel
Título: "Cumulative reaction probabilities and dynamics of the isotopic variants of the $H^+ + H_2$ reaction".
Congreso: 10th International Workshop on Quantum Reactive Scattering. (QRS 10th)
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: Dalian, Liaoning, P. R. China, 6-10 Junio 2009
-
- *130.- Autores: F.J. Aoiz, P. G. Jambrina, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, and J. M. Alvaríño
Título: "The dynamics of the isotopic variants of the $H^+ + H_2$ reaction: Can they be considered statistical reactions?".
Congreso: IBER 2009
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: Santiago de Compostela, La Coruña, Spain, 12-15 Julio 2009
-
- *131.- Autores: F.J. Aoiz, P. G. Jambrina, V. Sáez Rábanos, and T. González-Lezana
Título: "A statistical quasiclassical trajectory model for insertion reactions: Application to the $H^+ + H_2$ reaction."
Congreso: 14th International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP)
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: El Escorial, Madrid, Spain, 13-19 September 2009
-
- *132.- Autores: F.J. Aoiz
Título: "Quantum Mechanical and Quasiclassical Trajectory Calculations for Presumably Statistical Reactions"
Congreso: 2010 Mesilla Chemistry Workshop
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: Mesilla, New Mexico, USA, 7-10 February 2010
-
- *133.- Autores: F.J. Aoiz, J. Klos, M. Brouard, C. J. Eyles, and E. Verdasco.
Título: "The dynamics of inelastic collisions of rare gas atoms with NO(X) revisited."
Congreso: XVIII European Conference on Dynamics of Molecular Systems (MOLEC 2010)
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.

- Lugar: Curia-Anadia, Portugal, 5-11 September 2010
-
- *134.- Autores: F.J. Aoiz, J. Aldegunde, L. González-Sánchez, P. G. Jambrina, and J. F. Castillo,
Título: "Dynamics of Cl+H₂ inelastic collisions: Rainbow effects."
Congreso: XI Workshop on Quantum Reactive Scattering (QRS 2011)
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: Santa Fe, New Mexico, USA, 17-21 July 2011
-
- *135.- Autores: F.J. Aoiz, J. F. Castillo, M. Menéndez, and B. Martínez-Haya
Título: "The dynamics of the Cl+O₃ reaction: A theoretical study and comparison with experimental results."
Congreso: 2011 Conference on Molecular Energy Transfer (COMET 2011)
Tipo de participación: *Contributed Talk*.
Lugar: Oxford, UK, 11-16 September 2011
-
- 136.- Autores: B. Hornung, H. Chadwick, C. J. Eyles, B. Nichols, P. G. Jambrina, F.J. Aoiz, S. Stolte and M. Brouard.
Título: "Alignment effects in the rotationally inelastic collisions of NO(X)+Ar: A joint theoretical and experimental study."
Congreso: 2011 Conference on Molecular Energy Transfer (COMET 2011)
Tipo de participación: *Poster*.
Lugar: Oxford, UK, 11-16 September 2011
-
- 137.- Autores: P. G. Jambrina, R. Pérez de Tudela, E. García, V. J. Herrero, V. Sáez-Rábanos, and F.J. Aoiz,
Título: "Dynamics of the reaction of muonium atoms with hydrogen molecules: Zero point energy, tunnelling and vibrational adiabaticity."
Congreso: European Conference on the Dynamics of Molecular systems. MOLEC 2012.
Tipo de participación: *Poster*.
Lugar: Oxford, UK, 10-13 September 2012
-
- 138.- Autores: F.J. Aoiz, D. Herráez-Aguilar, P. G. Jambrina, J. F. Castillo, O. Roncero and V. J. Herrero.
Título: "Dynamics of Elementary reactions of astrophysical interest."
Congreso: II National Conference on laboratory and Molecular Astrophysics."
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: Sevilla, 14-16 November 2012
-
- 139.- Autores: R. Pérez de Tudela, F. J. Aoiz
Título: "Chemical reaction rate coefficients from Ring Polymer Molecular Dynamics."
Congreso: II National Conference on laboratory and Molecular Astrophysics."
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: Sevilla, 14-16 November 2012.
-
- 140.- Autores: F. J. Aoiz
Título: "Dynamics of the reactions of muonium with hydrogen molecules: Zero Point Energy, Tunneling and Vibrational adiabaticity."
Congreso: 2013 Mesilla Chemistry Workshop. Role of Non-Statistical Effects.
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*
Lugar: Mesilla, Las Cruces, New Mexico (USA) February 10-13 2013
-
- 141.- Autores: F. J. Aoiz, J. Aldegunde, P. G. Jambrina, V. J. Herrero, V. Sáez-Rábanos, E. García
Título: "Dynamics of reaction of Mu with hydrogen molecules: zero point energy and tunneling."
Congreso: XII Quantum Reactive Scattering."
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: Bordeaux (Francia), 10-14 June 2013
-
- 142.- Autores: F. J. Aoiz
Título: "A theoretical study of reactions of muonium with hydrogen molecules: Dynamics of the reactions of muonium with hydrogen molecules: Zero Point Energy, Tunneling and Vibrational adiabaticity".
Congreso: CECAM: Workshop on Many-dimensional quantum dynamics with (non) classical trajectories
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: Lausanne, 17-21 June 2013

- 143.- Autores P. G. Jambrina, J. Aldegunde, and F. J. Aoiz
 Título: "Multiple-slit interferences in reactive scattering."
 Congreso: XIII Quantum Reactive Scattering."
 Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
 Lugar: Salamanca, 6-10 July 2015
-
- 144.- Autores: P. G. Jambrina, J. Aldegunde, and F. J. Aoiz
 Título: "Quantum Interferences revealing classical mechanisms."
 Congreso: CECAM: Workshop on."
 Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
 Lugar: Paris, 6-10 April 2016
-
- 145.- Autores: P. G. Jambrina, J. Aldegunde, and F. J. Aoiz
 Título: "Quantum Interferences in chemical reactions: Do they reveal classical mechanisms?."
 Congreso: Conference on the Dynamics of Molecular systems. MOLEC 2016
 Tipo de participación: *Conferencia Plenaria*.
 Lugar: Toledo, 11-16 September 2016
-
- 146.- Autores: P. G. Jambrina, A. Zanchet, M. Brouard, and F. J. Aoiz
 Título: " Λ -Doublet ratio as an imprint of the reaction stereodynamics."
 Congreso: Stereodynamics 2016
 Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
 Lugar: Taipei (Taiwan), 6-11 November 2016
-
- 147.- Autores: F. J. Aoiz , P. G. Jambrina, A. Zanchet, M. Menéndez
 Título: "Elucidating the reaction mechanism through the Λ -Doublet ratio."
 Congreso: XIV International workshop on Quantum Reactive Scattering 2017
 Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
 Lugar: Trieste (Italia), 2-6 July 2017
-
- 148.- Autores: F. J. Aoiz and P. G. Jambrina
 Título: "Quantum interferences in reactive scattering: A new insight in the reaction mechanisms.."
 Congreso: 10th International Meeting on Photodynamics and Related Aspects (10th IMPRA)
 Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
 Lugar: Cartagena de Indias (Colombia), 3-7 September 2018
-

Seminarios impartidos y conferencias invitadas

- 1.- Lugar: Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Madrid
 Título: Estudio de reacciones químicas por haces moleculares
 Fecha: 12 de Marzo de 1980
- 2.- Lugar: 4º Escuela de Verano de Electrónica Cuántica. Sunny Beach, Bourgas, Bulgaria
 Título: Lasers in molecular beam experiments
 Fecha: 4 de Octubre de 1986
- 3.- Lugar: IV Encuentro de Dinámica Molecular. Facultad de Química, Universidad de Salamanca, Salamanca
 Título: La dinámica de la reacción F+H₂(D₂,HD). Cálculos en superficies de potencial recientes
 Fecha: 22 de Marzo de 1993
- 4.- Lugar: Sonder Seminar. Max Planck Institut für Strömungsforschung. Göttingen. Alemania
 Título: The F+H₂(D₂,HD) reaction revisited
 Fecha: 26 de Septiembre de 1994
- 5.- Lugar: Institut für Theoretische Chemie. Universität Stuttgart, Alemania
 Título: Quasi-classical trajectory calculations for chemical reactions. Comparison between theory and experiment
 Fecha: 5 de Octubre de 1994

- 6.- Lugar: Physical and Theoretical Chemistry Laboratory. Oxford University. Oxford, Reino Unido
Título: The hydrogen exchange reaction: a classical perspective
Fecha: 1 de Mayo de 1995
 - 7.- Lugar: Cursos de Verano de la Universidad Complutense. El Escorial
Título: The ozone molecule: structure, spectroscopy.
Fecha: 8 de Julio de 1996
 - 8.- Lugar: Cursos de Verano de la Universidad Complutense. El Escorial
Título: Photochemistry of ozone: photodissociation dynamics
Fecha: 9 de Julio de 1996
 - 9.- Lugar: Workshop on Comparisons of Classical and Quantum Dynamics. Mesilla. EEUU
Título: Classical versus quantum mechanical calculations of the dynamics of elementary reactions
Fecha: 12 de Febrero de 1997
 - 10.- Lugar: Oxford. Reino Unido, J.P. Simons. A celebratory meeting on dynamics and spectroscopy.
Título: Classical and quantal stereodynamics of elementary reactions
Fecha: 14 de Septiembre de 1999
 - 11.- Lugar: Salamanca. Curso interuniversitario de Doctorado de Química Teórica y Computacional
Título: Dinámica de las Reacciones Químicas (Curso 2001/02)
Fecha: 18-22 de Febrero de 2002
 - 12.- Lugar: El Escorial. Madrid. Curso interuniversitario de Doctorado de Química Teórica y Computacional
Título: Dinámica de las Reacciones Químicas (Curso 2002/03)
Fecha: 17-22 de Febrero de 2003
 - 13.- Lugar: Universidad de Valladolid. Lección magistral.
Título: Andando con moléculas: Espectroscopia Láser aplicada al estudio de la Dinámica de Reacciones Químicas.
Fecha: 14 de Marzo de 2003
 - 14.- Lugar: Madrid. III Semana de la Ciencia, organizada por la Comunidad de Madrid. Conferencias divulgativas sobre Química Teórica y Computacional. Título: Andando con moléculas: Cómo se producen las reacciones químicas.
Fecha: 4 de noviembre de 2003.
 - 15.- Lugar: Valladolid. Curso de Doctorado 'Estudios Avanzados en Química' de la Universidad de Valladolid. Profesor invitado. Impartición de 1,5 créditos.
 - 16.- Lugar: Florencia, European Laboratory for non-linear Spectroscopy (LENS)
Curso intensivo de doctorado. "Walking with molecules. Laser spectroscopy applied to Reaction Dynamics".
Impartición de 10 créditos. 24-30 de Junio 2005.
 - 17.- Lugar: Leeds. School of Chemistry, University of Leeds.
"Stereodynamics of elementary reactions: Control and mechanism.
7 Diciembre 2005.
 - 18.- Lugar: Oxford. Department of Chemistry. Physical and Theoretical Chemistry Lab.
PTCL Departamental Seminars. Hilary Term 2006
Stereodynamics and chemical reactions: Angular Momentum polarisation and reaction mechanism.
27 de Febrero 2006.
 - 19.- Lugar: Cambridge. Department of Chemistry.
Theoretical Chemistry Colloquia. Lent Term 2006
Stereodynamics of Elementary Reactions: Angular Momentum polarisation and reaction mechanisms.
-

7 de Marzo 2006.

- 20.- Lugar: Berlín. Fritz-Haber Institut of Max Planck Gesellschaft.
Sonder Seminar.
"How the direction of the rotational angular momentum affects and controls the reactivity: Stereodynamics and mechanism of elementary chemical reactions"
15 de Septiembre 2006.
- 21.- Lugar: Santander. Universidad de Cantabria. Curso interuniversitario de Doctorado de Química Teórica y Computacional
Título: Dinámica de las Reacciones Químicas (Curso 2006/07)
Fecha: 17-22 de Febrero de 2007
- 22.- Lugar: Sevilla, Universidad Pablo Olavide.
Ciclo de conferencias Quimiláser.
"Dinámica y Estereodinámica reactiva de alta resolución con láseres"
2 de Febrero 2008.
- 23.- Lugar: Madrid. Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales.
"Estereodinámica: ¿Puede controlarse una reacción química variando la polarización de los reactivos?"
14 de marzo de 2012.
- 24.- Lugar: Palo Alto, Stanford University, Departamental Seminar .
"Young double-slit experiments in chemical reactions: Quantum interferences in reactive scattering."
30 de mayo de 2017.

Tesis Doctorales dirigidas

Título: Estudio de procesos fotoiniciados mediante espectroscopia de ionización multifotónica resonante (REMPI)

Calificación: Sobresaliente cum laude

Doctorando: **Pablo Quintana Romojaro**

Universidad: Complutense de Madrid

Facultad de Química

Fecha: 8 de Noviembre 2002

Director: F. J. Aoiz y E. Verdasco.

Título: Stereodynamics of Chemical Reactions

Doctorado Europeo. Calificación: Sobresaliente cum laude y Premio Extraordinario de Doctorado.

Doctorando: **Jesús Aldegunde Carrión**

Universidad: Salamanca

Facultad de: Química

Fecha: 23 de Mayo de 2007

Directores: F. J. Aoiz y J. M. Alvaríño.

Título: Dynamics and Stereodynamics of barrierless reactions: Statistical and dynamical effects.

(Dinámica y estereodinámica de reacciones sin barrera: Efectos estadísticos y dinámicos.)

Doctorado Europeo. Calificación: Sobresaliente cum laude y Premio Extraordinario de Doctorado.

Doctorando: **Pablo García Jambrina**

Universidad: Salamanca

Facultad / Escuela: Química

Fecha: 7 de Septiembre 2011

Directores: F. J. Aoiz y J. M. Alvaríño.

Título: Dinámica y estereodinámica de colisiones átomo-diátomo reactivas e inelásticas.

Calificación: Sobresaliente cum laude. Premio Extraordinario Doctorado F. de Química. 2º premio de la RSEQ a la mejor tesis en la Comunidad de Madrid.

Doctorando: **Diego Herráez Agilar**

Universidad: Complutense de Madrid

Facultad: Química

Fecha: 23 de Enero 2015

Directores: F. J. Aoiz y Jesús Aldegunde Carrión.

Título: Estudio teórico de la dinámica de colisiones H₂+H₂

Calificación: Sobresaliente *Cum Laude* por Unanimidad

Doctorando: **Ismael Montero Vazquez**

Universidad Complutense de Madrid. 5 de Febrero 2016

Directores: F. J. Aoiz y P. G. Jambrina

Título: Building a Potential Energy Surface for the Ground singlet state of the hydrogen peroxide.

Doctorado Europeo. Calificación: Sobresaliente *Cum Laude* por Unanimidad

Doctorando: **Daniela Veloso Coelho Valente**

Universidade do Algarve, Faro. Portuugal. 24 de Enero 2017

Directores: Joao Brandao y F. J. Aoiz

Investigadores Pre y Postdoctorales tutelados

Bruno Martínez-Haya. Becario postdoctoral de reincorporación y becario Caja Madrid. De 1997 a 2000.

Jesús Fernández Castillo. Investigador Ramón y Cajal. Desde Enero de 2001 a Noviembre 2006.

Inmaculada Torres. Investigadora Ramón y Cajal. Desde octubre 2000 a Febrero 2005.

Gustavo Ariel Pino. Investigador postdoctoral becario del Mrio. de Educación y Ciencia en el programa Doctores y Tecnólogos Extranjeros. De Octubre de 2001 a Enero 2004.

Gabriel Amaral Mathon. Investigador postdoctoral becario del Mrio. de Educación y Ciencia en el programa Doctores y Tecnólogos Extranjeros de Noviembre 2002 a Abril 2004. Investigador Juan de la Cierva.de Enero 2005 al presente.

Jonathan Barr. Marie Curie postdoctoral fellowship. EU Research Training Network. HPRN-CT-1999-00007. De Octubre 2000 a Febrero 2004.

Jacek Klos. Marie Curie postdoctoral fellowship. EU Research Training Network. HPRN-CT-1999-00007. De Octubre 2003 a Febrero 2004.

Chris Eyles. Oxford University. Septiembre 2005 a Julio 2006. Part II thesis.

Jesús Aldegunde Carrión. Universidad de Salamanca. 2004-2007. Becario predoctoral.

Pablo García Jambrina. Universidad de Salamanca. 2006—2010. Becario predoctoral.

Diego Herráez Aguilar. Universidad Complutense 2010- . Becario predoctoral.

Ricardo Pérez de Tudela. Universidad Complutense. Contratado postdoctoral. 2011-2013

Pablo Gracia Jambrina. Universidad Complutense. Contratado postdoctoral 1/12/14 al 31/12/2015

Pablo Gracia Jambrina. Universidad Complutense. Contratado postdoctoral del Mrio. De Economía y Cmpetitividad (antiguos J. de la Cierva) 1/01/16 al 31/12/2017

Participación en comités y representaciones internacionales

Título del Comité: International Advisory Board

Entidad de la que depende: Revista Physical Chemistry Chemical Physics
Tema: Química Física

Fecha: Desde enero de 1999

Título del Comité: Scientific Commitee IBER 2002

Entidad de la que depende: GEFAM, RSEQ
Tema: Física Molecular y dinámica de reacciones

Fecha: Desde enero de 2002

Título del Comité: International Advisory Committee of the Conference on Molecular Energy Transfer (COMET)

Entidad de la que depende:
Tema: Transferencia de energía, Dinámica molecular de reacciones químicas

Fecha: Desde julio de 1999

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Título del Comité: International Advisory Committee of the Internacional Symposium of Molecular Beams.
Entidad de la que depende:
Tema: Haces moleculares, Reactividad Química, Transferencia de energía, Dinámica molecular de reacciones químicas

Fecha: Desde Mayo 2005

Título del Comité: International Editorial Board of the Journal of Chemical Physics.

Entidad de la que depende: American Institute of Physics.
Tema: Química Física

Fecha: 2010-2014

Experiencia en organización de actividades de I+D

Organización de congresos, seminarios, jornadas, etc., científicos-tecnológicos

Título: XVIII Conference on Molecular Energy Transfer
Tipo de actividad: Chairman Organizing Committee Ambito: Internacional

Fecha: 15-20 de Junio 2003

Título: Workshop on Quantum Reactive Scattering
Tipo de actividad: Chairman Organizing Committee Ambito: Internacional

Fecha: 20-23 Junio 2003

Título: Curso Interuniversitario de Doctorado de Química Teórica y Computacional
Tipo de actividad: Coordinador del Curso Ambito: Nacional

Fecha: 27 de Enero a 22 de Febrero 2003

Título: Curso de Verano UCM: Lasers in the XXI century.
Tipo de actividad: Organizador y director del curso

Fecha: 30-6-08 al 4-7-08

Título: International Symposium on Molecular Beams.
Tipo de actividad: Chairman Organizing Committee. Ambito: Internacional

Fecha: 28-6-15 al 3-7-15

Experiencia de gestión de I+D

Gestión de programas, planes y acciones de I+D

Título: Proyecto de Acondicionamiento de los semisótanos del martillo sur del Pabellón A de la Facultad de Química para la ubicación de los CAIs de la UCM

Tipo de actividad: Gestión del proyecto y consecución de la obra
Fecha: 2002/2003

Título: Proyecto de Acondicionamiento y reubicación del Centro de determinación estructural molecular de la UCM

Tipo de actividad: Elaboración y gestión del proyecto y consecución de la obra
Fecha: 2002/2004

Título: Director del Centro de Asistencia a la Investigación de Espectroscopia Multifotónica.

Tipo de actividad: Gestión
Fecha: De 1992 al 31/12/2013

Supervisor de contrato Ramón y Cajal de:

Inmaculada Torres Novalbo (desde Octubre 2001)
Jesús Fernández Castillo (desde Octubre de 2001)

Supervisor de contrato Juan de la Cierva de.

Gabriel Amaral Mathon (desde enero de 2005)

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Otros méritos o aclaraciones que se desee hacer constar
(utilice únicamente el espacio equivalente a una página).

PREMIOS

- 1.- Premio Extraordinario de Licenciatura. Curso 1975/1976. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Complutense de Madrid.
- 2.- Accésit al Premio Nacional de Fin de Carrera. Curso 1975/1976. Ministerio de Educación y Ciencia.
- 3.- Premio Extraordinario de Doctorado. Curso 1980/1981. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Complutense de Madrid.
- 4.- Premio de Investigación 2006 de la Real Sociedad Española de Química en el área de Química Física.

BECAS

- 1.- Beca Predoctoral. Plan Nacional de Formación de Personal Investigador. Ministerio de Educación y Ciencia
Periodo: 1977-1980 (4 años)
- 2.- Beca Postdoctoral. Plan Nacional de Formación de Personal Investigador. Ministerio de Educación y Ciencia
Periodo: 1981 (9 meses)
- 3.- Beca Postdoctoral MEC/Fulbright. Ministerio de Educación y Ciencia y Comisión Fulbright
Periodo: 1981-1982 (15 meses)
- 4.- Beca Fundación del Amo. Universidad Complutense de Madrid
Periodo: Mayo-Octubre 1990
- 5.- Beca del "Programa de Estancias de Investigadores Españoles en Centros de Investigación Extranjeros".
Ministerio de Educación y Ciencia
Periodo: Mayo-Octubre 1995
- 6.- Beca Sabáticos Complutense para su disfrute en la Universidad de Oxford. Período: Octubre 2005-Enero 2006.

VISITAS A CENTROS EXTRANJEROS

- 1.- Lugar: Centro de Física Molecular. Universidad de Lisboa. Portugal.
Fecha: 1984 (1 mes).
Tema: Interacciones atómicas y moleculares. Haces moleculares.
- 2.- Lugar: Department of Chemistry. University of Nottingham. Reino Unido.
Fecha: 1989 (1,5 meses)
Tema: Estudio con haces moleculares de las reacciones quimiluminiscentes de Ar* con compuestos fluorocarbonados.
- 3.- Lugar: Department of Chemistry. University of Nottingham. Reino Unido.
Fecha: 1992 (2 meses)
Tema: Estudio de correlaciones vectoriales en procesos de predicción por alienamiento de velocidad con láseres.

COMPLEMENTOS POR MÉRITOS DOCENTES (QUINQUENIOS)

- | | | |
|-----|------------------------------|--|
| 1.- | Periodo: 1/10/1976-30/9/1981 | concedido |
| 2.- | Periodo: 1/10/1981-30/9/1986 | concedido |
| 3.- | Periodo: 1/10/1986-30/9/1991 | concedido |
| 4.- | Periodo: 1/10/1991-30/9/1996 | concedido |
| 5.- | Periodo: 1/10/1996-30/9/2001 | concedido |
| 6.- | Periodo: 1/10/2001-30/9/2006 | concedido |
| 7.- | Período 1/10/2006-30/09/2011 | como sustitución de uno de Profesor Titular. |

TRAMOS DE INVESTIGACIÓN (SEXENIOS)

- | | | |
|-----|--------------------|----------------------|
| 1.- | Periodo: 1977-1982 | concedido 23/11/1990 |
| 2.- | Periodo: 1983-1988 | concedido 23/11/1990 |
| 3.- | Periodo: 1989-1994 | concedido 25/10/1995 |
| 4.- | Periodo: 1995-2000 | concedido 11/07/2001 |
| 5.- | Periodo: 2000-2006 | concedido 5/05/2007 |
| 6.- | Período 2007-2012 | concedido 23/04/2013 |

OTROS MERITOS

- Miembro del *International Advisory Board* de la revista *Physical Chemistry Chemical Physics*
- Miembro del *International Editorial Board* de la revista *Journal of Chemical Physics*
- PCCP Ownership Board member. Desde 2006 a la fecha.
- Referee habitual de *J. Chem. Phys.*, *J. Phys. Chem.*, *Chem. Phys. Lett.*, *Nature Chemistry*, *Science*, *PCCPetc.*

CITAS DE ARTÍCULOS CIENTÍFICOS SIGNIFICATIVOS PUBLICADOS ENTRE 1991-2010 (ACTUALIZADO A Noviembre de 2018)

h index=48 (Reuter, WOS)

Average Citations per Item: 28.13

1991

J. Chem. Phys. **94** 7991-8007 (1991) **58**

1992

Journal Chem. Physics, **97**, 7423-7436, (1992) **164**

1993

29. J. Chem. Soc. Faraday Trans., **89**, 1427 (1993) **83**

1994

33. Chem. Phys. Lett., **218**, 422-432 (1994) **42**

34. Chem. Phys. Lett., **223**, 215 (1994) **111**

36. J. Chem. Phys., **101**, 5781 (1994) **53**

37. J. Phys. Chem., **98**, 10665 (1994) **51**

1995

38. J. Chem. Phys., **102**, 9248 (1995) **79**

39. Science, **269**, 207 (1995) **136**

1996

J. Phys. Chem. **100**, 4071-4083(1996) **35**

46. J. Chem. Phys. **105**, 4964-4982 (1996) **230**

49. Science, **273**, 1519 (1996) **99**

Chem. Phys. Lett. **262** 589-597 (1996) **42**

Chem. Phys. Lett. **256** 561-568 (1996) **40**

1997

Chemical Physics Letters **264** (5): 487-494 (1997) **29**

Chemical Physics Letters **265**, 129-136 (1997) **34**

J. Chem. Phys. **106**: 7862-7864 (1997) **36**

J. Phys. Chem. A, **101**, 6403-6414 (1997) **64**

J. Phys. Chem. A, **101**, 7544-7557 (1997) **58**

Faraday Discuss. Chem. Soc., **108**, 375 (1997) **61**

1998

J. Chem. Phys. **108**, 6160-6169 (1998) **37**

J. Chem. Soc. Faraday Trans., **94**, 2483 (1998) **173**

J. Chem. Phys., **109**, 7244 (1998) **77**

1999

Physical Chemistry Chemical Physics **1**, 1149-1158 (1999) **31**

J. Chem. Phys. **110**, 9971-9981 (1999) **50**

J. Chem. Phys. **111**, 5368-5383 (1999) **97**

J. Chem. Phys. **111**, 4013-4024 (1999) **82**

2000	
Journal of Chemical Physics 112 , 670-685 (2000)	49
Physical Chemistry Chemical Physics 2 , 599-612 (2000)	31
Chemical Physics Letters 328 (4-6): 500-508 (2000)	19
Angewandte Chemie-International edition 39 (15), 2748-2752 (2000)	58
Physical Chemistry Chemical Physics 2 , 541-548 (2000)	52
2001	
Journal of Chemical Physics 114 (24): 10662-10672 (2001)	34
Phys. Rev. Lett. 86 (9): 1729-1732 (2001)	83
Journal of Chemical Physics 115 (5): 2074-2081 (2001)	22
2002	
Journal of Chemical Physics 116 (24): 10692-10703 (2002)	57
Physical Review Letter 89 (1) 013201 (2002)	85
2003	
J. Chem. Phys. 118 565-568 (2003)	173
2004	
J. Phys. Chem. A 108 , 1616 (2004)	59
J. ChemPhys. 120 , 3244 (2004)	42
2005	
Int. Rev. Phys. Chem. 24 , 119-190 (2005)	92
J. Phys. Chem. 109 , 6200-6217 (2005)	66
2006	
Journal of Physical Chemistry A 110 12546 (2006)	65
Journal of Physical Chemistry A 110 817-829 (2006)	67
2011	
Nature Chemistry 3 , 597-602 (2011)	24
2012	
Science 336 , 1687-1690 (2012)	14
J. Phys. Chem. Lett. 3 , 493-497 (2012)	61

Parte A. DATOS PERSONALES

Fecha del CVA	11/4/2019
----------------------	-----------

Nombre y apellidos	LUIS BAÑARES MORCILLO		
DNI/NIE/pasaporte		Edad	
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	B-7922-2014	
	Código Orcid	0000-0002-0777-2375	

A.1. Situación profesional actual

Organismo	UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID		
Dpto./Centro	DEPARTAMENTO DE QUÍMICA FÍSICA / FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS		
Dirección	AVDA. COMPLUTENSE S/N		
Teléfono	913944228	correo electrónico	ibanares@ucm.es
Categoría profesional	CATEDRÁTICO DE UNIVERSIDAD	Fecha inicio	27/01/2007
Espec. cód. UNESCO			
Palabras clave	dinámica molecular de las reacciones químicas, femtoquímica, espectroscopia láser		

A.2. Formación académica (título, institución, fecha)

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciado en Ciencias Químicas Examen de Grado (Tesina)	Universidad Complutense de Madrid	1985
Doctor en Ciencias Químicas	Universidad Complutense de Madrid	1990

A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica

Cinco (5) sexenios de investigación (fecha del último sexenio concedido: 2016). Ha dirigido seis tesis doctorales y actualmente dirige otras cinco. Ha dirigido trabajos de investigación para la obtención del Diploma de Estudios Avanzados, fin de Máster y fin de Grado. Ha sido supervisor de estudiantes de Grado, Máster, Doctorado y de investigadores postdoctorales.

Citas totales: 6125	Citas/ítem: 25,95	Citas/año (promedio últimos 5 años): 283
Publicaciones totales: 236	Índice h: 46	Fuente: Web of Science. Clarivate Analytics
Citas totales: 7276	Citas/ítem: 26,2	Citas/año (promedio últimos 5 años): 347
Publicaciones totales: 277	Índice h: 48 Índice i10: 149	Fuente: Google Scholar

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

Ha publicado 236 trabajos de investigación en revistas internacionales, editor de un libro y coautor de varios capítulos de libro y ha presentado más de 300 comunicaciones a Congresos Internacionales, muchas de ellas como conferencias invitadas o plenarias, relacionados con líneas de investigación en dinámica molecular de las reacciones químicas, femtoquímica y espectroscopia láser. Experto en el uso de técnicas experimentales de haces moleculares, espectroscopias láser, técnicas de imagen de iones y fotoelectrones, láseres ultrarrápidos y de técnicas teóricas de dinámica molecular como trayectorias cuasiclásicas y dispersión reactiva cuántica aplicadas al estudio de la dinámica de fotodisociación molecular y de reacciones bimoleculares. Tiene amplia experiencia en estudios experimentales de desorción/ionización láser acoplada con espectrometría de masas por tiempo de vuelo y en deposición de materiales por láser pulsado de femtosegundos y microestructurado de materiales con láser. Es director del Centro de Láseres Ultrarrápidos de la Universidad Complutense de Madrid. Ha sido investigador principal o investigador participante en proyectos de investigación regionales (Comunidad de Madrid), nacionales (investigación, Consolider, infraestructuras, acciones complementarias, acciones integradas, AECl) y europeos (COST, RTN, ITN). Ha dirigido seis tesis doctorales y actualmente dirige otras cinco. Ha dirigido trabajos de investigación para la obtención del Diploma de Estudios Avanzados, fin de Máster y fin de Grado. Ha sido supervisor de estudiantes de Grado, Máster, Doctorado y de investigadores postdoctorales.

Es *Associate Editor* de la revista *Physical Chemistry Chemical Physics* de la *Royal Society of Chemistry* y miembro del *Editorial Advisory Board* de las revistas *Journal of Physical Chemistry A,B,C,Letters* de la *American Chemical Society*, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* de *IOP Publishing* y de la Revista *Applied Sciences*, sección *Optics/Lasers/Photonics* de MDPI (Multidisciplinary Digital Publishing Institute). Es miembro del *Editorial Board (Review Editor)* de la revista *Frontiers in Physics (Section Physical Chemistry Chemical Physics)*. Es co-editor del *Journal of Physical Chemistry and Functional Materials* edited by JournalPark (TÜBİTAK ULAKBİM) Turkey.

Es miembro de la Real Sociedad Española de Física (RSEF) y de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ). Ha sido secretario, presidente y actualmente vocal del Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular (GEFAM), es presidente del Grupo Especializado de Láseres Ultrarrápidos (GELUR) de la RSEF y es vocal del Grupo Especializado de Fotoquímica de la RSEQ. Es *Fellow* de la *Royal Society of Chemistry*. Es socio de la Asociación Alexander von Humboldt de España. Es miembro de comités científicos de congresos internacionales y ha participado en la organización de congresos nacionales e internacionales, así como de escuelas de verano. Es colaborador habitual de la Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva (ANEP) del MINECO en la evaluación de proyectos de investigación y becas/contratos de investigadores. Ha sido secretario del comité 2 de la CNEAI para la evaluación de sexenios de investigación durante los años 2014 y 2015. Es evaluador de proyectos de diversas agencias internacionales (National Science Foundation y US Department of Energy de los EE.UU., DFG de Alemania, FONCYT de Argentina, México, NWO de Holanda). Ha formado parte del panel evaluador de la Universidad de Tampere (Finlandia). Actúa de forma rutinaria como evaluador de revistas científicas en los ámbitos de la Química, Física, Fotónica y Química Física y ha formado parte de numerosos tribunales de Tesis Doctorales.

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (ordenados por tipología)

C.1. Publicaciones

1. M. E. Corrales, J. González-Vázquez, R. de Nalda, **L. Bañares**, 2019, *Coulomb explosion imaging for the visualization of a conical intersection*, **J. Phys. Chem. Letter**, **10**, 138.
2. G. González-Rubio, P. Díaz-Núñez, A. Rivera, A. Prada, G. Tardajos, J. González-Izquierdo, **L. Bañares**, P. Llompарт, L. González-MacDowell, M. Alcolea Palafox, L. M. Liz-Marzán, O. Peña-Rodríguez, A. Guerrero-Martínez, 2017, *Femtosecond laser-pulse reshaping yields gold nanorods with ultranarrow surface plasmon resonances*, **Science**, **358**, 640.
3. M. E. Corrales, R. de Nalda, **L. Bañares**, 2017, *Strong laser field control of fragment spatial distributions from a photodissociation reaction*, **Nature Comm.**, **8**, 1345.
4. M. E. Corrales, P. Shternin, L. Rubio-Lago, R. de Nalda, O. Vasyutinskii, **L. Bañares**, 2016, *Femtosecond time-resolved photofragment angular momentum alignment in electronic predissociation dynamics*, **J. Phys. Chem. Lett.**, **7**, 4458.
5. G. González-Rubio, J. González-Izquierdo, **L. Bañares**, G. Tardajos, A. Rivera, T. Altantzis, S. Bals, O. Peña-Rodríguez, A. Guerrero-Martínez, Luis M. Liz-Marzán, 2015, *Femtosecond laser-controlled tip-to-tip assembly and welding of gold nanorods*, **Nano Lett.**, **15**, 8282.
6. M. E. Corrales, J. González-Vázquez, G. Balerdi, I. R. Solá, R. de Nalda, **L. Bañares**, 2014, *Control of ultrafast molecular photodissociation by laser induced potentials*, **Nature Chem.**, **6**, 785.
7. R. de Nalda, **L. Bañares**, Editores, 2014, *Ultrafast Phenomena in Molecular Sciences. Femtosecond Physics and Chemistry*. Series: **Springer Series in Chemical Physics**, Vol. 107, 346 p. ISBN 978-3-319-02050-1. Springer International Publishing Switzerland 2014.
8. M. E. Corrales, G. Balerdi, V. Lorient, R. de Nalda, **L. Bañares**, 2013, *Strong field control of predissociation dynamics*, **Faraday Discuss.**, **163**, 447.
9. M. Brouard, I. Burak, D. Minayev, P. O’Keeffe, S. Marinakis, C. Vallance, F. J. Aoiz, **L. Bañares**, J. F. Castillo, D. H. Zhang, D. Xie, M. Yang, S.-Y. Lee, M. A. Collins, 2003, *The cross-section for the H+H₂O abstraction reaction: experiment and theory.*, **Phys. Rev. Lett.**, **90**, 093201.

10. L. Schnieder, K. Seekamp-Rahn, J. Borkowski, E. Wrede, K. H. Welge, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. J. D'Mello, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, R.E. Wyatt, 1995, *Experimental studies and theoretical predictions for the $H+D_2 \rightarrow HD+D$ reaction*, **Science**, **269**, 207.

C.2. Proyectos

1. *Fotónica ULtrarrápida para el diseño de nuevos MATeriales y la captura eficiente de Energía (FULMATEN-CM)*. Programa de proyectos sinérgicos de I+D en nuevas y emergentes áreas científicas en la frontera de la ciencia y de naturaleza interdisciplinar de la Comunidad de Madrid 2018. Proyecto Y2018/NMT-5028. Principal investigators: Fernando Martín (IMDEA-Nanociencia) y **Luis Bañares**. Duración: 2019-2021. Financiación: 828.630€.

2. *Procesos moleculares fotoinducidos y colisionales por medio de experimentos láser y métodos teóricos*. Subdirección General de Proyectos de Investigación. Ministerio de Economía y Competitividad. Proyecto CTQ2015-65033-P. Investigadores principales: Francisco Javier Aoiz Molerés y **Luis Bañares Morcillo**. Duración: 2016-2018. Financiación: 223.400 euros.

3. *Dinámica de procesos moleculares con láser y métodos teóricos*. Subdirección General de Proyectos de Investigación. Ministerio de Ciencia e Innovación. Proyecto CTQ2012-37404-C02-01. Investigador principal: Francisco Javier Aoiz Molerés. Duración: 2013-2015. Financiación: 217.000 euros.

4. *Dinámica de procesos químicos: Experimentos fotoiniciados con láseres de nanosegundo y femtosegundo y métodos teóricos*. Subdirección General de Proyectos de Investigación. Ministerio de Ciencia e Innovación. Proyecto CTQ2008-02578/BQU. Investigador principal: Francisco Javier Aoiz Molerés. Duración: 2009-2013. Financiación: 408.000 euros.

5. *FASTQUAST: Ultrafast control of quantum systems by strong laser fields*. Marie Curie Initial Training Networks (ITN). Project No. PITN-GA-2008-214962. Participantes: Université de Bourgogne (Dijon), Université de Toulouse, Imperial College London, University College London, Oxford University, University of Kassel, University of Aarhus, University of Sofia, CSIC, Weizmann Institute of Science (Israel), IESL-FORTH (Crete), Fastlite SARL (Paris), Femtolasers Produktions GmbH (Vienna), Ape GmbH (Berlín). Investigador principal español: Rebeca de Nalda Mínguez. Duración 2008-2012. Financiación: 5 Meuros.

6. *Adquisición de un sistema láser de nanosegundos de estado sólido*. Ayudas en forma de anticipos reembolsables para proyectos de infraestructura científico-tecnológica. Ministerio de Educación y Ciencia. UCMA06-33-054. Investigador principal: **Luis Bañares Morcillo**. Año de adjudicación: 2007. Financiación: 352.333,76 euros

7. *Science and applications of ultrafast ultraintense lasers (SAUUL)*. Proyecto Consolidar-Ingenio 2010 CSD2007-00013. Participantes: Universidad de Salamanca, Universidad Complutense de Madrid, Universidad de Murcia, Universidad del País Vasco, Universidad Jaime I de Castellón, Instituto de Ciencias Fotónicas de Barcelona. Investigador coordinador: Luis Roso Franco (Universidad de Salamanca). Investigador principal UCM: **Luis Bañares Morcillo**. Duración 2008-2012. Financiación total: 4.500.000 euros.

C.3. Contratos

1. *Funcionamiento y mantenimiento de equipos de espectrofotometría específicos (RSD)* Contrato de Asesoría (Art. 83) con Remote Sensing Lab S.L. Investigador principal: **Luis Bañares Morcillo**. Duración: 6 meses, 2014. Financiación: 2.500 euros.

C.4. Patentes

C.5. Comité Editorial de Revistas Internacionales

- Miembro del *Editorial Board (Review Editor)* de la revista *Frontiers in Physics (Section Physical Chemistry Chemical Physics)* (desde Julio 2013)
- *Associate Editor* de la revista *Physical Chemistry Chemical Physics* de la *Royal Society of Chemistry* (desde Enero de 2015)
- Miembro del *Editorial Advisory Board* de la Revista *Journal of Physical Chemistry A,B,C,Letters* de la *American Chemical Society* (desde Enero 2017)
- Miembro del *Editorial Board* de la sección *Optic/Laser/Photonics* de la revista *Applied Sciences* de MDPI (Multidisciplinary Digital Publishing Institute) AG (desde noviembre 2017)
- Miembro del *Editorial Board (Review Editor)* de la revista *Frontiers in Physics (Section Physical Chemistry Chemical Physics)* (desde Julio 2013)

- Co-editor del *Journal of Physical Chemistry and Functional Materials* editado por *JournalPark* (TÜBITAK ULAKBİM), Turquía (desde Junio 2018)
- Miembro del *International Advisory Board* de la revista *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* editada por *IOP Publishing* (desde Enero 2019)

C.6. Comités Organizadores y Comités Científicos (por orden cronológico)

- Director del Curso de Verano UCM *Femtoquímica y Femtobiología*. San Lorenzo de El Escorial (Madrid) (24 a 28 de Julio de 2000)
- Miembro del Comité Científico de la *XXIX Bienal de la Real Sociedad Española de Física (Bienal del Centenario)*. Madrid (7-11 de Julio de 2003)
- *Chairman* de la *European Conference on Molecular Energy Transfer XVIII (COMET XVIII)*. San Lorenzo de El Escorial (15-20 de Junio de 2003)
- *Chairman* del *International Complutense Seminar on Quantum Reactive Scattering (VII QRS)*. San Lorenzo de El Escorial (20-23 de Junio de 2003).
- *Chairman* del *6th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER 2003*. Madrid (9-11 de Julio de 2003)
- Miembro del *International Advisory Committee* del *International Symposium on Molecular Beams*
- Director del Curso de Verano UCM *Los láseres en el siglo XXI*, San Lorenzo de El Escorial (Madrid) (30 de junio al 4 de julio de 2008)
- Miembro del Comité Organizador del *18th International Laser Physics Workshop. LPHYS09*. Barcelona (13-17 de julio de 2009)
- Secretario del congreso *European Conference on Atoms, Molecules and Photons (ECAMP10)*. Salamanca (4-9 de julio de 2010)
- Miembro del Comité Científico del *11th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2011*. Coimbra (19-22 de Junio de 2011)
- *Chairman* del *FEMTO10: The Madrid Conference on Femtochemistry*. Madrid (10-15 de Julio de 2011)
- Miembro del *International Advisory Committee* del *International Conference on Femtochemistry*
- Miembro del Comité Científico del *12th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2013*. Sevilla (9-12 de Septiembre de 2013)
- *Chairman* del *ISMB2015: XXVI International Symposium on Molecular Beams*. Segovia (28 Junio-3 de Julio de 2015)
- Secretario del Comité Local del *XXXIX International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, ICPEAC2015*. Toledo, España (22-28 Julio 2015).
- Miembro del Comité Científico del *13th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2015*. Aveiro, Portugal (6-9 de Septiembre de 2015).
- Miembro del Comité Científico del *14th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2017*. Barcelona, España (12-14 de Septiembre de 2017).

C.7. Pertenencia y Cargos en Sociedades Científicas (por orden cronológico)

- Miembro de la Real Sociedad Española de Física (RSEF)
- Miembro de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ)
- Secretario y Tesorero del Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular (GEFAM) de la RSEF y la RSEQ (Periodo: 1998-2005)
- Vicepresidente del Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular (GEFAM) de la RSEF y la RSEQ (Periodo: 2005-2009)
- Miembro del Grupo Especializado de Fotoquímica (RSEQ)
- Vocal de la Junta Directiva de la Sec. Territorial de Madrid de la RSEQ (hasta 2010)
- Miembro de la *Asociación Alexander von Humboldt de España*
- Miembro del Comité Editorial de la revista *Anales de Química* de la Real Sociedad Española de Química (Periodo: 2009-2011)
- Presidente del Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular (GEFAM) de la RSEF y la RSEQ (Periodo: 2009-2013). Vocal (Periodo: 2013-actualidad).
- *Fellow* de la *Royal Society of Chemistry*
- Presidente del Grupo Especializado de Láseres Ultrarrápidos (GELUR) de la RSEF.

**Parte A. DATOS PERSONALES****Fecha del CVA** 25-2-19

Nombre y apellidos	Berta Fernández Rodríguez		
DNI/NIE/pasaporte		Edad	
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	K-5927-2014	
	Código Orcid	0000-0001-6686-6534	

A.1. Situación profesional actual

Organismo	Universidad		
Dpto./Centro	Química Física/Facultad de Química		
Dirección	Avenida de las Ciencias s/n		
Teléfono	+34653478534	Correo electrónico	berta.fernandez@usc.es
Categoría profesional	Catedrática	Fecha inicio	9.5.11
Espec. cód. UNESCO	221099		
Palabras clave	química cuántica, estructura electrónica, evaluación de propiedades moleculares e intermoleculares, programa DALTON		

A.2. Formación académica (título, institución, fecha)

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciada en Química	Santiago de Compostela	1987
Doctorado en Química	Santiago de Compostela	1991

A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica (véanse instrucciones)

Número de sexenios: 4, último concedido en 2013 (2006-2012).

Tesis dirigidas: 4; 1 en los últimos 10 años.

Artículos: 107 (92 con citas) Capítulos libro: 1 Citas totales: 2132

Promedio de citas/año durante los últimos 5 años (sin incluir el año actual): aprox. 183

Publicaciones totales (en primer cuartil (Q1)): 105 totales (> 50 en Q1).

Índice h: 21

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM (máximo 3500 caracteres, incluyendo espacios en blanco)

Me licencié en Química (Química Física) en la Universidad de Santiago de Compostela (Premio Extraordinario) y obtuve el doctorado en la misma Universidad con la tesis titulada "Estudio teórico estructural de compuestos con unidades N-C-O. Cálculos "ab initio" y campos de fuerzas de Mecánica Molecular" (Premio Extraordinario). Realicé una estancia posdoctoral en el grupo de Química Teórica de la Universidad de Aarhus (Dinamarca), con un contrato Marie Curie individual y bajo la dirección del Prof. Jørgensen (<http://pure.au.dk/portal/en/pou@chem.au.dk>). Trabajé dos años como Profesora Titular interina en el Dpto. de Química Física de la Universidad de Santiago, a continuación como Profesora Titular y actualmente soy Catedrática de Universidad.

Mi investigación se centra en la evaluación de forma altamente exacta de propiedades moleculares e intermoleculares, campo en el que abrí una línea de investigación en el Departamento de Química Física y formé el grupo de Química Cuántica (qfminerva.usc.es). La investigación se lleva a cabo desarrollando la teoría correspondiente a las propiedades que interesa evaluar, poniendo a punto código dentro del programa químico cuántico DALTON (<http://www.daltonprogram.org/>) y después aplicándolo al estudio de un considerable número de sistemas químicos. Actualmente, las aplicaciones se centran en el estudio de interacciones intermoleculares.



Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (ordenados por tipología)

C.1. Publicaciones 10 más relevantes de las más recientes (se seleccionaron las más recientes y las más relacionadas con la presente solicitud)

1. Autores: B. Fernández, R. Rodríguez, E. Quiñoá, R. Riguera, F. Freire
Título: "Decoding the ECD spectra of Poly(phenylacetylene)s: Structural significance"
Revista: ACS Omega, aceptado 2019. (DOI: 10.1021/acsomega.9b00122).
2. Autores: A. Baranowska-Łaczkowska, B. Fernández
Título: Accurate calculation of optically induced birefringences in chiral systems using efficient polarized basis sets
Revista: Phys. Chem. Chem. Phys., 20, 29717-29723, 2018. (DOI: 10.1039/C8CP05648J)
3. Autores: B. Fernández, R. Rodríguez, A. Rizzo, E. Quiñoá, R. Riguera, F. Freire
Título: Predicting the Helical Sense of Poly(phenylacetylene)s from their Electron Circular Dichroism Spectra
Revista: Angew. Chem., Int. Ed., 57, 3666-3670, 2018. (DOI: 10.1002/anie.201713164).
4. Autores: E. M. Cabaleiro-Lago, B. Fernández, J. Rodríguez-Otero
Título: " Dissecting the concave-convex π - π interaction in corannulene and sumanene dimers: SAPT(DFT) analysis and performance of DFT dispersion-corrected methods "
- Revista: J. Comput. Chem, 39, 93-104, 2018.
5. Autores: D. Ferro-Costas, E. Martínez-Núñez, J. Rodríguez-Otero, E. Cabaleiro-Lago, C. Estévez, B. Fernández, A. Fernández-Ramos, S. Vázquez
Título: The Influence of Multiple Conformations and Paths on Rate Constants and Product Branching Ratios. Thermal Decomposition of 1-Propanol Radicals
Revista: J. Phys. Chem. A, 122 (21), 4790-4800, 2018.
6. Autores: F. Rodríguez-Prieto, C. Costa Corbelle, B. Fernández, J. A. Pedro, M. C. Ríos Rodríguez, M. Mosquera
Título: Fluorescence quenching of the N-methylquinolinium cation by pairs of water or alcohol molecules
Revista: Phys. Chem. Chem. Phys., 20, 307-316, 2018.
7. Autores: A. Baranowska-Łaczkowska, M. Kozak, K. Z. Łaczkowski, B. Fernández
Título: Theoretical calculation of NMR shifts in newly developed antibacterial 4-Formylbenzoic Acid Based Thiazoles
Revista: Theor. Chem. Acc., 137, 46, 2018 (DOI: 10.1007/s00214-018-2214-3).
8. Autores: H. Cybulski, C. Henriksen, R. Dawes, X.-G. Wang, N. Bora, G. Avila, T. Carrington Jr., B. Fernández
Título: Ab initio study of the CO–N₂ complex: A new highly accurate intermolecular potential energy surface and rovibrational spectrum
Revista: Phys. Chem. Chem. Phys., 20, 12624-12636, 2018. (DOI: 10.1039/C8CP01373J).
9. Autores: A. Baranowska-Łaczkowska, K. Łaczkowski, C. Henriksen, B. Fernández,
Título: "New basis set for the evaluation of specific rotation in flexible biological molecules in solution"
Revista: J. Phys. Chem. A, 122 (24), 5477–5483, 2018 (DOI: 10.1021/acs.jpca.8b03320).
10. Autores: K. Aidas, C. Angeli, K. L. Bak, V. Bakken, L. Boman, O. Christiansen, R. Cimiraglia, S. Coriani, P. Dahle, E. K. Dalskov, U. Ekström, T. Enevoldsen, J. J. Eriksen, P. Ettenhuber, B. Fernández, L. Ferrighi, H. Fliegl, L. Frediani, E. Fromager, K. Hald, A. Halkier, C. Hättig, H. Heiberg, T. Helgaker, A. C. Hennum, H. Hettema, S. Hoest, I.M. Hoeyvik, B. Jansik, H. J. Aa. Jensen, D. Jonsson, P. Joergensen, J. Kauczor, S. Kirpekar, T. Kjaergaard, W. Klopper, S. Knecht, R. Kobayashi, J. Kongsted, H. Koch, A. Krapp, K. Kristensen, A.



Ligabue, O. B. Lutnaes, J. I. Melo, K. V. Mikkelsen, C. Neiss, C. B. Nielsen, P. Norman, J. Olsen, J. M. H. Olsen, A. Osted, M. J. Packer, F. Pawlowski, T. B. Pedersen, P. F. Provasi, S. Reine, Z. Rinkevicius, T. A. Ruden, K. Ruud, V. Rybkin, P. Salek, C. C. M. Samson, A. Sánchez de Merás, T. Saue, S. P. A. Sauer, B. Schimmelpfennig, K. Sneskov, A. H. Steindal, K. O. Sylvester-Hvid, P. R. Taylor, A. M. Teale, E. I. Tellgren, D. P. Tew, A. J. Thorvaldsen, L. Thoergersen, O. Vahtras, M. A. Watson, D. J. D. Wilson, M. Ziolkowski, H. Aagren.

Título: The DALTON quantum chemistry program system.

Revista: WIREs Computational Molecular Science, 2014, 4:269–284. doi: 10.1002/wcms.1172.

C.2. Proyectos como investigadora principal (últimos 10 años):

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia e Innovación.

TÍTULO: Estudio “ab initio” de complejos de van der Waals y de enlace de hidrógeno: Estructura y reactividad (42.350,00 €). DURACIÓN: 1.1.12 - 31.12.15.

TÍTULO: Complejos de van der Waals: Evaluación precisa de propiedades de interacción (54450 euros). DURACIÓN: 1.1.09 - 31.12.11.

TÍTULO: Evaluación de propiedades electrónicas de sistemas interaccionantes de forma altamente precisa (76160 euros). DURACIÓN: 15.10.05 - 30.12.08.

ENTIDAD FINANCIADORA: Xunta de Galicia.

TÍTULO: Estudio teórico de complejos moleculares de interés astrofísico (82864 euros).
INVESTIGADORES PRINCIPALES: Berta Fernández Rodríguez (Univ. Santiago) y Jesús R. Flores Rodríguez (Univ. Vigo). DURACIÓN: 1.12.09 - 1.12.12.

C.3. Contratos, méritos tecnológicos o de transferencia

TÍTULO CONTRATO: Understanding nano-materials from the quantum perspective.

TIPO CONTRATO: Red de Investigación. MCRT-CT-2003-506842.

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIADORA: Comisión Europea, Programa TMR.

ENTIDADES PARTICIPANTES: Univ. de Estocolmo (Prof. Aagren, coordinador), Univ. de Santiago de Compostela (Profa. Fernández), Univ. de Mainz (Prof. Gauss), CNR Pisa (Prof. Rizzo), Univ. Helsinki (Prof. Sundholm), Univ. Oslo (Prof. Helgaker), Univ. Odense (Prof. H.J.Aa. Jensen), Univ. de Tartu (Prof. M. Karelson), Univ. de Varsovia (Prof. M. Jaszunski), Univ. de Warwick (Prof. P. Taylor). DURACIÓN: 1.4.2004 - 1.4.2007

NÚMERO INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 43. TOTAL EUROS: 1780564 euros.

C.4. Conferencias en congresos (las más destacadas de las más recientes)

1. TÍTULO: Improving the accuracy of intermolecular potential energy surfaces and rovibrational spectra of weak-bonded complexes.

CONGRESO: Methods and Algorithms in Quantum Chemistry, Aarhus (Denmark), 2018.

2. TÍTULO: The Helical Sense of Poly(phenylacetylene)s from Electron Circular Dichroism Spectra: A Computational Evaluation.

CONGRESO: 4th Computational Chemistry (CC) Symposium - The main symposium of ICCMSE 2018. Thessaloniki (Greece), 2018.

3. TÍTULO: The Helical Sense of Poly(phenylacetylene)s from Electron Circular Dichroism Spectra: A Computational Evaluation.

CONGRESO: TSRC Workshop on Intermolecular interactions: New challenges for ab initio theory, Arenas de Cabrales (Spain), 2017.



4. TÍTULO: Evaluation of ECD spectra in PPAs.
CONGRESO: Molecular Properties and Computational Spectroscopy From Esoteric Effects to Novel Probing Tools. Pisa (Italia), 2017.
5. TÍTULO: Accurate evaluation of intermolecular potentials and properties.
CONGRESO: 2nd Molecules in Motion General Meeting. Dubrovnik (Croacia), 2016.
6. TÍTULO: Interaction potentials and new developments.
CONGRESO: Intermolecular interactions: New challenges for ab initio theory. Telluride (USA), 2015.
7. TÍTULO: Accurate evaluation of interaction potentials.
CONGRESO: Third workshop on Atomic and Molecular Physics, Varadero (Cuba), 2015.
8. TÍTULO: DFT applications to CD and absorption-phosphorescence spectroscopy.
CONGRESO: The Future of Electronic Structure Theory: Pushing Our Understanding and Limits. Sandbjerg, (Dinamarca), 2014.
9. TÍTULO: Interaction Potentials and (hyper)polarizabilities in weakly-bonded complexes.
CONGRESO: Intermolecular interactions: New challenges for ab initio theory. Telluride (USA), 2013.
10. TÍTULO: Accurate Evaluation of Interaction Polarizabilities and Hyperpolarizabilities in van der Waals and H-bonded Complexes.
CONGRESO: 2nd Annual World Congress of Advanced Materials. Suzhou (China), 2013.
11. TÍTULO: Accurate Evaluation of Interaction Properties.
CONGRESO: Theoretical Chemistry told by Women. Tarragona (España), 2013.
12. TÍTULO: Accurate Evaluation of Intermolecular Properties in van der Waals and H-bonded Complexes.
CONGRESO: Advanced Materials Beijing (China), 2012.
13. TÍTULO: Towards accurate evaluation of interaction properties in large van der Waals and H-bonded complexes.
CONGRESO: 5th Asian Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry. Rotorua (Nueva Zelanda), 2011.
14. TÍTULO: Coupled Cluster evaluation of interaction properties.
CONGRESO: Intermolecular Interactions: New Challenges for ab initio Theory. Silverton, (USA), 2010.
15. TÍTULO: Accurate description of the dispersion interaction.
CONGRESO: Quantum Chemistry beyond the Arctic Circle. Sommarøy – Tromsø, (Noruega), 2010.

C.5. Otros

Coautora del **programa químico cuántico DALTON**: <http://www.daltonprogram.org>

Participación **acciones COST**: Perspect-H2O: Supramolecular Photocatalytic Water Splitting y MOLIM: Molecules in Motion.

Organización de workshops: “TSRC Workshop on Intermolecular Interactions: New challenges for ab initio Theory”, Arenas de Cabrales, Julio 2017; “MOLIM workshop on Intermolecular Interactions”, Santiago, octubre 2017; “Telluride Science and Research Center Workshop on Intermolecular Interactions”, Telluride (USA), marzo 2019.

Parte A. DATOS PERSONALES

Fecha del CVA	12/04/2019
----------------------	------------

Nombre y apellidos	PEDRO CARLOS GÓMEZ CALZADA		
DNI/NIE/pasaporte		Edad	
Núm. identificación del investigador	Researcher ID		
	Código Orcid		

A.1. Situación profesional actual

Organismo	UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID		
Dpto./Centro	DEPARTAMENTO DE QUÍMICA FÍSICA I / FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS		
Dirección	AVDA. COMPLUTENSE S/N		
Teléfono	913944279	correo electrónico	pgomez@ucm.es
Categoría profesional	CATEDRÁTICO DE UNIVERSIDAD	Fecha inicio	18.04.2017
Espec. cód. UNESCO			
Palabras clave	Química Cuántica, Agregados moleculares, Química atmosférica		

A.2. Formación académica (título, institución, fecha)

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Doctor en Ciencias Químicas	Universidad Complutense de Madrid	1987

A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica (véanse instrucciones)

Cinco (5) sexenios de investigación (fecha del último sexenio concedido: 2014).

Ha dirigido una tesis doctoral. Ha dirigido varios trabajos de investigación de distinto tipo (Diploma de Estudios Avanzados, fin de Máster y fin de Grado). Ha sido supervisor de estudiantes de Grado, Máster y Doctorado.

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM (máximo 3500 caracteres, incluyendo espacios en blanco)

Ha publicado 60 trabajos de investigación en revistas internacionales (en su gran mayoría Q1), autor de varios capítulos de libro y ha presentado cerca de un centenar de comunicaciones a Congresos nacionales e internacionales, relacionados con líneas de investigación en Espectroscopía teórica de alta resolución, Química atmosférica y estudios de agregados moleculares, especialmente en enlace de hidrógeno. Tiene amplia experiencia en estudios químicocuánticos de sistemas moleculares.

Ha impartido numerosos seminarios en diferentes centros de investigación, universidades nacionales y extranjeras y escuelas de verano donde ha sido investigador visitante.

Ha sido investigador principal en dos proyectos y de investigación y ha participado en otros 15 tanto regionales (Comunidad de Madrid), nacionales (investigación, Consolider) como europeos (Acciones integradas).

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (ordenados por tipología)

C.1. Publicaciones

Algunas publicaciones representativas del tipo de trabajo realizado en el campo de los agregados moleculares de importancia atmosférica, unidos por enlace de hidrogeno, y sistemas de interés astrofísico:

- 1) P. C. Gómez., O. Gálvez, R. Escribano, 2009, *Theoretical study of atmospheric clusters: H₂O/HCl/HNO₃*, Phys. Chem. Chem. Phys.: 11, 9710-9719, DOI:10.1039/B911457B
- 2) B. Maté, V. J. Herrero, Y. Rodríguez-Lazcano, D. Fernández-Torre, M. A. Moreno, P. C. Gómez, R. Escribano, 2012, *Cyanate ion in compact amorphous water ice*, The Astrophysical Journal: 759:90,1-7 , DOI:10.1088/0004-637X/759/2/90
- 3) O. Gálvez, J. C. Gómez Martín, P. C. Gómez, A. Saiz-López, L. F. Pacios, 2013, *Theoretical study on the formation of iodine oxides aggregates and monhydrates*, Phys. Chem. Chem. Phys.: 15, 15572 , DOI: 10.1039/c3cp51219c
- 4) M.A. Moreno, B. Maté, Y. Rodríguez-Lazcano, O. Gálvez, P.C. Gómez, V.J. Herrero, R. Escribano, 2013, *The structure and spectroscopy of cyanate and bicarbonate ions. Astrophysical implications*, J. Phys. Chem A.:117,9564-9573, dx.doi.org/10.1021/jp3122616
- 5) P. C. Gómez, R. Escribano, 2017, *Vibrational spectra and physico-chemical properties of astrophysical analogs*, Phys. Chem. Chem. Phys, 19, 26582 – 26588, DOI: 10.1039/C7CP04695B
- 6) R. Escribano, P. C. Gómez. B. Maté, E. Artacho, 2019, *Prediction of near-IR spectra of ices by ab initio molecular dynamics*, Phys. Chem. Chem. Phys.,DOI: 10.1039/C9CP00857H

C.2. Proyectos

Últimos proyectos en los que ha participado:

- 1.- *Experimental and theoretical studies on hydrates of halogen oxides*. Entidad financiadora: Accion Integrada España Austria HU2007-0021 (11490€).Entidades participantes: UCM-Wien Technische Universität. Duración, desde: 03-2008 hasta: 03-2009. Investigador responsable: Dr. P. C. Gómez Fac. C.C. Químicas. UCM. Número de investigadores participantes: 4
- 2.- *Dinámica de procesos químicos: Experimentos fotoiniciados con láseres de nanosegundo y femtosegundo y métodos teóricos*. Subdirección General de Proyectos de Investigación. Ministerio de Ciencia e Innovación. Proyecto CTQ2008-02578/BQU. Investigador principal: Francisco Javier Aoiz Molerés. Duración: 2009-2013. Financiación: 408.000 euros.
2. *Dinámica de procesos moleculares con láser y métodos teóricos*. Subdirección General de Proyectos de Investigación. Ministerio de Ciencia e Innovación. Proyecto CTQ2012-37404-C02-01. Investigador principal: Francisco Javier Aoiz Molerés. Duración: 2013-2015. Financiación: 217.000 euros.

3.- *Dinámica molecular de las reacciones químicas y fotoquímicas*. Entidad financiadora: Programa de creación y consolidación de grupos de investigación. UCM-Santander (3688€). Convocatoria: GR35/10-A. Grupo: 910729. Duración, desde 2011 hasta 2015. Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

4.- *Molecular astrophysics the Herschel-Alma*. Consolider-Ingenio. Convocatoria: CSD2009-00038GR35/10-A. Investigador responsable: José Cernicharo Quintanilla

AVISO IMPORTANTE

En virtud del artículo 11 de la convocatoria **NO SE ACEPTARÁ NI SERÁ SUBSANABLE EL CURRÍCULUM ABREVIADO** que no se presente en este formato.

Fecha del CVA	2-04-2019
----------------------	-----------

Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre y apellidos	ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ		
DNI/NIE/pasaporte		Edad	
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	C-7578-2015	
	Código Orcid	0000-0002-0655-5782	

A.1. Situación profesional actual

Organismo	FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS, UCM		
Dpto./Centro	QUÍMICA FÍSICA		
Dirección	Ciudad Universitaria, Avda. Complutense, s/n, 28040-Madrid		
Teléfono	+34913944131	correo electrónico	junquera@ucm.es
Categoría profesional	CATEDRÁTICO DE UNIVERSIDAD Área: QUÍMICA FÍSICA	Fecha inicio	18-11-2014
Espec. cód. UNESCO	2307, 2406, 221004, 221005, 221016, 221019, 221030, 221032		
Palabras clave	Química Coloidal y Supramolecular, Terapia Génica, ácido nucleico, vector génico, DNA, siRNA, Lipoplejos, Transfección, Silenciamiento		

A.2. Formación académica (título, institución, fecha)

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciado en CC. Químicas	UCM	1988
Doctor en Ciencias Químicas	UCM	1992

A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica (véanse instrucciones)

Nº de Sexenios de Investigación: **4 (+1 solicitado)** Fecha Concesión último: **2012**
 Nº Tesis doctorales dirigidas (últimos 10 años): **5 (+1 en curso)**
 Publicaciones totales = **104** Publicaciones en el 1er cuartil (Q1) = **67**
 Citas totales = **1910** Citas (últimos 5 años, sin autocitas) = **105**
 Promedio citas (sin autocitas)/año = **64** Promedio citas/año (últimos 5 años) = **21**
 Índice h = **28** Índice h5 (últimos 5 años) = **6**

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM (máximo 3500 caracteres, incluyendo espacios en blanco)

Elena Junquera González es Catedrática de Química Física en el Departamento de Química Física de la Universidad Complutense de Madrid. Es co-fundadora y co-líder del Grupo de Química Coloidal y Supramolecular, reconocido por la CAM como Grupo Consolidado de Investigación UCM, con una trayectoria científica de más de 25 años involucrado en la caracterización de los sistemas coloidales y supramoleculares como vectores de sustratos de interés biológico. La Prof. Junquera obtuvo los Grados de Licenciado en 1988 (UCM, *Premio Extraordinario de Licenciatura*) y de Doctor en 1992 (UCM, *Premio Extraordinario de Doctorado*). Posteriormente, participó en dos estancias posdoctorales, la primera en 1994-95 en el Grupo de Carbohidratos del Instituto de Química Orgánica (CSIC, Madrid), trabajando en la caracterización de la interacción carbohidrato-carbohidrato en medios acuosos desde un punto de vista físico-químico mediante RMN, y la segunda en la Universidad de California Irvine (UCI) en 1997-98, participando en un proyecto sobre el plegamiento de láminas β proteicas (química péptidomimética) mediante técnicas avanzadas de RMN. Desde entonces, la Prof. Junquera ha iniciado y puesto a punto distintas líneas de investigación en su grupo, todas con una característica en común, un claro enfoque multidisciplinar de distintos problemas y fenómenos biofísicos y bioquímicos. En la actualidad, su línea de investigación más activa se centra en la búsqueda de vectores génicos no virales eficaces y seguros, con prestaciones mejoradas con respecto a los vectores virales y no virales existentes, un reto importante en el campo de la terapia génica. El laboratorio que lidera es referencia nacional e internacional en el campo de la caracterización biofísica de sistemas vehiculizadores de sustratos de interés biológico. Habida cuenta del marcado carácter multidisciplinar de sus líneas de investigación, la Prof.

Junquera ha establecido un completo engranaje de prestigiosas colaboraciones científicas, nacionales e internacionales, que abarcan la síntesis orgánica, la bioquímica y biología molecular y la física teórica. Ello, conjuntamente con su dilatada experiencia en el área de la química física y la biofísica, hacen de su línea de investigación una potente herramienta experimental y teórica en el campo de la terapia génica. Es coautora de más de 100 publicaciones con índices de impacto medio-altos, especialmente en su última etapa. La mayoría aparecen en revistas del primer cuartil (Q1) de su categoría (ordenadas por índice de impacto), y algunas en el primer decil (D1). Además, según la *Web of Knowledge*, sus trabajos suelen ser bastante citados, con un promedio unas 64 citaciones/año. Todo ello conduce a un *índice de Hirsch* de 28. Si sólo se analizan los últimos 5 años (2013-2018), período de rodaje de la línea de investigación relativa a la vectorización de ácidos nucleicos con fines terapéuticos, las estadísticas arrojan los siguientes resultados promedio: 21 citaciones/año, y un *índice H5* de 6.

Parte C. MÉRITOS MÁX RELEVANTES (ordenados por tipología)

C.1. Publicaciones

1. Martínez-Negro, M.; Guerrero-Martínez, A.; García-Río, L.; Domenech, O.; Aicart, E.; Tros de Ilarduya, C.; and Junquera, E. *Multidisciplinary Approach to the Transfection of Plasmid DNA by a Non-Viral Nanocarrier Based on a Gemini-Bolaamphiphilic Hybrid Lipid*, ACS OMEGA. **2018**, 3, 208-217. [Open Access \(IF pendiente de asignación\)](#)
2. Laura Gallego-Yerga, Juan M. Benito, Laura Blanco- Fernández, M. Martínez-Negro, Emilio Aicart, Elena Junquera, Carmen Ortiz Mellet, Conchita Tros de Ilarduya, and Jose M. García Fernández, *Plasmid-templated control of DNA-Cyclodextrin nanoparticles morphology through molecular vector design for effective gene delivery*, CHEMISTRY A-EUROPEAN JOURNAL, **2018**, 24, 1-12 [FI: 5,454](#)
3. Barrán-Berdón, Ana L.; Martínez-Negro, M.; García-Río, L.; Domènech, O.; Tros de Ilarduya, C.; Aicart, E.; Junquera, E., *Biophysical study of gene nanocarriers formed by anionic/zwitterionic mixed lipids and pillar[5]arene polycationic macrocycles*, Journal of Materials Chemistry B, **HOT PAPER 2017**, 5, 3122-3131. [FI: 4,872](#)
4. M. Martínez-Negro, K. Kumar, A. L. Barrán-Berdón, S. Datta, P. Kondaiah, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart, *Efficient cellular knockdown mediated by siRNA nanovectors of gemini cationic lipids having delocalizable headgroups and oligo-oxyethylene spacers*, ACS APPLIED MATERIALS & INTERFACES, **2016**, 8, 22113-22126. [FI: 7,145](#)
5. E. Junquera y E. Aicart, *Recent progress in gene therapy to deliver nucleic acids with multivalent cationic vectors*, ADV. COLLOID INTERFACE SCIENCE, **2016**, 233, 161-175. [FI: 7,813](#)
6. K. Kumar, A. L. Barrán-Berdón, S. Datta, M. Muñoz-Úbeda, C. Aicart-Ramos, P. Kondaiah, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart, *A delocalizable cationic headgroup together with an oligo-oxyethylene spacer in gemini cationic lipids improves their biological activity as vectors of plasmid DNA*, J. Mat. Chemistry B, **2015**, 3, 1495-1506. [FI: 6,626](#)
7. A. Barran-Berdón; B. Yélamos; L. García-Río; O. Domenech; E. Aicart; E. Junquera, *Polycationic Macrocylic Scaffolds as Potential Non-Viral Vectors of DNA: A Multidisciplinary Study*, ACS Applied Materials & Interfaces, **2015**, 7, 14404-14414. [FI: 7,145](#)
8. A.L. Barrán-Berdón, S. K. Misra, S. Datta, M. Muñoz-Úbeda, P. Kondaiah, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart, *Cationic gemini lipids containing polyoxyethylene spacers as improved transfecting agents of plasmid DNA in cancer cells*, J. MATERIALS CHEMISTRY B, **2014**, 2, 4640-4652. [FI: 6,626](#)
9. S. K. Misra, M. Muñoz-Úbeda, S. Datta, A. L. Barrán-Berdón, C. Aicart-Ramos, P. Castro-Hartmann, P. Kondaiah, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart, *Effects of a delocalizable cation on the headgroup of gemini lipids on the lipoplex-type nanoggregates directly formed from plasmid DNA*, BIOMACROMOLECULES, **2013**, 14, 3951-3963. [FI: 5,788.](#)
10. B. Dávila-Ibañez, V. Salgueirino, V. Martínez-Zorzano, R. Mariño-Fernández, A. García-Lorenzo, M. Maceira-Campos, M. Muñoz-Ubeda, E. Junquera, E. Aicart, J. Rivas, F. J. Rodríguez-Berrocal y J. L. Legido, *Magnetic silica nanoparticle cellular uptake and cytotoxicity regulated by electrostatic polyelectrolytes DNA loading at their surface*, ACS NANO, **2012**, 6, 747-759. [FI: 12,062.](#)

11. M. Muñoz-Úbeda, A. L. Barrán-Berdón, S. K. Mishra, C. Aicart-Ramos, M. B. Sierra, J. Biswas, P. Kondaiah, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart, *Why is less cationic lipid required to prepare lipoplexes from plasmid DNA than linear DNA in gene therapy?*, *J. AMER. CHEM. SOC.*, **2011**, 133, 18014-18017. **FI: 9,907.**

C.2. Proyectos. 25 Proyectos Financiados, IP en 6, colP en 7. Los más destacables de los últimos 10 años son:

1. **Referencia:** CTQ2015-65972R
Título: Macrociclos policatiónicos como vectores de ácidos nucleicos (pDNAs y siRNAs): un planteamiento pluridisciplinar en terapia génica
Entidad financiadora: MEC (convocatoria CTQ 2015)
Investigador principal: ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ (Univ. Complutense de Madrid)
Inicio: Enero 2016 **Finalización:** Diciembre 2018
Cuantía de la subvención: 74.000.- € **Tipo de participación:** IP
2. **Referencia:** CTQ2012-30821
Título: Nuevos vectores coloidales biocompatibles de compactación y transfección del DNA o siRNA: una aproximación multidisciplinar.
Entidad financiadora: MEC (convocatoria CTQ 2012)
Investigador principal: ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ (Univ. Complutense de Madrid)
Inicio: Enero 2013 **Finalización:** Diciembre 2015
Cuantía de la subvención: 81.000.- € **Tipo de participación:** IP
3. **Referencia:** CTQ2009-10002BQU
Título: Compactación del ADN mediante nanoagregados coloidales: lipoplejos y surfoplejos.
Entidad financiadora: MICINN (convocatoria CTQ 2009)
Investigador principal: ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ (Univ. Complutense de Madrid)
Inicio: Enero 2010 **Finalización:** Junio 2013
Cuantía de la subvención: 78.000.- € **Tipo de participación:** IP
4. **Referencia:** CTQ2009-ACI2009-0867
Título: Compactación de DNA/siRNA con nuevos lípidos gemini: Transfección de formulaciones en terapia génica.
Entidad financiadora: MICINN (convocatoria ACI COLABORA 2009)
Investigador principal: EMILIO AICART SOSPEDRA (Univ. Complutense de Madrid)
Inicio: Diciembre 2009 **Finalización:** Diciembre 2013
Cuantía de la subvención: 56.000.- € **Tipo de participación:** Investigador
5. **Referencia:** FIS2008-06197-C02-01
Título: Nanocompactación coloidal del ADN: una aproximación experimental y teórica.
Entidad financiadora: MICINN (convocatoria FIS 2008)
Investigador principal: ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ (Univ. Complutense de Madrid)
Inicio: Enero 2009 **Finalización:** Diciembre 2009
Cuantía de la subvención: 20.000.- € **Tipo de participación:** IP
6. **Referencia:** CTQ2005-01106BQU
Título: Auto-organización y reconocimiento molecular en nanoestructuras coloidales.
Entidad financiadora: MEC (convocatoria CTQ2005))
Investigador principal: ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ (Univ. Complutense de Madrid)
Inicio: Octubre 2005 **Finalización:** Abril 2009
Cuantía de la subvención: 85.300.- € **Tipo de participación:** IP

C.3. Contratos

1. **Generación y caracterización de nanopartículas lipídicas** (Art. 83 de la LOU).
Empresa/Administración financiadora: BIODAN Sciences **Cuantía:** 12222,22.- (+IVA)
Investigador responsable: ELENA JUNQUERA GONZALEZ y EMILIO AICART SOSPEDRA
Inicio: Abril de 2013 **Finalización:** Julio de 2013
2. **Determinación del Potencial Zeta en disoluciones de agua de mar** (Art. 83 de la LOU).
Empresa/Administración financiadora: VEOLIA WATER Solutions & Technologies
Investigador responsable: ELENA JUNQUERA GONZALEZ
Inicio: Junio de 2008 **Finalización:** Junio de 2009 **Cuantía:** 100 € por muestra (+IVA)

3. *Determinación del Potencial Zeta en disoluciones de agua de mar* (Art. 83 de la LOU).
Empresa/Administración financiadora: VEOLIA WATER Solutions & Technologies
Investigador responsable: EMILIO AICART SOSPEDRA
Inicio: Junio de 2006 *Finalización:* Sept. de 2006 *Cuántía:* 100 € por muestra (+IVA)

C.4. Patentes

E. Junquera, M. Ruiz, S. López y E. Aicart, *N. de solicitud:* P200101592, España
Título: Técnica y un método para la medida continua, simultánea y automática de la velocidad del sonido y la densidad en líquidos y disoluciones.
Fecha de prioridad: 6-7-2001; *Fecha de concesión:* 15-6-2006
Entidad titular: Univ. Complutense de Madrid / Univ. Politécnica de Madrid

C.5. Estancias de Investigación

CLAVE: D = doctorado, P = postdoctoral, I = invitado, C = contratado, O = otras

1. University of Saskatchewan, Saskatoon (Canada), 1990, 26 semanas (D,C)
2. Grupo de Carbohidratos, IQO-CSIC (Madrid), 1994-95, 56 semanas (P)
3. University of California, Irvine (CA, USA), 1997-98, 30 semanas (P)

C.6. Dirección de Trabajos de Investigación

- Dirección de 5 tesis doctorales + 1 en curso
- Dirección de 14 Tesis de Licenciatura y Proyectos Fin de Carrera
- Dirección de 3 Diplomas de Estudios Avanzados (DEA)
- Dirección de 13 estancias de Investigación de Profesores e Investigadores nacionales y extranjeros en mi laboratorio de Investigación.

C.7. Gestión de Actividad Científica

- Tesorera del Grupo Especializado de Coloides e Interfases, 2006-2015.
- Miembro del Comité Científico del III Reunión Ibérica de Coloides e Interfases (RICI3) y VIII Reunión del Grupo Especializado de Coloides e Interfases (GECI), 2009.
- Miembro del Comité Organizador del 4th International Colloids Conference, 2014.

C.8. Evaluador de Agencias de Calidad y Revistas Internacionales

- Evaluador de la ANEP *Fecha:* 2007-cont
- Evaluador de la ISF (Israel Science Foundation) *Fecha:* 2007-cont
- Evaluador de la Dirección Xeral Investigación (Galicia) *Fecha:* 2006-cont
- Evaluador de la Agencia para la Calidad del Sistema Universitario de Castilla y León *Fecha:* 2008-cont
- Evaluador de la Agencia Andaluza de Evaluación de la Calidad y Acreditación Universitaria *Fecha:* 2009-cont
- Evaluador de MICINN *Fecha:* 2010-cont
- Panel de Expertos MICINN *Fecha:* 2010-2011, 2015-2017
- Censor de 15 revistas internacionales indexadas (JCR) (*Physical Chemistry, Biophysics, Colloidal Chemistry, Supramolecular Chemistry, Medicinal and Pharm. Chem*) *Fecha:* 1995-cont

C.9. Otros

- 103 publicaciones científicas en revistas de factor de impacto medio-alto.
- Aprox. 100 Comunicaciones a Congresos (conferencias, pósters y presentaciones orales).
- 25 proyectos nacionales o autonómicos de investigación (11 como IP o colP)
- Traductor para Editorial Elzaburu de 66 patentes de Química Coloidal y Polimérica (2000-2005).
- Premio Extraordinario Licenciatura (1988) y Premio Extraordinario Doctorado (1992)
- Red Europea de Microencapsulación de Fármacos, ERB-BRRT-CT98-5100, 1999-2002
- Conferencia Invitada en la "Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales". *Glosa del Premio Nobel de Química 2017*, 14 de Marzo de 2018.

Part A. PERSONAL INFORMATION		CV date	11/04/2019
First and Family name	Emilio Martínez Núñez		
Social Security, Passport, ID number		Age	
Researcher numbers	Researcher ID	A-7790-2010	
	Orcid code	0000-0001-6221-4977	

A.1. Current position

Name of University/Institution	Universidade de Santiago de Compostela		
Department	Química Física/Facultade de Química		
Address and Country	Avda. das Ciencias s/n, 15782		
Phone number	881814216	E-mail	emilio.nunez@usc.es
Current position	Profesor Titular	From	13/12/2007
Espec. cód. UNESCO	2210 2210.91		
Keywords	Chemical Reaction Dynamics, Kinetics, Methods, Software		

A.2. Education

PhD	University	Year
Graduated in Chemistry	Santiago de Compostela	1994
PhD in Chemistry	Santiago de Compostela	1999

A.3. JCR articles, h Index, theses supervised...

3 "sexenios" (Last one: 2009-2014).

2 PhD Theses supervised in the last 10 years (defended in 2011 and 2014).

Total number of citations: 1461; average citations/year (in the period 2014-2018): 103.

Number of citations of the 2 methodological papers (7 and 8 below), published in 2015: 80 (45+35)

Publications in Q1 journals: over 60

H index: 21.

(from Scopus)

Part B. CV SUMMARY (max. 3500 characters, including spaces)

As a PhD student (1994-1999) EMN becomes familiar with classical trajectory techniques, RRKM/TST theories and Monte Carlo methods.

From September 1999 to December 2000, he did a postdoc with Prof. Varandas (Portugal) on the development of highly accurate potential energy surfaces.

In 2001, he took up an associate professorship at UVigo where he collaborated with Prof. Flores on dynamics of reactions of atmospheric interest. At the end of 2001 he obtained a RyC research position at USC. In that period (2001-2006) he worked on photodissociation dynamics, implementation of semiclassical methods for rate constant calculations, and collision-induced dissociation dynamics.

In October 2006, he got the tenure as "Profesor contratado doctor" at USC. In January 2007, he obtained the "Habilitacion" for "Profesor Titular" in the area of Physical Chemistry, and since December of that year he is "Profesor Titular" at USC. In December 2015, he obtained the Accreditation for Full Professor.

He visited different research labs (1-3 months each):

-Lille; 2018; Visiting Professor; funding: CNRS; Theme: Extension of tsscds for the study of intermolecular interactions.

-Leeds; 2007; funding: Xunta de Galicia; Leeds; 2013; Visiting Professor; funding: "Leverhulme Trust"; theme: development of accelerated dynamics methods.

-Pisa; 2005; funding: Xunta de Galicia; theme: application of surface-hopping techniques for the study of non-adiabatic dynamics.

-Texas Tech; 2005; funding: Prof. Hase project; theme: Development and application of methods for the study of gas-surface dynamics.

He has delivered around 20 invited lectures and oral contributions in various conferences, as well as a number of invited talks in different universities. He has organized a first hands-on workshop at CESGA in February of this year on the use of tsscads. He was also invited to introduce the method and to organize hands-on tutorials at the Universidad de Valladolid, Autónoma de Madrid, Autónoma de Barcelona and University of Vienna.

EMN has a significant number of national and foreign collaborations: <http://webspersoais.usc.es/persoais/emilio.nunez/collaborations.html>.

He has been co-supervisor of three PhD students, one of whom (APG) was awarded for the best PhD thesis in Chemistry in the USC, and is now "Profesor Titular" at UVigo. Another student (JJNP) has been a Marie Curie postdoctoral fellow at the Institute of Theoretical Chemistry in Vienna and recently got a tenure-track position at the Australian National University.

He has been member of 15 research projects (2 as PI). Of significance, one of the projects led by EMN resulted in an important number of collaborations, papers, citations and a PhD student was hired (JJNP) thanks to that grant. The other one was associated to the RyC research position.

He has been involved in the organization of several scientific events such as a COST MOLIM action workshop, a CECAM workshop, ESPA, IBER or WATOC. He has been Secretary of the Atomic and Molecular Physics Group (GEFAM) since 2013-2017, and is in the management committee of the Chemistry and Computing Group (GEQC) since 2018.

Recently he has developed tsscads for the automatic discovery of reaction mechanisms, where different algorithms developed during his research career are integrated. The future plan is to improve this method with a clear aim of studying organometallic catalysis and systems of biological interest (<http://forge.cesga.es/wiki/g/tsscads/HomePage>).

Part C. RELEVANT MERITS

C.1. Publications (including books)

1. A. Rodríguez, R. Rodríguez-Fernández, S.A. Vázquez, G.L. Barnes, J.J.P. Stewart, E Martínez-Núñez

tsscads2018: a code for automated discovery of chemical reaction mechanisms and solving the kinetics

JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY **2018**, 39, 1922-1930

2. M. J. Wilhelm, E Martínez-Núñez, J. González-Vázquez, S. A. Vázquez, J. M. Smith, H.-L. Dai

Is photolytic production a viable source of HCN and HNC in astrophysical environments? A laboratory based feasibility study of methyl cyanofornate

THE ASTROPHYSICS JOURNAL **2017**, 849, 13

3. J. A. Varela, S. A. Vázquez, E Martínez-Núñez

An automated Method to Find Reaction Mechanisms and Solve the Kinetics in Organometallic Catalysis

CHEMICAL SCIENCE **2017**, 8, 3843-3851.

4. R Rodríguez-Fernández, F B. Pereira, J. M. C. Marques, E. Martínez-Núñez and S. A. Vázquez

GAFit: a general-purpose, user-friendly program for fitting potential energy surfaces based on genetic algorithms

COMPUTER PHYSICS COMMUNICATIONS **2017**, 217, 89-98

5. W. Siebrand, Z. Smedarchina, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos

Methanol dimer formation drastically enhances hydrogen abstraction from methanol by OH at low temperature

PHYSICAL CHEMISTRY AND CHEMICAL PHYSICS **2016**, 18, 22712-22718

6. F. Cambeiro, E Martínez-Núñez, J. A. Varela, C. Saa

DFT and Kinetic Monte Carlo Study of TMS-Substituted Ruthenium Vinyl Carbenes: Key Intermediates for Stereoselective Cyclizations

ACS CATALYSIS **2015**, 5, 6255-6262

7. E. Martínez-Núñez

An Automated transition state search using classical trajectories initialized at multiple minima
PHYSICAL CHEMISTRY AND CHEMICAL PHYSICS **2015**, 17, 14912-14921

8. E. Martínez-Núñez

An Automated Method to Find Transition States Using Accelerated Dynamics Simulations
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY **2015**, 36, 222-234

9. J. Booth, S. Vázquez, E. Martínez-Núñez, A. Marks, J. Rodgers, D.R. Glowacki, and D. V. Shalashilin

Recent applications of Boxed Molecular Dynamics: a simple multiscale technique for atomistic simulations
PHILOSOPHICAL TRANSACTIONS OF THE ROYAL SOCIETY A **2014**, 372, 20130384

10. E. Martínez-Núñez, D. Shalashilin

Acceleration of classical mechanics by phase space constraints
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION **2006**, 2, 912-919

C.2. Research projects and grants

1. “*Simulaciones dinámicas de la transferencia de energía y descomposición unimolecular en disociaciones inducidas por colisiones y superficies*”. Funding body: Ministerio de Educación y Ciencia. Period: 2006-2009. PI: Emilio Martínez Núñez. Amount: 96800 €

2. “*Dinámica clásica, semiclásica y cuántica de sistemas reactivos*”. Funding body: Ministerio de Ciencia y Tecnología (RyC project). Period: 2001-2002. PI: Emilio Martínez Núñez. Amount: 6000 €

3. “*Simulación del proceso de combustión de bioalcoholes*”. Funding body: MINECO. Period: 2015-2017. PI: Antonio Fernández Ramos. Amount: 87120 €

4. “*Estudio teórico mediante métodos semiclásicos de procesos de transferencia protónica en zeolitas*”. Funding body: Xunta de Galicia. Period: 2010-2013. PI: Antonio Fernández Ramos. Amount: 44965 €

5. “*Simulaciones de la dinámica de collision y adsorción de péptidos sobre superficies monocapa auto-organizadas*”. Funding body: Ministerio de Ciencia e Innovación. Period: 2009-2012. PI: Saulo A. Vázquez. Amount: 60500 €

6. “*Chemical Dynamics Simulations: Computer Software Development and Applications in Material Science and Atmospheric Chemistry*”. Funding institution: National Science Foundation. (EE.UU.). Period: 2008-2012. PI: William L. Hase. Amount: 500000 \$/año

7. “*Simulacions do proceso de “soft-landing” de ións e péptidos sobre superficies monocapa auto-organizadas*”. Funding body: Xunta de Galicia. Period: 2007-2010. PI: Saulo A. Vázquez. Amount: 70265 €

C.3 Software development

tsscads2018 (<http://forge.cesga.es/wiki/g/tsscads/HomePage>)

GAFit (<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465517300607>)

AutoMeKin (<http://rxnkin.usc.es/amk/index1.php>)

C.4. Training of PhD students

2 PhD theses supervised in the last 10 years (3 in total).

Angeles Peña Gallego. PhD in 2002

We have co-authored 13 research papers. APG is now “Profesor Titular” at UVIGO.

Juan José Nogueira Pérez. PhD in 2011

We have co-authored 8 research papers. JJNP was Marie Curie postdoc in the Institute of Theoretical Chemistry (University of Vienna). He has recently taken up a tenure track position at the Australian National University in Canberra. Over the last years JJNP has published an important number of papers in high-profile journals:

(<https://scholar.google.at/citations?user=LmV8Z6cAAAAJ&hl=es>)

Roberto Rodríguez Fernández. PhD in 2014

We have co-authored 5 research papers. RRF is an experienced programmer, which led him to write GAFit package for fitting potential energy surfaces during his PhD. RRF still collaborates with the group, a task shared with his job as civil servant.

C.5 Talks (most important in the last years)

Title: A new method for automated discovery of reaction mechanisms and kinetics

Conference: SDMC 2019

Place: Koti Resorts (India)

Dates: 21-24 February 2019

Title: Using chemical dynamics simulations to discover reaction mechanisms and solve the kinetics in reactive systems

Conference: Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics

Place: Barcelona

Dates: 12-14 September 2017

Title: Methanol dimer formation drastically enhances hydrogen abstraction from methanol by OH at low temperature

Conference: XIV International Workshop on Quantum Reactive Scattering

Place: Trieste (Italy)

Dates: 3-6 July 2017

Title: Using Chemical Dynamics Simulations to Discover Reaction Mechanisms and Solve the Kinetics in Reactive Systems

Conference: International Workshop on Molecular Quantum Dynamics and Kinetics

Place: ETH Zurich

Dates: 18-20 April 2017

Title: An automated method to map potential energy surfaces

Conference: 9th International Meeting on Photodynamics and Related Aspects

Place: Mendoza (Argentina)

Dates: 9-13 May 2016

C.6 Organization of workshops and conferences (last years)

-MOLIM Workshop on Intermolecular Interactions (2017):

<http://www.usc.es/en/congresos/molim>

-Theoretical and Computational Studies of Non-Equilibrium and Non-Statistical Dynamics in Gas-Phase, Condensed-Phase, and Interfacial Reactions (2016):

<https://www.cecarn.org/workshop-1241.html>

-Scientific Committee of IBER2015 (<http://iber2015.web.ua.pt/comitees.html>)

-C.7 Guest editor

Guest editor of the theme issue entitled "Theoretical and computational studies of non-equilibrium and non-statistical dynamics in the gas phase, in the condensed phase and at interfaces" published in Philosophical transactions of royal society A

(<http://rsta.royalsocietypublishing.org/content/375/2092>)

C.8 Participation in COST actions (last years)

Our astrochemical history (<http://cost.obs.ujf-grenoble.fr/>)

MOLIM (<http://cost-molim.eu/>)

XLIC (www.xlic.eu)

Plantilla CURRICULUM VITAE

Marta Menéndez Carbajosa
Departamento de Química Física

Fecha	21 de febrero de 2019
--------------	-----------------------

Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre y apellidos	MARTA MENENDEZ CARBAJOSA		
DNI/NIE/pasaporte		Edad	
Núm. identificación del investigador	Researcher ID		
	Código ORCID		

Si no tiene Researcher ID o código ORCID, no rellene estos apartados.

A.1. Situación profesional actual

Organismo	UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID		
Dpto./Centro	DPTO. QUIMICA FISICA I/FACULTAD DE CC. QUÍMICAS		
Dirección	CIUDAD UNIVERSITARIA s/n		
Teléfono	913944985	e-mail:	menendez@quim.ucm.es
Categoría profesional	Profesor Titular	Desde	11/02/2002
Espec. cód. UNESCO			
Palabras clave	Dinámica Molecular de reacciones. Haces moleculares y láseres. Espectroscopia. Estereoquímica.		

A.2. Formación académica (título, institución, fecha)

Título	Universidad	Año
LIC. CIENCIAS QUÍMICAS	COMPLUTENSE DE MADRID	1986
Dr. CIENCIAS QUÍMICAS	COMPLUTENSE DE MADRID	1992

A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica

Cuatro (4) sexenios de investigación (fecha del último sexenio concedido: 2014)
Citas totales: 549 Índice h: 20
Publicaciones totales: 53

A4. Indicadores académicos generales.

4.1. *Quinquenios Docentes: (indicando los periodos evaluados)*

5 evaluaciones positivas: 1992-1997, 1997-2002, 2002-2017, 2007-2012, 2012-2017

4.2. *Resultado de la Evaluación Docente (programa DOCENTIA o similar, indicando su modalidad) en asignaturas del Grado en Química*

Programa Docentia (voluntario)

Evaluación favorable en las siguientes asignaturas:

Química Física I. Titulación: Grado en Química (curso 2014-15)

Programa Docentia-UCM (obligatorio)

Evaluación favorable correspondiente a los cursos 2015-16, 2016-17 y 2017-18.

4.3. *Número y Diversidad de asignaturas impartidas en el **Grado en Química** (nombre de la asignatura, cursos en que se ha impartido, tipo de actividad: teoría, laboratorio, coordinador, etc.).*

Química Física I (curso 2º, obligatoria): cursos 2009-10, 2010-11, 2011-12, 2012-13, 2013-14, 2014-15, 2015-16, 2016-17, 2017-18, 2018-19 (profesor de teoría, seminarios, tutorías y prácticas de laboratorio).

Química Física II (curso 3º, obligatoria): curso 2018-19 (profesor de prácticas de laboratorio).

Métodos Espectroscópicos (curso 4º, optativa): cursos 2013-14, 2014-15, 2015-16, 2016-17, 2017-18, 2018-19 (profesor de prácticas de laboratorio).

Prácticas en Empresa (curso 4º; optativa): tutor académico de estudiantes desde el curso 2013-14 al 2018-19 (3 estudiantes). Miembro de una comisión evaluadora en el curso 2017-18.

Trabajo Fin de Grado (curso 4º; obligatoria): tutor académico desde el curso 2011-12 al 2017-18 (3 estudiantes). Miembro de una comisión evaluadora en el curso 2012-13.

4.4. Puestos de Gestión ocupados (incluyendo los relacionados con el Grado en Química).

1. Coordinador general de los laboratorios del Departamento de Química Física desde el curso 2010-2011 hasta el curso 2017-2018.
2. Coordinador de los laboratorios de las asignaturas: Introducción a las técnicas experimentales, 2º curso, Licenciatura en Química (cursos 2010-11, 2011-12, 2012-13, 2013-14); Experimentación Química, 4º curso, Licenciatura en Química (cursos 2010-11, 2011-12, 2012-13, 2013-14); Métodos Espectroscópicos, 4º curso, Grado en Química (cursos 2013-14, 2014-15, 2015-16, 2016-17, 2017-18, 2018-19).

4.5. Otros méritos relacionados con la actividad docente (referidos al periodo de impartición del Grado en Química desde 2009-10)

1. Proyectos de innovación docente/mejora de la calidad educativa:

Proyecto de innovación Innova-Docencia. Título: Laboratorio integrado de prácticas de simulación de fundamentos de procesos químicos con fluidos supercríticos. Convocatoria 2017-2018. Referencia: 242

2. Participación en actividades de divulgación:

XII Semana de la Ciencia. Madrid: 7-8 noviembre 2012. "Ven a descubrir la Química Física que hay detrás de tus objetos cotidianos".

3. Participación en Comisiones que tengan implicación en el Grado en Química o en aspectos docentes:

Miembro de la comisión de planificación y gestión de los laboratorios impartidos en la Facultad de Química, correspondientes a los grados en Química, Ingeniería Química y Bioquímica, desde el curso 2010-11 al 2017-18.

4. Elaboración de material docente:

Participación en la elaboración de las guías docentes de las siguientes asignaturas del Grado en Química: Química Física I, 2º curso; Química Física II, 3º curso; Métodos Espectroscópicos, 4º curso.

Participación en la puesta a punto y en la elaboración de los guiones de las prácticas de la asignatura Química Física I: prácticas 4, 5, 6 y 11, 2º curso, Grado en Química.

Puesta a punto y elaboración de los guiones de las prácticas de la asignatura Métodos Espectroscópicos, 4º curso, Grado en Química.

5. Otros:

Curso obligatorio de Prevención de Riesgos Laborales, impartido por el Servicio de Prevención de Riesgos Laborales de la Universidad Complutense de Madrid, en la Escuela de Medicina del Trabajo de la Facultad de Medicina, con una duración de 50 horas. Curso 2014-2015.

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

1. Situaciones profesionales anteriores:

1. Becaria predoctoral de la CAICYT, y Complutense Predoctoral en España (1987-1992).
2. Becaria Postdoctoral en Alemania, MEC y UE (1993-1995).
3. Profesor Ayudante LRU de Facultad. Departamento de Química Física de la Facultad de Ciencias de la Universidad Complutense, del 17/07/1992 a 16/07/1997.

4. Profesor Asociado tipo II. Departamento de Química Física de la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense, del 17/07/1997 a 10/02/2002.
2. Estancias postdoctorales: Fakultät für Physik der Universität Bielefeld, Bielefeld. Alemania. Tema: Dispersión reactiva de moléculas orientadas (1993-1995 y 02/10/1998 a 22/12/1998)
3. Proyectos: Participación con dedicación completa en 28 proyectos de investigación competitivos, nacionales y europeos. Uno de ellos Consolider Ingenio 2010.
4. Publicaciones y Congresos: 53 artículos publicados en revistas científicas internacionales, la gran mayoría del cuartil Q1, y mas de medio centenar de participaciones en Congresos Internacionales.
5. Líneas de investigación: Dinámica de procesos moleculares. Experimentos con haces moleculares y láseres. Estudio de procesos de fotodisociación, reacciones elementales y transferencia de energía en fase gaseosa: experimentos con ionización multifotónica. Cálculos teóricos de la dinámica de colisiones reactivas e inelásticas mediante métodos cuánticos y cuasiclásicos.

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (ordenados por tipología; referidos al período de vigencia del Grado en Química, desde el curso 2009-10)

C.1. Publicaciones (incluya una reseña completa de las 5-10 publicaciones más relevantes).

1. P. G. Jambrina, M. Menéndez, F. J. Aoiz. Angular momentum-scattering angle quantum correlation: a generalized deflection function. *Chemical Science*, **9**, 4837 (2018).
2. P. G. Jambrina, M. Menéndez, A. Zanchet, E. García, F. J. Aoiz. Lambda-doublet propensities for reactions on competing A' and A'' potential energy surfaces: O(³P)+N₂ and O(³P)+ Cl. *J. Phys. Chem. A*, **122**, 2739 (2018).
3. P. G. Jambrina, M. Menéndez, and F. J. Aoiz. The dynamics of the Hg+Br₂ reaction. Simulation of the results in the laboratory frame. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **19**, 16433-16445 (2017)
4. M. Sneha, and R. N. Zare, P. G. Jambrina, M. Menéndez, and F. J. Aoiz. Multiple Scattering Mechanisms Causing Interference Effects in the Differential Cross Sections of H+D₂→HD(v'=4, j')+D at the Collision Energy of 3.26 eV. *J. Chem. Phys.*, **145**, 024308 (1-9), (2016).
5. M. Menéndez, J. F. Castillo, B. Martínez-Haya, F. J. Aoiz. The Cl+O₃ reaction: a detailed QCT simulation of molecular beam experiments. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **17**, 25471 (2015).
6. D Herráez-Aguilar, P. G. Jambrina, M. Menéndez, J. Aldegunde, R. Warmbier and F. J Aoiz. The effect of the reactant internal excitation on the dynamics of the C⁺+H₂ reaction. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **16**, 24800-24812 (2014)
7. R. Pérez de Tudela, Y. V. Suleimanov, M. Menéndez, J. F. Castillo, and F. J Aoiz. A ring polymer molecular dynamics study of the Cl+O₃ reaction. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **16**, 2920-2927 (2014).
8. J. Klos, F. J. Aoiz, M. Menendez, M. Brouard, H. Chadwick, and C. Eyles. Ab Initio studies of the interaction potential for the Xe-NO(X²Π) van der Waals complex: Bound states and fully quantum and quasi-classical scattering Theoretical studies of bound states and scattering of Xe atoms with NO radical. *J. Chem. Phys.*, **137**, 014312 (2012).
9. P. Bargeño, P. G. Jambrina, J. M. Alvariño, M. Menéndez, E. Verdasco, M. Hankel, S.C. Smith, F. J. Aoiz and T. González-Lezana. Energy dependent dynamics of the O(1D)+HCl reaction. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **13**, 8502-8514 (2011)
10. P. Bargeño, P. G. Jambrina, J. M. Alvariño, M. L. Hernández, F. J. Aoiz, M. Menéndez, E. Verdasco and T. González-Lezana. The dynamics of the O(1D)+HCl→OH+Cl reaction at 0.26 eV collision energy: A comparison between theory and experiment. *J. Phys. Chem. A*, **113**, 14237 (2009).

C.2. Participación en proyectos de I+D+i

1. *Estudio de procesos moleculares fotoinducidos y colisionales por medio de experimentos con láseres y métodos teóricos.* Agencia Estatal de Investigación. Ministerio de Economía, Industria y Competitividad. Proyecto CTQ2015-65033-P. Investigador principal IP1: Francisco Javier Aoiz Molerés. Duración: 2016-2018. Financiación: 223.400 €
2. *Dinámica de procesos moleculares con láser y métodos teóricos.* Subdirección General de Proyectos de Investigación. Ministerio de Ciencia e Innovación. Proyecto CTQ2012-37404-C02-01. Investigador principal: Francisco Javier Aoiz Molerés. Duración: 2013-2015. Financiación: 217.000 €
3. *Dinámica de procesos químicos: Experimentos fotoiniciados con láseres de nanosegundo y femtosegundo y métodos teóricos.* Subdirección General de Proyectos de Investigación. Ministerio de Ciencia e Innovación. Proyecto CTQ2008-02578/BQU. Investigador principal: Francisco Javier Aoiz Molerés. Duración: 2009-2013. Financiación: 408.000 €
4. *Molecular Astrophysics: The Herschel and Alma era.* CDS2009-00038. Proyecto Consolider-Ingenio 2010. Ministerio de Ciencia e Innovación. Coordinador del Proyecto: José Cernicharo Quintanilla (CSIC-CAB); Coordinador UCM: Francisco Javier Aoiz Molerés. Duración: 2009-2014. Financiación: 4.000.000 €
5. *Estudio de la dinámica molecular de procesos químicos mediante técnicas láser de nanosegundo y femtosegundo y métodos teóricos.* Dirección General de Investigación. M.E.C. Proyecto CTQ2005-08493-C02-01. Investigador principal: Luis Bañares Morcillo. Duración: 2006-2008. Financiación: 160.000 €
6. *Experimental and Theoretical Studies on the Dynamics of Reactions of Atoms and Radicals of Fundamental and Practical Importance.* Research Training Network of the EC. Project HPRN-CT-1999-00007. Investigador principal: Francisco Javier Aoiz Molerés. Duración: 2009-2013. Financiación: 1.499.000 €
7. *Der reaktive Stoßprozeß $\text{Li}+\text{HF}(\nu, j)\rightarrow\text{LiF}+\text{H}$.* Proyecto SFB 216 P5. Deutsche Forschungsgemeinschaft. Investigador principal: Hans Jürgen Loesch. Duración: 1993-1995
8. *Reactive scattering from oriented molecules.* Proyecto ERBCHBICT930276. C.E.E. Investigador principal: Marta Menéndez: 1993-1995

C.5. Dirección de trabajos, distintos a los incluidos en el apartado A.3 (Tesinas, DEAs, TFM, TFG, Proyectos...; totales desde el curso 2009-10)

Supervisor de estudiantes de Licenciatura, de Grado y de Master.
Proyectos de Fin de Carrera: 3
TFG: 3
Prácticas en Empresas: 3
Proyectos: 4
Becas de excelencia: 1

C.6. Comités Organizadores y Comités Científicos.

1. Secretaria del Congreso XVIII International Conference on Molecular Energy Transfer, celebrado en San Lorenzo de El Escorial, Madrid, España (15 al 20 de junio de 2003).
2. Secretaria del Congreso International Complutense Seminar on Quantum Reactive Scattering, celebrado en San Lorenzo de El Escorial, Madrid, España (20 al 23 de junio de 2003).
3. Secretaria del Congreso XIII International Symposium on Molecular Beams, celebrado en El Escorial, Madrid, España (2 al 7 de junio de 1991).
4. Miembro del Comité Local organizador de OPTOLEC, I Exhibition and Congress on Laser and Electro-Optics, celebrado en Madrid, España (17 al 19 de septiembre de 1990).
5. Secretaria del Curso de Verano Láseres y Reacciones Químicas, organizado por la Universidad Complutense de Madrid, celebrado en Aguadulce, Almería, España (13 al 18 de agosto de 1990)



María de la Merced Novo Rodríguez

Generado desde: Editor CVN de FECYT

Fecha del documento: 17/01/2019

v 1.4.0

db2f744ca484832b2c7d7b21bb6d0b3f

Este fichero electrónico (PDF) contiene incrustada la tecnología CVN (CVN-XML). La tecnología CVN de este fichero permite exportar e importar los datos curriculares desde y hacia cualquier base de datos compatible. Listado de Bases de Datos adaptadas disponible en <http://cvn.fecyt.es/>



C
V
n

CURRÍCULUM VITAE NORMALIZADO

db2f744ca484832b2c7d7b21bb6d0b3f

Indicadores generales de calidad de la producción científica

Descripción breve de los principales indicadores de calidad de la producción científica (sexenios de investigación, tesis doctorales dirigidas, citas totales, publicaciones en primer cuartil (Q1), índice h...). Incluye también otros aspectos o peculiaridades importantes.

Número de artículos publicados con datos de citas: 32
Número de citas totales: 873
Promedio de citas por artículo: 27,28
(15/01/2019, Thomson Reuters ReasearchID)

**María de la Merced Novo Rodríguez**

Apellidos: **Novo Rodríguez**
 Nombre: **María de la Merced**
 DNI:
 Fecha de nacimiento:
 Sexo:
 Nacionalidad:
 País de nacimiento:
 C. Autón./Reg. de nacimiento:
 Provincia de contacto:
 Ciudad de nacimiento:
 Dirección de contacto:
 Resto de dirección contacto:
 Código postal:
 País de contacto:
 C. Autón./Reg. de contacto:
 Ciudad de contacto:
 Teléfono fijo:
 Fax:
 Correo electrónico:
 Teléfono móvil:
 Página web personal:

Situación profesional actual**Entidad empleadora:** Universidad de Santiago de Compostela**Departamento:** Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias**Categoría profesional:** Profesor Titular de **Gestión docente (Sí/No):** Si
Universidad**Fecha de inicio:** 27/11/1998**Modalidad de contrato:** Funcionario/a **Régimen de dedicación:** Tiempo completo**Funciones desempeñadas:** Estudio estructural y dinámico de medios organizados mediante sondas fluorescentes. Dinámica de reacciones químicas mediante espectroscopia de correlación de fluorescencia y detección de moléculas individuales. Desarrollo de métodos de análisis de datos.**Identificar palabras clave:** Fluorescencia inducida por láser; Interacciones macromoléculaligando; Espectroscopía de sistemas biológicos; Coloides; Micelas; Fluorescencia**Ámbito actividad de gestión:** Universitaria**Cargos y actividades desempeñados con anterioridad**

	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
1	Universidad de Santiago de Compostela	Profesor Titular Interino de Universidade	08/10/1996
2	Medizinisches Laserzentrum Lübeck	Investigador (categoría BAT II)	15/10/1995



	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
3	Universidad de Santiago de Compostela	Axudante de Universidade e E.T.S.	31/01/1992
4	Universidad de Santiago de Compostela	Profesor Titular de Universidad	27/11/1998

1 Entidad empleadora: Universidad de Santiago de Compostela Tipo de entidad: Universidad de Compostela

Categoría profesional: Profesor Titular Interino de Universidade

Fecha de inicio-fin: 08/10/1996 - 26/11/1998

2 Entidad empleadora: Medizinisches Laserzentrum Lübeck Tipo de entidad: Organismo Público de Investigación

Categoría profesional: Investigador (categoría BAT II)

Fecha de inicio-fin: 15/10/1995 - 30/09/1996

3 Entidad empleadora: Universidad de Santiago de Compostela Tipo de entidad: Universidad de Compostela

Categoría profesional: Axudante de Universidade e E.T.S.

Fecha de inicio-fin: 31/01/1992 - 10/10/1995

4 Entidad empleadora: Universidad de Santiago de Compostela Tipo de entidad: Universidad de Compostela

Categoría profesional: Profesor Titular de Universidad

Fecha de inicio: 27/11/1998



Formación académica recibida

Titulación universitaria

Estudios de 1º y 2º ciclo, y antiguos ciclos (Licenciados, Diplomados, Ingenieros Superiores, Ingenieros Técnicos, Arquitectos)

Titulación universitaria: Titulado Superior

Nombre del título: Licenciado en Ciencias Químicas

Entidad de titulación: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad

Fecha de titulación: 21/09/1987

Doctorados

Programa de doctorado: Ciencias Químicas

Entidad de titulación: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad

Fecha de titulación: 25/11/1991

Entidad de titulación DEA: Universidad de Santiago de Compostela

Título de la tesis: Procesos de Transferencia Protónica Fotoinducida en 2-Piridilbencimidazoles

Director/a de tesis: María Flor Rodríguez Prieto

Codirector/a de tesis: 1

Calificación obtenida: Apto cum laude

Premio extraordinario doctor: Si

Fecha de obtención: 18/05/1993

Conocimiento de idiomas

Idioma	Comprensión auditiva	Comprensión de lectura	Interacción oral	Expresión oral	Expresión escrita
Alemán	C1	C1	C1	B2	B2
Inglés	C1	C1	C1	C1	C1
Gallego	C2	C2	C1	C1	C1

Actividad docente



Dirección de tesis doctorales y/o proyectos fin de carrera

- 1 Título del trabajo:** Estudio estructural y dinámico de procesos de asociación supramolecular
Codirector/a tesis: Mercedes Novo Rodríguez
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Lucas Piñeiro Maseda
Calificación obtenida: sobresaliente cum laude
Fecha de defensa: 02/10/2015
- 2 Título del trabajo:** Estudio de la asociación de sistemas supramoleculares mediante técnicas de fluorescencia: de ciclodextrinas a beta-amiloides
Codirector/a tesis: Wajih Al-Soufi
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Sonia Freire Rodríguez
Calificación obtenida: Sobresaliente cum laude
Fecha de defensa: 06/07/2015
- 3 Título del trabajo:** Single-Molecule Fluorescence studies of the dynamics in supramolecular systems of biological interest
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral
Codirector/a tesis: Wajih Al-Soufi
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Lugo, Galicia, España
Alumno/a: Jorge Bordello Malde
Calificación obtenida: Sobresaliente cum laude
Fecha de defensa: 25/11/2013
Doctorado Europeo: Si
Mención de calidad: Si
- 4 Título del trabajo:** Estudio estructural y dinámico de sistemas organizados mediante sondas fluorescentes
Codirector/a tesis: Wajih Al-Soufi
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Belén Reija Otero
Calificación obtenida: Sobresaliente cum laude
Fecha de defensa: 26/10/2007
Doctorado Europeo: Si
- 5 Título del trabajo:** Análisis avanzado de espectros electrónicos resueltos en el tiempo
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Belén Reija Otero
Calificación obtenida: Sobresaliente
Fecha de defensa: 20/06/2003



- 6** **Título del trabajo:** Estudio del comportamiento fotofísico del 2-toluidin-6-naftalensulfonato y de sus complejos de inclusión con beta-ciclodextrina
Tipo de proyecto: Tesina
Codirector/a tesis: Wajih Al-Soufi
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Ana Íñigo Espiga
Fecha de defensa: 1999

Publicaciones docentes o de carácter pedagógico, libros, artículos, etc.

- 1** Novo, Mercedes; Al-Soufi, Wajih. Cinética de reacciones complejas e mecanismos de reacción. Unidad Didáctica. Servizo de Publicacións e Intercambio Científico da USC, ISBN 978-84-9887-984-1
Nombre del material: Unidad Didáctica
Fecha de elaboración: 2012
Tipo de soporte: Libro
Autor de correspondencia: Si
- 2** Novo, Mercedes; Al-Soufi, Wajih. Cinética formal. Unidad Didáctica. Servizo de Publicacións e Intercambio Científico da USC, ISBN 978-84-9887-985-8
Nombre del material: Unidad Didáctica
Fecha de elaboración: 2012
Tipo de soporte: Libro
- 3** Novo, Mercedes; Reija, Belén; Al-Soufi, Wajih. Freezing point of milk: a natural way to understand colligative properties (link is external). Journal of Chemical Education. 84, pp. 1673 - 1675.
Nombre del material: Artículo docente
Fecha de elaboración: 2007
Tipo de soporte: Artículo/s
Autor de correspondencia: Si
- 4** María Flor Rodríguez Prieto; Mercedes Novo; J. A. Domínguez Herbón; Berta Fernández Rodríguez. Tautomerism - to be taken lightly. Education in Chemistry. 29, pp. 139 - 141.
Nombre del material: Artículo docente
Fecha de elaboración: 1992
Tipo de soporte: Artículo/s
Autor de correspondencia: No



Experiencia científica y tecnológica

Actividad científica o tecnológica

Proyectos de I+D+i financiados en convocatorias competitivas de Administraciones o entidades públicas y privadas

- 1 Nombre del proyecto:** Red de Ciencias y Materiales Moleculares
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Enrique Guitián Rivera
Nº de investigadores/as: 8
Entidad/es financiadora/s: Consellería de Cultura
Educación e Ordenación Universitaria
XUNTA DE GALICIA
Ciudad entidad financiadora: España
Cód. según financiadora: ED431D R2016/007
Fecha de inicio-fin: 01/01/2016 - 31/12/2018 **Duración:** 1 año - 11 meses - 30 días
Entidad/es participante/s: Universidade da Coruña; Universidade de Santiago de Compostela; Universidade de Vigo
Cuantía total: 120.000 €
- 2 Nombre del proyecto:** Ayudas para la consolidación y estructuración de unidades de investigación competitivas del sistema universitario de Galicia
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): M. Flor Rodríguez Prieto
Nº de investigadores/as: 7
Entidad/es financiadora/s: XUNTA DE GALICIA
Ciudad entidad financiadora: España
Cód. según financiadora: ED431B 2016/024
Fecha de inicio-fin: 2016 - 2018 **Duración:** 2 años - 7 meses
Entidad/es participante/s: Universidade de Santiago de Compostela
Cuantía total: 70.000 €
- 3 Nombre del proyecto:** UNION DE LIGANDOS PEQUEÑOS AL ADN: ESTUDIO DINAMICO, FOTOFISICO Y CONFORMACIONAL MEDIANTE ESPECTROSCOPIA DE FLUORESCENCIA DE MOLECULAS INDIVIDUALES Y RESUELTA EN EL TIEMPO
Grado de contribución: Coordinador del proyecto total, red o consorcio
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Lugo, Galicia, España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Al-Soufi, Wajih; Mosquera, Manuel



Nº de investigadores/as: 6

Tipo de participación: Investigador principal

Nombre del programa: PROYECTOS DE I+D+I, DEL PROGRAMA ESTATAL DE INVESTIGACIÓN, DESARROLLO E INNOVACIÓN ORIENTADA A LOS RETOS DE LA SOCIEDAD

Cód. según financiadora: CTQ2014-59020-R

Fecha de inicio-fin: 01/01/2015 - 31/12/2017

Duración: 3 años

Cuantía total: 50.000 €

Régimen de dedicación: Tiempo completo

4 Nombre del proyecto: Detección de Fluorescencia de Moléculas Individuales para el estudio estructural y dinámico de sistemas supramoleculares de interés biomédico y tecnológico

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Wajih Al-Soufi

Nº de investigadores/as: 7

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Ciencia e Innovación

Tipo de entidad: Pública

Ciudad entidad financiadora: Madrid, Comunidad de Madrid, España

Fecha de inicio-fin: 01/12/2010 - 31/12/2014

Duración: 3 años - 11 meses - 29 días

Entidad/es participante/s: Universidade de Santiago de Compostela

Cuantía total: 72.600 €

5 Nombre del proyecto: Ayudas para la consolidación y estructuración de unidades de investigación competitivas del sistema universitario de Galicia

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): M. Flor Rodríguez Prieto

Nº de investigadores/as: 8

Entidad/es financiadora/s:

XUNTA DE GALICIA

Fecha de inicio: 01/01/2013

Duración: 2 años - 7 meses

Entidad/es participante/s: Universidade de Santiago de Compostela

Cuantía total: 70.000 €

6 Nombre del proyecto: Red de Ciencias y Materiales Moleculares

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Enrique Guitián Rivera

Nº de investigadores/as: 8

Entidad/es financiadora/s:

Consellería de Cultura

Educación e Ordenación Universitaria

XUNTA DE GALICIA

Fecha de inicio: 01/01/2012

Duración: 1 año - 11 meses - 30 días

Entidad/es participante/s: Universidade da Coruña; Universidade de Santiago de Compostela;

Universidade de Vigo

Cuantía total: 120.000 €

7 Nombre del proyecto: Estudo da dinámica do transporte de materia a través de membranas biomiméticas mediante técnicas de fluorescencia de moléculas individuais

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Wajih Al-Soufi

Nº de investigadores/as: 5

Entidad/es financiadora/s:

Consellería de Economía e Industria

XUNTA DE GALICIA



Fecha de inicio: 02/12/2009

Duración: 2 años - 11 meses - 30 días

Entidad/es participante/s: Universidade de Santiago de Compostela

Cuantía total: 48.886 €

8 Nombre del proyecto: Axudas para a consolidación e estruturación de unidades de investigación competitivas do sistema galego de I+D+I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): María Flor Rodríguez Prieto

Nº de investigadores/as: 8

Entidad/es financiadora/s:

Consellería de Economía e Industria)

Desenvolvemento e Innovación

Xunta de Galicia (Dirección Xeral de Investigación

Fecha de inicio: 01/01/2009

Duración: 11 meses - 30 días

Entidad/es participante/s: Universidade de Santiago de Compostela

Cuantía total: 33.048 €

9 Nombre del proyecto: Red de Ciencias y Materiales Moleculares

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Enrique Guitián Rivera

Nº de investigadores/as: 7

Entidad/es financiadora/s:

Consellería de Educación

XUNTA DE GALICIA

Fecha de inicio: 01/01/2009

Duración: 1 año - 11 meses - 30 días

Entidad/es participante/s: Universidade da Coruña; Universidade de Santiago de Compostela;

Universidade de Vigo

Cuantía total: 120.000 €

10 Nombre del proyecto: Ayudas para la Consolidación y Estructuración de Unidades de Investigación competitivas del sistema gallego de I+D+I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): M. FLOR RODRÍGUEZ PRIETO

Nº de investigadores/as: 8

Entidad/es financiadora/s:

XUNTA DE GALICIA

Fecha de inicio: 01/01/2008

Duración: 11 meses

Entidad/es participante/s: Universidad de Santiago de Compostela

Cuantía total: 33.048 €

11 Nombre del proyecto: SONDAS FLUORESCENTES PARA EL ESTUDIO DINAMICO Y ESTRUCTURAL DE SISTEMAS SUPRAMOLECULARES DE INTERES TECNOLÓGICO Y BIOMÉDICO MEDIANTE TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS DE MOLECULAS INDIVIDUALES

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Wajih Al-Soufi

Nº de investigadores/as: 3

Entidad/es financiadora/s:

MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA

Fecha de inicio: 15/12/2007

Duración: 2 años - 11 meses - 30 días

Entidad/es participante/s: Universidad de Santiago de Compostela

Cuantía total: 61.000 €



- 12** **Nombre del proyecto:** Deseño, síntese e propiedades de novos materiais discóticos electroactivos
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): María Dolores Pérez Meiras
Nº de investigadores/as: 8
Entidad/es financiadora/s:
Consellería de Innovación e Industria
XUNTA DE GALICIA
Fecha de inicio: 01/11/2007 **Duración:** 2 años - 11 meses - 29 días
Entidad/es participante/s: Universidade de Santiago de Compostela
Cuantía total: 97.230 €
- 13** **Nombre del proyecto:** Ayudas para la Consolidación y Estructuración de Unidades de Investigación competitivas del sistema gallego de I+D+I
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): M. FLOR RODRÍGUEZ PRIETO
Nº de investigadores/as: 7
Entidad/es financiadora/s:
XUNTA DE GALICIA
Fecha de inicio: 01/01/2007 **Duración:** 11 meses - 30 días
Entidad/es participante/s: Universidad de Santiago de Compostela
Cuantía total: 27.540 €
- 14** **Nombre del proyecto:** Estudio de la dinámica de sistemas organizados mediante espectroscopia de correlación de fluorescencia
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Wajih Al-Soufi
Nº de investigadores/as: 4
Entidad/es financiadora/s:
MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA
Fecha de inicio: 01/01/2006 **Duración:** 1 año - 11 meses - 30 días
Entidad/es participante/s: Universidad de Santiago de Compostela y Universidad Heinrich-Heine de Düsseldorf
Cuantía total: 10.802 €
- 15** **Nombre del proyecto:** Rede para deseño e síntese de moléculas e supramoléculas de acción bioloxica programada
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Enrique Guitian Rivera
Nº de investigadores/as: 7
Entidad/es financiadora/s:
Xunta de Galicia (Consellería de Educación e ordenación Universitaria)
Fecha de inicio: 01/01/2006 **Duración:** 2 años - 11 meses - 30 días
Entidad/es participante/s: Universidade da Coruña; Universidade de Santiago de Compostela; Universidade de Vigo
Cuantía total: 180.000 €
- 16** **Nombre del proyecto:** Estudio estructural de medios organizados mediante sondas de transferencia protónica
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Wajih Al-Soufi
Nº de investigadores/as: 3
Entidad/es financiadora/s:
Xunta de Galicia (Dirección Xeral de I+D)
Fecha de inicio: 13/07/2005 **Duración:** 2 años - 11 meses - 30 días



Entidad/es participante/s: Universidade de Santiago de Compostela
Cuantía total: 17.200 €

- 17 Nombre del proyecto:** Rede de Ciencias e materiais moleculares
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): ENRIQUE GUITIAN RIVERA
Nº de investigadores/as: 8
Entidad/es financiadora/s:
Dirección Xeral de I+D da Xunta de Galicia
- Fecha de inicio:** 13/07/2005 **Duración:** 11 meses - 30 días
Entidad/es participante/s: Universidades de Santiago de Compostela y de A Coruña
Cuantía total: 18.000 €

- 18 Nombre del proyecto:** Estudio estructural de medios organizados mediante sondas de transferencia protónica
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Wajih Al-Soufi
Nº de investigadores/as: 3
Entidad/es financiadora/s:
MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA
- Fecha de inicio:** 13/12/2004 **Duración:** 3 años
Entidad/es participante/s: Universidad de Santiago de Compostela
Cuantía total: 81.650 €

- 19 Nombre del proyecto:** Polímeros supramoleculares derivados de ciclodextrinas y sales biliares
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José Vázquez Tato
Nº de investigadores/as: 9
Entidad/es financiadora/s:
Secretaría Xeral de Investigación e Desenvolvemento
XUNTA DE GALICIA
- Fecha de inicio:** 28/12/2001 **Duración:** 2 años - 11 meses - 30 días
Entidad/es participante/s: Universidad de Santiago de Compostela
Cuantía total: 36.511 €

- 20 Nombre del proyecto:** Polímeros supramoleculares derivados de ciclodextrinas y sales biliares
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José Vázquez Tato
Nº de investigadores/as: 9
Entidad/es financiadora/s:
MINISTERIO DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA Secretaría de Estado de Política Científica y Tecnológica
Dirección General de Investigación
- Fecha de inicio:** 01/11/2001 **Duración:** 3 años
Entidad/es participante/s: Universidad de Santiago
Cuantía total: 38.566,94 €

- 21 Nombre del proyecto:** Síntese de derivados de ciclodextrinas e estudio das súas aplicacións. Autoasociación de surfactantes esteroideos.
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José Vázquez Tato
Nº de investigadores/as: 9
Entidad/es financiadora/s:
PGIDT (PXI (Programa Xeral de Investigación))



Fecha de inicio: 30/07/1999

Duración: 2 años - 5 meses - 1 día

Entidad/es participante/s: Universidad de Santiago de Compostela

Cuantía total: 48.802,17 €

22 Nombre del proyecto: Substanzprüfung und Dosimetrie: Grundlagen der Photoresistenz und Rolle des metastatischen Potentials für die photodynamische Lasertherapie

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Heyke Diddens

Nº de investigadores/as: 6

Entidad/es financiadora/s:

BMBF (Ministerio Federal de Educación e Investigación) de Alemania

Fecha de inicio: 01/11/1993

Duración: 3 años

Entidad/es participante/s: Medizinisches Laserzentrum Lübeck, Alemania

Cuantía total: 500.000 €

23 Nombre del proyecto: Investigación de procesos de fototautomerización por transferencia protónica fotoinducida

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): María Flor Rodríguez Prieto

Entidad/es financiadora/s:

DGI (PGC)

Fecha de inicio: 30/09/1991

Duración: 2 años - 11 meses - 29 días

Entidad/es participante/s: Universidad de Santiago de Compostela

Cuantía total: 24.040,48 €

24 Nombre del proyecto: Investigación de procesos de fototautomerización por transferencia protónica fotoinducida

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): María Flor Rodríguez Prieto

Entidad/es financiadora/s:

Xunta de Galicia (CICETGA)

Fecha de inicio: 26/03/1991

Duración: 2 años

Entidad/es participante/s: Universidad de Santiago de Compostela

Cuantía total: 36.361,23 €

25 Nombre del proyecto: Estudio de procesos de transferencia protónica fotoinducida

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): M. Flor Rodríguez Prieto

Nº de investigadores/as: 4

Entidad/es financiadora/s:

Universidade de Santiago de Compostela

Fecha de inicio: 01/01/1989

Duración: 11 meses - 30 días

Entidad/es participante/s: Universidade de Santiago de Compostela

Cuantía total: 12.000 €



Contratos, convenios o proyectos de I+D+i no competitivos con Administraciones o entidades públicas o privadas

- 1** **Nombre del proyecto:** Convenio de colaboración para a preparación de liposomas vectorizados con anti-HSP-70
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Novo Rodríguez, María de la Merced; Al-Soufi, Wajih
Nº de investigadores/as: 7
Entidad/es participante/s: Fundación para a Investigación Desenvolvemento e Innovación do Complexo Hospitalario Universitario de Santiago; Laboratorio de Investigación en Neurociencias; Universidade de Santiago de Compostela
Entidad/es financiadora/s:
 Laboratorio de Investigación en Neurociencias
Fecha de inicio: 19/03/2010 **Duración:** 2 meses
Cuantía total: 3.600 €
- 2** **Nombre del proyecto:** Convenio de colaboración para o desenvolvemento de nanopartículas lipídicas de aplicación biomédica no ictus
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Wajih Al-Soufi
Nº de investigadores/as: 3
Entidad/es participante/s: Fundación para a investigación, desenvolvemento e innovación do complexo hospitalario universitario de Santiago; Laboratorio de Investigación en Neurociencias; Universidade de Santiago de Compostela
Entidad/es financiadora/s:
 Laboratorio de Investigación en Neurociencias
Fecha de inicio: 23/03/2009 **Duración:** 2 meses
Cuantía total: 5.160 €

Actividades científicas y tecnológicas

Producción científica

Índice H: 17

Fecha de aplicación: 15/01/2019

Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1** Critical aggregation concentration for the formation of early Amyloid- β (1–42) oligomers. Scientific Reports. Nature, 29/01/2018.
DOI: 10.1038/s41598-018-19961-3
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 2** Freire, Sonia; Rodriguez-Prieto, Flor; Rios Rodriguez, M. Carmen; Penedo, J. Carlos; Al-Soufi, Wajih; Novo, Mercedes. Towards Ratiometric Sensing of Amyloid Fibrils In Vitro. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 21 - 8, pp. 3425 - 3434. 16/02/2015. ISSN 0947-6539
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 0



- 3** Bordello, Jorge; Sanchez, Mateo I.; Vazquez, M. Eugenio; Mascarenas, Jose L.; Al-Soufi, Wajih; Novo, Mercedes. Fluorescence-Labeled Bis-benzamides as Fluorogenic DNA Minor-Groove Binders: Photophysics and Binding Dynamics. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 21 - 4, pp. 1609 - 1619. 19/01/2015. ISSN 0947-6539
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 0
- 4** Pineiro, Lucas; Novo, Mercedes; Al-Soufi, Wajih. Fluorescence emission of pyrene in surfactant solutions. ADVANCES IN COLLOID AND INTERFACE SCIENCE. 215, pp. 1 - 12. 01/2015. ISSN 0001-8686
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 1
- 5** Mercedes Novo; Wajih Al-Soufi; Marcus H. de Araujo; Sonia Freire. Photophysical study of Thioflavin T as fluorescence marker of amyloid fibrils. Dyes and Pigments. 110, pp. 97 - 105. 2014. Disponible en Internet en: <DOI 10.1016/j.dyepig.2014.05.004>.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 6** Jesús Agulla; David Brea; Bárbara Argibay; Mercedes Novo; Francisco Campos; Tomás Sobrino; Miguel Blanco; José Castillo; Pedro Ramos-Cabrer. Quick adjustment of imaging tracer payload, for in vivo applications of theranostic nanostructures in the brain. Nanomedicine. in press, pp. 1 - 10. 2014.
Tipo de producción: Artículo científico
- 7** Lucas Piñeiro; Sonia Freire; Jorge Bordello; Mercedes Novo and Wajih Al-Soufi. Dye exchange in micellar solutions. Quantitative analysis of bulk and single molecule fluorescence titrations. Soft Matter. 9, pp. 10779 - 10790. 2013.
Tipo de producción: Artículo científico
- 8** Wajih Al-Soufi; Lucas Piñeiro; Mercedes Novo. A model for monomer and micellar concentrations in Surfactant Solutions. Application to Conductivity, NMR, Diffusion and Surface Tension data. JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE. 370, pp. 102 - 110. 2012.
Tipo de producción: Artículo científico
- 9** Jorge Bordello; Mateo I. Sánchez; M. Eugenio Vázquez; José L. Mascareñas; Wajih Al-Soufi; Mercedes Novo. Single-molecule approach to DNA minor-groove association dynamics. ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION. 51, pp. 7541 - 7544. 2012.
Tipo de producción: Artículo científico
- 10** Mercedes Novo; Daniel Granadero; Jorge Bordello; Wajih Al-Soufi. Host-guest association studied by fluorescence correlation spectroscopy. JOURNAL OF INCLUSION PHENOMENA AND MACROCYCLIC CHEMISTRY. 70, pp. 259 - 268. 2011.
Tipo de producción: Artículo científico
- 11** Jorge Bordello; Mercedes Novo; Wajih Al-Soufi. Exchange-dynamics of a neutral hydrophobic dye in micellar solutions studied by Fluorescence Correlation Spectroscopy. JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE. 345, pp. 369 - 376. 2010.
Tipo de producción: Artículo científico
- 12** Daniel Granadero; Jorge Bordello; María Jesús Pérez-Alvite; Mercedes Novo; Wajih Al-Soufi. Host-guest complexation studied by Fluorescence Correlation Spectroscopy: adamantane-cyclodextrin inclusion. International Journal of Molecular Sciences. 11, pp. 173 - 188. 2010.
Tipo de producción: Artículo científico



- 13** Soina Freire; Jorge Bordello; Daniel Granadero; Wajih Al-Soufi; Mercedes Novo. Role of electrostatic and hydrophobic forces in the interaction of ionic dyes with charged micelles. *PHOTOCHEMICAL & PHOTOBIOLOGICAL SCIENCES*. 9, pp. 687 - 696. 2010.
Tipo de producción: Artículo científico
- 14** Bordello, J.; Reija, B.; Al-Soufi, W.; Novo, M. Host-assisted guest self-assembly: enhancement of the dimerization of pyronines Y and B by gamma-cyclodextrin. *Chemphyschem: a European journal of chemical physics and physical chemistry*. 10, pp. 931 - 939. 2009.
Tipo de producción: Artículo científico
- 15** Al-Soufi, W.; Reija, B.; Felekyan, S.; Seidel, C.A.; Novo, M. Dynamics of supramolecular association monitored by fluorescence correlation spectroscopy. *Chemphyschem: a European journal of chemical physics and physical chemistry*. 9, pp. 1819 - 1827. 2008.
Tipo de producción: Artículo científico
- 16** Novo, M.; Felekyan, S.; Seidel, C.A.M. and Al-Soufi, W. Dye-Exchange Dynamics in Micellar Solutions Studied by Fluorescence Correlation Spectroscopy. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B*. 111, pp. 3614 - 3624. 2007.
Tipo de producción: Artículo científico
- 17** Mercedes Novo; Belén Reija; Wajih Al-Soufi. Freezing point of milk: a natural way to understand colligative properties. *JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION*. 84, pp. 1673 - 1675. 2007.
Tipo de producción: Artículo científico
- 18** Wajih Al-Soufi; Belén Reija; Mercedes Novo; Suren Felekyan; Ralf Kühnemuth; and Claus A. M. Seidel. Fluorescence Correlation Spectroscopy, a Tool to investigate Supramolecular Dynamics: Inclusion Complexes of Pyronines with Cyclodextrin. *JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY*. 127, pp. 8775 - 8784. 2005.
Tipo de producción: Artículo científico
- 19** Belén Reija; Wajih Al-Soufi; Mercedes Novo; José Vázquez Tato. Specific interactions in the inclusion complexes of pyronines Y and B with beta-cyclodextrin. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B*. 109, pp. 1364 - 1370. 2005.
Tipo de producción: Artículo científico
- 20** Jorge Carrazana; Belén Reija; Pedro Ramos Cabrer; Wajih Al-Soufi; Mercedes Novo; José Vázquez Tato. Complexation of methyl orange with alpha-cyclodextrin: detailed analysis and application to quantification of polymer-bound cyclodextrin. *SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY*. 16, pp. 549 - 559. 2004.
Tipo de producción: Artículo científico
- 21** M. Lezcano; M. Novo; W. Al-Soufi; E. Rodríguez-Núñez; J. Vázquez Tato. Complexation of several fungicides with beta-cyclodextrin: determination of the association constants and isolation of the solid complexes. *JOURNAL OF AGRICULTURAL AND FOOD CHEMISTRY*. 51, pp. 5036 - 5040. 2003.
Tipo de producción: Artículo científico
- 22** M. Lezcano; W. Al-Soufi; M. Novo; E. Rodríguez-Núñez and J. Vázquez-Tato. Complexation of Several Benzimidazole-Type Fungicides with alpha- and beta-Cyclodextrins. *JOURNAL OF AGRICULTURAL AND FOOD CHEMISTRY*. 50, pp. 108 - 112. 2002.
Tipo de producción: Artículo científico
- 23** W. Al-Soufi; M. Novo; M. Mosquera. Principal component global analysis of fluorescence and absorption spectra of 2-(2'-hydroxyphenyl)benzimidazole. *APPLIED SPECTROSCOPY*. 55, pp. 630 - 636. 2001.
Tipo de producción: Artículo científico



- 24** : E. Alvarez Parrilla; W. Al-Soufi; P. Ramos Cabrer; M. Novo; J. Vázquez Tato. Resolution of the Association Equilibria of 2-(p-toluidinyl)-naphthalene-6-sulfonate (TNS) with cyclodextrin and a Charged Derivative. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 105, pp. 5994 - 6003. 2001.
Tipo de producción: Artículo científico
- 25** Mercedes Novo; Gereon Hüttmann; Heyke Diddens. Chemical instability of 5-aminolevulinic acid used in the photodynamic diagnosis of bladder tumours. JOURNAL OF PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY B-BIOLOGY. 34, pp. 143 - 148. 1996.
Tipo de producción: Artículo científico
- 26** M. NOVO; MANUEL MOSQUERA GONZALEZ; MARIA FLOR RODRIGUEZ PRIETO. Excited-State behavior of 2-(4'-Pyridil)Benzimidazole in aqueous solution: Proton-Transfer Processes and dual fluorescence. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 99, pp. 14726 - 14732. 1995.
Tipo de producción: Artículo científico
- 27** MARIA DE LA MERCED NOVO RODRIGUEZ; MARK VAN DER AUWERAER; FRANS C. DE SCHRYVER; P. BORSENBERGER; H. BÄSSLER. Anomalous field dependence of the hole mobility in a molecular doped polymer. PHYSICA STATUS SOLIDI A-APPLIED RESEARCH. 117, pp. 223 - 241. 1993.
Tipo de producción: Artículo científico
- 28** MARIA DE LA MERCED NOVO RODRIGUEZ; MANUEL MOSQUERA GONZALEZ; MARIA FLOR RODRIGUEZ PRIETO. Influence of acidity on the fluorescence spectra of 2-pyridylbenzimidazoles in aqueous solution. JOURNAL OF THE CHEMICAL SOCIETY-FARADAY TRANSACTIONS. 89, pp. 885 - 889. 1993.
Tipo de producción: Artículo científico
- 29** D. MEERSCHAUT; MARIA DE LA MERCED NOVO RODRIGUEZ; MARK VAN DER AUWERAER; WIM DEHAEN; FRANS C. DE SCHRYVER. Photo-induced electron transfer in and electron injection from trichromophoric molecules forming langmuir blodgett films. MOLECULAR CRYSTALS AND LIQUID CRYSTALS. 235, pp. 67 - 74. 1993.
Tipo de producción: Artículo científico
- 30** M. NOVO; MANUEL MOSQUERA GONZALEZ; MARIA FLOR RODRIGUEZ PRIETO. Prototropic equilibria of 2-Pyridylbenzimidazoles in aqueous solution. CANADIAN JOURNAL OF CHEMISTRY-REVUE CANADIENNE DE CHIMIE. 70, pp. 823 - 827. 1992.
Tipo de producción: Artículo científico
- 31** MARIA FLOR RODRIGUEZ PRIETO; M. NOVO; J.A. DOMINGUEZ HERBON; BERTA FERNANDEZ RODRIGUEZ. Tautomerism-to be taken lightly. EDUCATION IN CHEMISTRY. 29, pp. 139 - 141. 1992.
Tipo de producción: Artículo científico
- 32** H. Eisenberger; B. Nickel; A.A. Ruth; W. Al-Soufi; K.-H. Grellmann; M. Novo. Keto-enol tautomerization of 2-(2'-hydroxyphenyl)-benzoxazole and 2-(2'-hydroxy-4'-methylphenyl)benzoxazole in the triplet state; Isotope effects and hydrogen tunnel-effects. Part II. Dual phosphorescence kinetics. The journal of physical chemistry. 95, pp. 10509 - 10518. 1991.
Tipo de producción: Artículo científico
- 33** M. Flor Rodríguez Prieto; Manuel Mosquera; Mercedes Novo. Dual fluorescence of 2-(2'-pyridyl)benzimidazole in aqueous solution due to photoinduced proton-transfer processes. The journal of physical chemistry. 94, pp. 8536 - 8542. 1990.
Tipo de producción: Artículo científico



- 34** Wajih Al-Soufi; Mercedes Novo; Manuel Mosquera; Flor Rodríguez-Prieto. Principal Component Global Analysis of series of fluorescence spectra. Reviews in Fluorescence 2009.pp. 23 - 45. New YorkSpringer Science+Business Media, 2011.
Tipo de producción: Capítulo de libro
- 35** Wajih Al-Soufi; Daniel Granadero; Jorge Bordello; Sonia Freire; Lucas Piñeiro; Mercedes Novo. Evidence of cyclodextrin aggregation obtained with Fluorescence Correlation Spectroscopy. Proceedings of the 14th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry. pp. 1 - 7. Basel(Suiza): MDPI, 2010. ISBN 3-906980-24-3
Tipo de producción: Capítulo de libro **Tipo de soporte:** Libro
Autor de correspondencia: Si
- 36** Daniel Granadero; Jorge Bordello; Mercedes Novo; Wajih Al-Soufi. Complexation of Synthetic Organic Dye Dapoxyl with cyclodextrins studied by fluorescence spectroscopy. Proceedings of ECSOC-13, The Thirteenth International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry.f00, pp. 1 - 10. Basel(Suiza): MDPI, 2009. ISBN 3-906980-23-5
Tipo de producción: Capítulo de libro
- 37** Mercedes Novo; Jorge Bordello; Daniel Granadero; Sonia Freire; Wajih Al-Soufi. Supramolecular host-guest complexes between coumarin 460 and cyclodextrins: a matter of size. Proceedings of ECSOC-12, The Twelfth International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry.pp. 1 - 1. Basel(Suiza): MDPI, 2008. ISBN 3-906980-20-0
Tipo de producción: Capítulo de libro
- 38** Mercedes Novo; Wajih Al-Soufi. Fluorescence Study of the Supramolecular Interactions between Coumarins and Serum Albumin. Proceedings of ECSOC-11, The Eleventh International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry.pp. 1 - 1. Basel(Suiza): MDPI, 2007. ISBN 3-906980-19-7
Tipo de producción: Capítulo de libro
- 39** Al-Soufi, Wajih; Novo, Mercedes; Reija, Belén; Felekyan, Suren; Seidel, Claus A. M.Host-Guest Dynamics studied by Fluorescence Correlation Spectroscopy. Proceedings of ECSOC-10, The Tenth International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry.pp. 1 - 1. Basel(Suiza): MDPI, 2006. ISBN 3-906980-16-2
Tipo de producción: Capítulo de libro
- 40** Al-Soufi, Wajih; Novo, Mercedes; Reija, Belén; Felekyan, Suren; Seidel, Claus A. M.Fluorescence Correlation Spectroscopy as a Tool for the Study of the Dynamics of Supramolecular and Organized Systems. Proceedings of ECSOC-9, The Ninth International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry.pp. 1 - 1. Basel(Suiza): MDPI, 2005. ISBN 3-906980-16-2
Tipo de producción: Capítulo de libro
- 41** Reija, Belén; Al-Soufi, Wajih; Novo, Mercedes; Vázquez-Tato, José. Study of the complexation of pyronines Y and B with beta-cyclodextrin by fluorescence spectroscopy. Proceedings of ECSOC-8, The Eight International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry.max, pp. 1 - 1. Basel(Suiza): MDPI, 2004. ISBN 3-906980-15-4
Tipo de producción: Capítulo de libro
- 42** J. Carrazana García; W. Al-Soufi; M. Novo Rodríguez; J. Vázquez Tato. Influence of pH on the stability of the inclusion complex of methyl orange and beta-cyclodextrin. Proceedings of the Ninth Intrnational Symposium on Cyclodextrins.pp. 179 - 182. Kluwer Academic Publishers, 1999. ISBN 0-7923-5721-3
Tipo de producción: Capítulo de libro
- 43** Mercedes Novo Rodríguez; Gereon Hüttmann; Heyke Diddens. Chemical instability of 5-aminolevulinic acid (ALA) in aqueous solution. SPIE (Proceedings of the 5th International Photodynamic Association Biennial Meeting).237, pp. 204 - 209. 1995. ISBN 0-8194-1716-5



Tipo de producción: Capítulo de libro

Autor de correspondencia: Si

Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

- 1 Título del trabajo:** DNA Intercalators studied by Single-Molecule Fluorescence Techniques
Nombre del congreso: 6 Jornadas Ibéricas de Fotoquímica
Autor de correspondencia: Si
Ciudad de celebración: Aveiro, Centro (P), Portugal
Fecha de celebración: 11/09/2018
Fecha de finalización: 14/09/2018
Entidad organizadora: Grupo de Fotoquímica da Sociedade Portuguesa de Química
Tipo de entidad: Universidad
Mercedes Novo; Lucas Piñeiro; Wajih Al-Soufi. "Comunicación Oral".
- 2 Título del trabajo:** Photophysics and Binding Dynamics of Fluorogenic DNA Minor-Groove Binders
Nombre del congreso: International Symposium: Integrating spectroscopic and theoretical methods to analyse molecular machines
Autor de correspondencia: Si
Ciudad de celebración: Kreuth, München, Alemania
Fecha de celebración: 10/12/2014
Fecha de finalización: 13/12/2014
Entidad organizadora: Max Planck Institute for Chemical Energy Conversion, Alemania
Tipo de entidad: Agencia Estatal
Bordello, Jorge; Novo, Mercedes; Al-Soufi, Wajih.
- 3 Título del trabajo:** Self-assembling supramolecular systems studied by Fluorescence Correlation Spectroscopy
Nombre del congreso: International Symposium: Integrating spectroscopic and theoretical methods to analyse molecular machines
Autor de correspondencia: No
Ciudad de celebración: Kreuth, München, Alemania
Fecha de celebración: 10/12/2014
Fecha de finalización: 13/12/2014
Entidad organizadora: Max Planck Institute for Chemical Energy Conversion, Alemania
Tipo de entidad: Agencia Estatal
Freire, Sonia; Piñeiro, Lucas; Al-Soufi, Wajih; Novo, Mercedes.
- 4 Título del trabajo:** Dynamics of DNA binders studied by Single-Molecule Fluorescence Techniques
Nombre del congreso: 1st International Caparica Conference on Chromogenic and Emissive Materials
Autor de correspondencia: Si
Ciudad de celebración: Caparica, Portugal
Fecha de celebración: 08/09/2014
Fecha de finalización: 10/09/2014
Entidad organizadora: Proteomass Scientific Society
Bordello, Jorge; Sánchez, Mateo I.; Vázquez, Eugenio; Mascareñas, José L.; Al-Soufi, Wajih; Novo, Mercedes. "Ponencia invitada".
- 5 Título del trabajo:** Photophysical study of Thioflavin T as fluorescence marker of amyloid fibrils
Nombre del congreso: 1st International Caparica Conference on Chromogenic and Emissive Materials
Autor de correspondencia: Si



Ciudad de celebración: Caparica, Portugal
Fecha de celebración: 08/09/2014
Fecha de finalización: 10/09/2014
Entidad organizadora: Proteomass Scientific Society
Freire, Sonia; de Araujo, Marcus H.; Novo, Mercedes; Al-Soufi, Wajih.

- 6** **Título del trabajo:** Association dynamics of DNA minor groove binders
Nombre del congreso: III Jornadas Ibéricas de Fotoquímica.
Ciudad de celebración: Granada, España
Fecha de celebración: 04/09/2011
Fecha de finalización: 07/09/2011
Jorge Bordello; Mateo I. Sanchez; M. Eugenio Vázquez; José L. Mascareñas; Wajih Al-Soufi; Mercedes Novo. ".".
- 7** **Título del trabajo:** Semi-Empirical Model for Micellar Concentration in Surfactant Solutions. Solution Properties and Dye Exchange
Nombre del congreso: III Jornadas Ibéricas de Fotoquímica.
Ciudad de celebración: Granada, España
Fecha de celebración: 04/09/2011
Fecha de finalización: 07/09/2011
Lucas Pineiro; Mercedes Novo; Wajih Al-Soufi. ".".
- 8** **Título del trabajo:** Study of potential fluorescence markers for b-amyloid aggregates
Nombre del congreso: III Jornadas Ibéricas de Fotoquímica.
Ciudad de celebración: Granada, España
Fecha de celebración: 04/09/2011
Fecha de finalización: 07/09/2011
Sonia Freire; Alfonso Brenlla; Mercedes Novo e Wajih Al-Soufi. ".".
- 9** **Título del trabajo:** Potential fluorescence markers for early b-amyloid aggregates
Nombre del congreso: International Conference on Photochemistry.
Ciudad de celebración: Pekin, China
Fecha de celebración: 07/08/2011
Fecha de finalización: 12/08/2011
Sonia Freire; Jorge Bordello; Lucas Piñeiro; Wajih Al-Soufi e Mercedes Novo. ".".
- 10** **Título del trabajo:** Supramolecular Association Dynamics studied by Fluorescence Correlation Spectroscopy
Nombre del congreso: International Conference on Photochemistry.
Ciudad de celebración: Pekin, China
Fecha de celebración: 07/08/2011
Fecha de finalización: 12/08/2011
Wajih Al-Soufi; Mercedes Novo. ".".
- 11** **Título del trabajo:** Supramolecular association dynamics studied by fluorescence correlation spectroscopy
Nombre del congreso: International Bunsen Discussion Meeting. Förster resonance energy transfer in life sciences.
Ciudad de celebración: Göttingen,
Fecha de celebración: 27/03/2011
Fecha de finalización: 30/03/2011



Al-Soufi, Wajih; Bordello, Jorge; Sánchez, Mateo I.; Vázquez, M. Eugenio; Mascareñas, José L.; Novo, Mercedes. ".".

- 12 Título del trabajo:** Evidence of cyclodextrin aggregation obtained with Fluorescence Correlation Spectroscopy
Nombre del congreso: 14th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry.
Ciudad de celebración: Basel,
Fecha de celebración: 01/11/2010
Fecha de finalización: 30/11/2010
Wajih Al-Soufi; Daniel Granadero; Jorge Bordello; Sonia Freire; Lucas Piñeiro; Mercedes Novo. ".".
- 13 Título del trabajo:** Determination of complexation equilibrium constants by Fluorescence Correlation Spectroscopy
Nombre del congreso: 15th International Cyclodextrin Symposium.
Ciudad de celebración: Viena, Austria
Fecha de celebración: 09/05/2010
Fecha de finalización: 12/05/2010
Daniel Granadero; Mercedes Novo; Wajih Al-Soufi. ".".
- 14 Título del trabajo:** Fluorescence Correlation Spectroscopy, a tool to investigate supramolecular association
Nombre del congreso: 15th International Cyclodextrin Symposium.
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Viena, Austria
Fecha de celebración: 09/05/2010
Fecha de finalización: 12/05/2010
Mercedes Novo; Wajih Al-Soufi. ".".
- 15 Título del trabajo:** Supramolecular association dynamics studied by Fluorescence Correlation Spectroscopy
Nombre del congreso: 15th International Cyclodextrin Symposium.
Ciudad de celebración: Viena, Austria
Fecha de celebración: 09/05/2010
Fecha de finalización: 12/05/2010
Wajih Al-Soufi; Daniel Granadero; Mercedes Novo. ".".
- 16 Título del trabajo:** Molecular encapsulation with alpha,gamma-cyclopeptide dimers studied by Fluorescence Correlation Spectroscopy
Nombre del congreso: International Workshop on Molecular Materials.
Ciudad de celebración: Sanxenxo, España
Fecha de celebración: 02/05/2010
Fecha de finalización: 05/05/2010
Daniel Granadero; María Jesús Pérez-Alvite; Juan R. Granja; Mercedes Novo; Wajih Al-Soufi. ".".
- 17 Título del trabajo:** Complexation of synthetic organic dye Dapoxyl with cyclodextrins studied by fluorescence spectroscopy
Nombre del congreso: 13th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry (ECSOC13).
Ciudad de celebración: Basel,
Fecha de celebración: 01/11/2009
Fecha de finalización: 30/11/2009
Daniel Granadero; Jorge Bordello; Mercedes Novo; Wajih Al-Soufi. "3-906980-23-5".



- 18 Título del trabajo:** Estudio fluorescente de la complejación del dapoxyl por ciclodextrinas: efecto del tamaño de la cavidad en el tipo y fortaleza de los complejos
Nombre del congreso: IX Congreso de Fotoquímica.
Ciudad de celebración: Bilbao, España
Fecha de celebración: 21/09/2009
Fecha de finalización: 23/09/2009
Daniel Granadero; Jorge Bordello; Mercedes Novo; Wajih Al-Soufi. ". "
- 19 Título del trabajo:** Fluorescence Correlation Spectroscopy as a tool to study the interaction dye-surfactant during the micellization process
Nombre del congreso: IX Congreso de Fotoquímica.
Ciudad de celebración: Bilbao, España
Fecha de celebración: 21/09/2009
Fecha de finalización: 23/09/2009
Jorge Bordello; Daniel Granadero; Mercedes Novo; Wajih Al-Soufi. ". "
- 20 Título del trabajo:** Papel de las fuerzas electrostáticas e hidrofóbicas en las interacciones entre Rodamina 123 y diferentes tipos de tensioactivos
Nombre del congreso: IX Congreso de Fotoquímica.
Ciudad de celebración: Bilbao, España
Fecha de celebración: 21/09/2009
Fecha de finalización: 23/09/2009
Mercedes Novo; Sonia Freire; Daniel Granadero; Jorge Bordello; Wajih Al-Soufi. ". "
- 21 Título del trabajo:** Size-selective complexation of dapoxyl by cyclodextrins studied by fluorescence spectroscopy
Nombre del congreso: 11th International Conference on Methods and Applications of Fluorescence (MAF11).
Ciudad de celebración: Budapest, Hungría
Fecha de celebración: 06/09/2009
Fecha de finalización: 09/09/2009
Daniel Granadero; Jorge Bordello; Mercedes Novo; Wajih Al-Soufi. ". "
- 22 Título del trabajo:** Supramolecular association studied by Fluorescence Correlation Spectroscopy (FCS)
Nombre del congreso: 11th International Conference on Methods and Applications of Fluorescence (MAF11).
Ciudad de celebración: Budapest, Hungría
Fecha de celebración: 06/09/2009
Fecha de finalización: 09/09/2009
Wajih Al-Soufi; Jorge Bordello; Daniel Granadero; Mercedes Novo. ". "
- 23 Título del trabajo:** The influence of hydrophobic fluorescence probes on surfactant pre-micellization studied by Fluorescence Correlation Spectroscopy
Nombre del congreso: 11th International Conference on Methods and Applications of Fluorescence (MAF11).
Ciudad de celebración: Budapest, Hungría
Fecha de celebración: 06/09/2009
Fecha de finalización: 09/09/2009
Jorge Bordello; Daniel Granadero; Mercedes Novo; Wajih Al-Soufi. ". "



- 24** **Título del trabajo:** Supramolecular host-guest complexes between coumarin 460 and cyclodextrins: a matter of size
Nombre del congreso: 12th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry.
Ciudad de celebración: Basel,
Fecha de celebración: 01/11/2008
Fecha de finalización: 30/11/2008
Mercedes Novo; Jorge Bordello; Daniel Granadero; Sonia Freire and Wajih Al-Soufi. "3-906980-20-0".
- 25** **Título del trabajo:** Enhanced-Sensitivity Probes for the Study of Dye-Exchange Dynamics in Micellar Solutions by Fluorescence Correlation Spectroscopy
Nombre del congreso: 19th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry.
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 13/07/2008
Fecha de finalización: 18/07/2008
Jorge Bordello; Mercedes Novo; Sonia Freire; Belén Reija and Wajih Al-Soufi. ".".
- 26** **Título del trabajo:** Interactions between Rhodamine 123 and Surfactant Micelles
Nombre del congreso: 19th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry.
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 13/07/2008
Fecha de finalización: 18/07/2008
Sonia Freire; Wajih Al-Soufi; Jorge Bordello; Belén Reija and Mercedes Novo. ".".
- 27** **Título del trabajo:** Fluorescence Study of the Supramolecular Interactions between Coumarins and Serum Albumin
Nombre del congreso: 11th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry..
Ciudad de celebración: Lugo, España
Fecha de celebración: 01/11/2007
Fecha de finalización: 30/11/2007
Mercedes Novo and Wajih Al-Soufi. "3-906980-19-7".
- 28** **Título del trabajo:** Excited state proton transfer reactions of 7-hydroxycoumarin in micelles.
Nombre del congreso: II Jornadas Ibéricas de Fotoquímica.
Ciudad de celebración: Faro, Portugal
Fecha de celebración: 25/07/2007
Fecha de finalización: 27/07/2007
Belén Reija; Mercedes Novo; Wajih Al-Soufi. ".".
- 29** **Título del trabajo:** Stability and dynamics of supramolecular assemblies studied by fluorescence correlation spectroscopy
Nombre del congreso: II Jornadas Ibéricas de Fotoquímica.
Ciudad de celebración: Faro, Portugal
Fecha de celebración: 25/07/2007
Fecha de finalización: 27/07/2007
Mercedes Novo; Suren Felekyan; Claus A. M. Seidel; Wajih Al-Soufi. ".".
- 30** **Título del trabajo:** Host-Guest Dynamics studied by Fluorescence Correlation Spectroscopy
Nombre del congreso: 10th INTERNATIONAL ELECTRONIC CONFERENCE ON SYNTHETIC ORGANIC CHEMISTRY.
Ciudad de celebración: Lugo, España
Fecha de celebración: 01/11/2006



Fecha de finalización: 30/11/2006

Wajih Al-Soufi; Mercedes Novo; Belén Reija; Suren Felekyan and Claus A. M. Seidel. ISBN 3-906980-18-9

- 31 Título del trabajo:** Coumarins as fluorescent probes for organized systems.
Nombre del congreso: The XIIth International Symposium in Luminiscence Spectrometry.
Ciudad de celebración: Lugo, España
Fecha de celebración: 18/07/2006
Fecha de finalización: 21/07/2006
Belén Reija; Wajih Al-Soufi; Mercedes Novo. ".".
- 32 Título del trabajo:** Fluorescence Correlation Spectroscopy: a technique to study stability and dynamics of supramolecular assemblies.
Nombre del congreso: The XIIth International Symposium in Luminiscence Spectrometry.
Ciudad de celebración: Lugo, España
Fecha de celebración: 18/07/2006
Fecha de finalización: 21/07/2006
Wajih Al-Soufi; Mercedes Novo; Belén Reija; Suren Felekyan; Claus A. M. Seidel. ".".
- 33 Título del trabajo:** Fluorescence Correlation Spectroscopy as a tool for the study of the dynamics of supramolecular and organized systems
Nombre del congreso: 9th Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry.
Ciudad de celebración: Lugo, España
Fecha de celebración: 01/11/2005
Fecha de finalización: 30/11/2005
Wajih Al-Soufi; Mercedes Novo; Belén Reija; Claus A. M. Seidel. ".".
- 34 Título del trabajo:** Sondas fluorescentes para el estudio estructural y dinámico de sistemas organizados.
Nombre del congreso: XXX bienal de la RSEQ.
Ciudad de celebración: Lugo, España
Fecha de celebración: 19/09/2005
Fecha de finalización: 23/09/2005
B. Reija; M. E. Moure; A. Teijeiro; M. Novo; W. Al-Soufi. ".".
- 35 Título del trabajo:** ESTUDIO DINÁMICO DE LA COMPLEJACIÓN DE PIRONINAS CON beta-CICLODEXTRINA MEDIANTE ESPECTROSCOPIA DE CORRELACIÓN DE FLUORESCENCIA
Nombre del congreso: VII Congreso de Fotoquímica (RSEQ).
Ciudad de celebración: Logroño, España
Fecha de celebración: 22/06/2005
Fecha de finalización: 24/06/2005
Wajih Al-Soufi; Mercedes Novo; Belén Reija; Claus A. M. Seidel. ".".
- 36 Título del trabajo:** ESTUDIO FLUORIMÉTRICO DE LA COMPLEJACIÓN DE PIRONINAS CON gamma-CICLODEXTRINA
Nombre del congreso: VII Congreso de Fotoquímica (RSEQ).
Ciudad de celebración: Logroño, España
Fecha de celebración: 22/06/2005
Fecha de finalización: 24/06/2005
Mercedes Novo; Jorge Bordello; Belén Reija; Wajih Al-Soufi. ".".



- 37** **Título del trabajo:** LAS HIDROXICUMARINAS COMO SONDAS DE TRANSFERENCIA PROTÓNICA PARA EL ESTUDIO DE SISTEMAS ORGANIZADOS
Nombre del congreso: VII Congreso de Fotoquímica (RSEQ).
Ciudad de celebración: Logroño, España
Fecha de celebración: 22/06/2005
Fecha de finalización: 24/06/2005
Belén Reija; Mercedes Novo; Wajih Al-Soufi; Manuel Mosquera. ".".
- 38** **Título del trabajo:** Study of the complexation of pyronines Y and B with beta-cyclodextrin by fluorescence spectroscopy
Nombre del congreso: ECSOC.
Ciudad de celebración: Lugo, España
Fecha de celebración: 01/11/2004
Fecha de finalización: 30/11/2004
Belén Reija; Wajih Al-Soufi; Mercedes Novo; José Vazquez Tato. "3906980154.".
- 39** **Título del trabajo:** Fluorescence Correlation Spectroscopy applied to the association dynamics between pyronines and beta-cyclodextrin
Nombre del congreso: 10th International Workshop on Single Molecule Detection and Ultrasensitive Analysis in Life Sciences.
Ciudad de celebración: Berlín-Adlershof, Alemania
Fecha de celebración: 22/09/2004
Fecha de finalización: 24/09/2004
Wajih Al-Soufi; Belén Reija; Mercedes Novo; Suren Feleykan; Claus A. M. Seidel. ".".
- 40** **Título del trabajo:** Association dynamics between pyronines and beta-cyclodextrin studied by fluorescence correlation spectroscopy
Nombre del congreso: XX IUPAC Symposium on Photochemistry..
Ciudad de celebración: Granada, España
Fecha de celebración: 17/07/2004
Fecha de finalización: 22/07/2004
Mercedes Novo; Wajih Al-Soufi; Belén Reija; Suren Feleykan and Claus A. M. Seidel. ".".
- 41** **Título del trabajo:** Complexation of pyronines B and Y by beta-cyclodextrin: a fluorescence study
Nombre del congreso: XX IUPAC Symposium on Photochemistry..
Ciudad de celebración: Granada, España
Fecha de celebración: 17/07/2004
Fecha de finalización: 22/07/2004
Belén Reija; Mercedes Novo; Wajih Al-Soufi; José Vázquez Tato. ".".
- 42** **Título del trabajo:** Análisis de espectros de emisión resueltos en el tiempo (TRES) aplicando el método de análisis de componentes principales (PCA)
Nombre del congreso: I Jornadas Ibéricas de Fotoquímica, VI Congreso de Fotoquímica (Soc. Esp. de Química).
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 18/09/2003
Fecha de finalización: 21/09/2003
Belén Reija; Mercedes Novo; Wajih Al-Soufi. ".".
- 43** **Título del trabajo:** Resolution of the Complexation Equilibria of Several Fungicidex with Cyclodextrins Using Principal Components Global
Nombre del congreso: Photophysics and Photochemistry 2000.



Ciudad de celebración: Estoril, Portugal

Fecha de celebración: 19/10/2000

Fecha de finalización: 21/10/2000

M. Lezcano Brito; W. Al-Soufi; M. Novo; J. Vázquez Tato. ".".

44 Título del trabajo: Study of Electrostatic and Steric Effects on the Complexation of 2,6-ANS by Cyclodextrin Derivatives

Nombre del congreso: Photophysics and Photochemistry 2000.

Ciudad de celebración: Estoril, Portugal

Fecha de celebración: 19/10/2000

Fecha de finalización: 21/10/2000

. Alvarez Parrilla; P. Ramos Cabrer; M. Novo; W. Al-Soufi; J. Vázquez Tato. ".".

45 Título del trabajo: Empirical Rank Determination in Principi Component Analysis. Global Analysis of Fluorescence Spectra

Nombre del congreso: 6th International Conference on Methods and Applications of Fluorescence Spectroscopy.

Ciudad de celebración: Paris, Francia

Fecha de celebración: 12/09/1999

Fecha de finalización: 15/09/1999

W. Al-Soufi; M. Novo; E. Alvarez Parrilla; M. Mosquera; J. Vázquez Tato. ".".

46 Título del trabajo: Study of Electrostatic Effects on the Complexation of Cyclodextrins by Fluorescence and NMR Techniques

Nombre del congreso: 6th International Conference on Methods and Applications of Fluorescence Spectroscopy.

Ciudad de celebración: Paris, Francia

Fecha de celebración: 12/09/1999

Fecha de finalización: 15/09/1999

: E. Alvarez Parrilla; P. Ramos Cabrer; M. Novo; W. Al-Soufi; J. Vázquez Tato. ".".

47 Título del trabajo: Aplicación del método de componentes principales a la resolución de espectros de absorción y de fluorescencia

Nombre del congreso: IV Congreso de Fotoquímica.

Ciudad de celebración: Gandía, España

Fecha de celebración: 21/03/1999

Fecha de finalización: 24/03/1999

W. Al-Soufi; J. C. Penedo; M. Novo; M. Mosquera. ".".

48 Título del trabajo: : Influence of pH on the Stability of the Inclusion Complex of Methyl Orange and ciclodextrin

Nombre del congreso: 9th international symposium on cyclodextrin.

Ciudad de celebración: España

Fecha de celebración: 31/05/1998

Fecha de finalización: 03/06/1998

J. Carrazana García; W. Al-Soufi; M. Novo Rodríguez; J. Vázquez Tato. ".".

49 Título del trabajo: Comparative study on the intracellular localization of endogenous and exogenous protoporphyrin IX

Nombre del congreso: Sixth Biennial Meeting of the International Photodynamic Association.

Ciudad de celebración: Melbourne, Australia

Fecha de celebración: 10/03/1996



Fecha de finalización: 14/03/1996
Mercedes Novo; Gereon Hüttmann; Heyke Diddens. ".".

- 50 Título del trabajo:** Relative sensitivity of different human bladder carcinoma cell lines to Photodynamic Therapy
Nombre del congreso: Sixth Biennial Meeting of the International Photodynamic Association.
Ciudad de celebración: Melbourne, Australia
Fecha de celebración: 10/03/1996
Fecha de finalización: 14/03/1996
Heyke Diddens; Andrea Gehring; Birgit Hümpel; Gereon Hüttmann; Mercedes Novo. ".".
- 51 Título del trabajo:** Methoden der Fluoreszenzmikroskopie zur Untersuchung der intrazellulären Lokalisation von Photosensibilisatoren
Nombre del congreso: 3. Arbeitsseminar des BMBF Verbundes, Photodynamische Lasertherapie .
Ciudad de celebración: Lübeck, Alemania
Fecha de celebración: 12/02/1996
Fecha de finalización: 14/02/1996
Mercedes Novo. ".".
- 52 Título del trabajo:** Sublethal photodynamic therapy decreases the ability of human bladder tumor cells to invade basement membranes
Nombre del congreso: International symposium on biomedical optics. BIOS '96.
Ciudad de celebración: Estados Unidos de América
Fecha de celebración: 27/01/1996
Fecha de finalización: 02/02/1996
HEYKE DIDDENS; AMELI GABEL; M^a DE LA MERCED NOVO RODRIGUEZ; CORINNA BURGEL. ".".
- 53 Título del trabajo:** Relative sensitivity of different human bladder carcinoma cells to photodynamic therapy
Nombre del congreso: BIOS europe'95 european biomedical optics week.
Ciudad de celebración: España
Fecha de celebración: 12/09/1995
Fecha de finalización: 16/09/1995
Heyke Diddens; Gereon Hüttmann; Mercedes Novo. ".".
- 54 Título del trabajo:** Intrazelluläre Lokalisation von ALA-induziertem Protoporphyrin im Vergleich zu exogenem Protoporphyrin
Nombre del congreso: 2. Seminar Photodynamische Lasertherapie.
Ciudad de celebración: Clausthal-Zellerfeld, Alemania
Fecha de celebración: 06/03/1995
Fecha de finalización: 08/03/1995
Gereon Hüttmann y Mercedes Novo. ".".
- 55 Título del trabajo:** Chemical instability of 5-aminolevulinic acid in solution
Nombre del congreso: 5th International Photodynamic Association Biennial Meeting.
Ciudad de celebración: Amelia Island, Estados Unidos de América
Fecha de celebración: 21/09/1994
Fecha de finalización: 24/09/1994
Mercedes Novo; Gereon Hüttmann; Heyke Diddens. ".".



- 56** **Título del trabajo:** Chemical instability of aminolevulinic acid: pH and concentration dependence
Nombre del congreso: Photodynamic Therapy and Diagnostics: Present State and Future Developments.
Ciudad de celebración: Lübeck, Alemania
Fecha de celebración: 21/11/1993
Fecha de finalización: 22/11/1993
Mercedes Novo; Hermann Hombrecher; Gereon Hüttmann; Heyke Diddens. ".".
- 57** **Título del trabajo:** Mechanistic basis of ALA-induced Protoporphyrin sensitization
Nombre del congreso: Photodynamic Therapy and Diagnostics: Present State and Future Developments.
Ciudad de celebración: Lübeck, Alemania
Fecha de celebración: 21/11/1993
Fecha de finalización: 22/11/1993
Heyke Diddens y Mercedes Novo. ".".
- 58** **Título del trabajo:** Ground- and excited-state prototropic reactions in ethanolic acidic solutions of 2-(4'-pyridyl)benzimidazole
Nombre del congreso: 14th international unión of pure and applied chemistry (IUPAC) symposium on photochemistry.
Ciudad de celebración: Bélgica
Fecha de celebración: 19/07/1992
Fecha de finalización: 25/07/1992
MANUEL MOSQUERA GONZALEZ; M. NOVO; IGNACIO PEREZ JUSTE; MARIA DEL CARMEN RIOS RODRIGUEZ; MARIA FLOR RODRIGUEZ PRIETO. ".".
- 59** **Título del trabajo:** Ground- and excited-state tautomerism in 2-3(-hydroxy-2'-pyridyl)benzimidazole
Nombre del congreso: 14th international unión of pure and applied chemistry (IUPAC) symposium on photochemistry.
Ciudad de celebración: Bélgica
Fecha de celebración: 19/07/1992
Fecha de finalización: 25/07/1992
MANUEL MOSQUERA GONZALEZ; M. NOVO; IGNACIO PEREZ JUSTE; MARIA DEL CARMEN RIOS RODRIGUEZ; MARIA FLOR RODRIGUEZ PRIETO. ".".
- 60** **Título del trabajo:** Excited-state proton-transfer processes in 2-pyridilbenzimidazoles
Nombre del congreso: XV-th International Conference on Photochemistry.
Ciudad de celebración: París, Francia
Fecha de celebración: 28/07/1991
Fecha de finalización: 02/08/1991
Manuel Mosquera González; Mercedes Novo Rodríguez; María del Carmen Ríos Rodríguez; Flor Rodríguez Prieto. ".".
- 61** **Título del trabajo:** Keto-enol tautomerism in the metastable triplet state of 2-(2'-deuterioxyphenyl)-benzoxazole and 2-(2'-deuterioxy-4'-methylphenyl)-benzoxazole
Nombre del congreso: XV-th International Conference on Photochemistry.
Ciudad de celebración: París, Francia
Fecha de celebración: 28/07/1991
Fecha de finalización: 02/08/1991
Heike Heisenberger; Bernhard Nickel; A. Andreas Ruth; Wajih Al-Soufi; Karl H. Grellmann; Mercedes Novo. ".".



- 62 Título del trabajo:** Tautomerización en los estados fundamental y excitado del 2-(3'-hidroxi-2'-piridil)benzimidazol
Nombre del congreso: I Congreso de Fotoquímica.
Ciudad de celebración: Granada, España
Fecha de celebración: 21/03/1991
Fecha de finalización: 22/03/1991
Manuel Mosquera González; José Benito Rodríguez González; María del Carmen Ríos Rodríguez; Flor Rodríguez Prieto; Mercedes Novo Rodríguez. ".".
- 63 Título del trabajo:** Efecto del pH en los espectros electrónicos de derivados indolcarboxílicos
Nombre del congreso: XXIII Reunión Bienal de la R.S.E. de Química.
Ciudad de celebración: Salamanca, España
Fecha de celebración: 23/09/1990
Fecha de finalización: 28/09/1990
M. Pintos; M. Novo; M. Mosquera. ".".
- 64 Título del trabajo:** Procesos fotofísicos del 2-(3'-hidroxi-2'-piridil)benzimidazol
Nombre del congreso: XXIII Reunión Bienal de la R.S.E. de Química.
Ciudad de celebración: Salamanca, España
Fecha de celebración: 23/09/1990
Fecha de finalización: 28/09/1990
Mercedes Novo Rodríguez; María del Carmen Ríos Rodríguez; José Benito Rodríguez González; Flor Rodríguez Prieto. ".".
- 65 Título del trabajo:** Photoinduced proton transfer processes in 2-(4'-pyridyl)benzimidazole
Nombre del congreso: XIII IUPAC Symposium on Photochemistry.
Ciudad de celebración: Warwick, Reino Unido
Fecha de celebración: 22/07/1990
Fecha de finalización: 28/07/1990
M. Novo; M. Mosquera; M. F. Rodríguez Prieto. ".".
- 66 Título del trabajo:** Excited-state proton transfer reactions of 2-(2'-pyridyl)benzimidazole
Nombre del congreso: Fast Reactions in Solution (Royal Society of Chemistry).
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 03/09/1989
Fecha de finalización: 06/09/1989
M. Novo; M. Mosquera; M. F. Rodríguez Prieto. ".".
- 67 Título del trabajo:** Procesos fotofísicos y transferencia protónica fotoinducida del 2-(2-piridil)benzimidazol
Nombre del congreso: XXII Reunión Bienal de la R.S.E. de Química.
Ciudad de celebración: Murcia, España
Fecha de celebración: 26/09/1988
Fecha de finalización: 30/09/1988
M. Mosquera; M. Novo; M. F. Rodríguez Prieto. ".".



Gestión de I+D+i y participación en comités científicos

Organización de actividades de I+D+i

Título de la actividad: I Jornadas Ibéricas de Fotoquímica, VI Congreso de Fotoquímica (Soc. Esp. de Química)

Tipo de actividad: Comité organizador

Ámbito geográfico: Internacional

Fecha de inicio-fin: 18/09/2003 - 21/09/2003

Duración: 4 días

Evaluación y revisión de proyectos y artículos de I+D+i

- 1 Funciones desempeñadas:** Evaluador científico de proyecto FONDECYT
Entidad de realización: Comisión Nacional de Investigación Científica y Tecnológica (CONICYT) de Chile
Ciudad entidad realización: Chile
Fecha de inicio-fin: 2012 - 2012
- 2 Funciones desempeñadas:** Evaluadora de Tesis Doctoral (Member of the Board of Examiners)
Entidad de realización: University of Madras
Ciudad entidad realización: India
Fecha de inicio-fin: 2012 - 2012
- 3 Funciones desempeñadas:** Evaluador en la convocatoria de 2008 de "Proyectos de Excelencia"
Entidad de realización: Consejería de Innovación, **Tipo de entidad:** Agencia Estatal Ciencia y Empresa de la Junta de Andalucía
Ciudad entidad realización: Andalucía, España
Fecha de inicio-fin: 2008 - 2008
- 4 Funciones desempeñadas:** Revisión de artículos en revistas científicas
Modalidad de actividad: Revisión de artículos en revistas científicas o tecnológicas
Fecha de inicio: 2004

Otros méritos

Estancias en centros de I+D+i públicos o privados

- 1 Entidad de realización:** Universidad Heinrich-Heine **Tipo de entidad:** Universidad de Düsseldorf
Facultad, instituto, centro: Departamento de Química Física Molecular
Ciudad entidad realización: Düsseldorf, Alemania
Fecha de inicio-fin: 01/07/2003 - 01/08/2003
Nombre del programa: Toma de contacto con las técnicas de fluorescencia de moléculas individuales y espectroscopia de correlación de fluorescencia y análisis de su aplicación al estudio de la dinámica de complejación por ciclodextrinas..
Objetivos de la estancia: Invitado/a



- 2** **Entidad de realización:** Medizinisches Laserzentrum **Tipo de entidad:** Organismo Público de Lübeck (Grupo de Fotobiología) Investigación
Ciudad entidad realización: Lübeck, Alemania
Fecha de inicio-fin: 01/10/1995 - 30/09/1996
Nombre del programa: Estudio in vitro de la localización intracelular y de los efectos fotodinámicos de la protoporfirina IX endógena y exógena mediante diferentes técnicas espectroscópicas y microscópicas de fluorescencia..
Objetivos de la estancia: Contratado/a
- 3** **Entidad de realización:** Medizinisches Laserzentrum **Tipo de entidad:** Organismo Público de Lübeck (Grupo de Fotobiología) Investigación
Ciudad entidad realización: Lübeck, Alemania
Fecha de inicio-fin: 15/08/1994 - 10/04/1995
Nombre del programa: Estudio de la localización intracelular de fotosensibilizadores en células tumorales mediante microscopia y despolarización de fluorescencia..
Objetivos de la estancia: Posdoctoral
- 4** **Entidad de realización:** Medizinisches Laserzentrum **Tipo de entidad:** Organismo Público de Lübeck (Grupo de Fotobiología) Investigación
Ciudad entidad realización: Lübeck, Alemania
Fecha de inicio-fin: 01/03/1993 - 17/12/1993
Nombre del programa: Estudio de las propiedades fotofísicas y fotoquímicas de diferentes fotosensibilizadores en disolución y en células tumorales en suspensión..
Objetivos de la estancia: Posdoctoral
- 5** **Entidad de realización:** Katholieke Universiteit **Tipo de entidad:** Universidad Leuven
Facultad, instituto, centro: Laboratorio de Dinámica Molecular y Espectroscopia
Ciudad entidad realización: Lovaina,
Fecha de inicio-fin: 01/01/1992 - 30/09/1992 **Duración:** 9 meses
Nombre del programa: Determinación y análisis de fotocorrientes transitorias en películas de polímeros dopados con sustancias orgánicas y de Langmuir-Blodgett. Duración de la estancia: 8 meses (sin mayo)..
Objetivos de la estancia: Posdoctoral
- 6** **Entidad de realización:** Departamento de Espectroscopia del Max Planck Institut für biophysikalische Chemie
Ciudad entidad realización: Göttingen, Alemania
Fecha de inicio: 01/10/1990
Nombre del programa: Estudio de procesos de transferencia protónica fotoinducida mediante las técnicas de fotólisis de destello con láser y fosforescencia..
Objetivos de la estancia: Doctorado/a
- 7** **Entidad de realización:** Centro de Química Estrutural, Instituto Superior Técnico
Ciudad entidad realización: Lisboa, Portugal
Fecha de inicio: 30/10/1988
Nombre del programa: Medidas de fluorescencia con resolución temporal para el estudio de los procesos de transferencia protónica en el estado excitado en 2-piridilbencimidazoles..
Objetivos de la estancia: Doctorado/a



Sociedades científicas y asociaciones profesionales

1 **Nombre de la sociedad:** European Photochemistry Association

2 **Nombre de la sociedad:** Real Sociedad de Química

Redes de cooperación

1 **Nombre de la red:** COST Action CM 1306 "Understanding Movement and Mechanism in Molecular Machines"

Identificación de la red: CM 1306

Fecha de inicio: 2014

2 **Nombre de la red:** COST Action MP1302 Nanospectroscopy

Identificación de la red: MP1302

Fecha de inicio: 2014

3 **Nombre de la red:** Red de Ciencias y Materiales Moleculares

Identificación de la red: Ciencias

Fecha de inicio: 2006

Períodos de actividad investigadora

Nº de tramos reconocidos: 4

Entidad acreditante: Comisión Nacional Evaluadora de la Actividad Investigadora (CNEAI) **Tipo de entidad:** Agencia Estatal

Ciudad entidad acreditante: España

Fecha de obtención: 2014

Acreditaciones/reconocimientos obtenidos

Descripción: ACREDITACION NACIONAL AL CUERPO DE CATEDRÁTICOS DE UNIVERSIDAD

Entidad acreditante: MINISTERIO DE EDUCACIÓN, CULTURA Y DEPORTE **Tipo de entidad:** Agencia Estatal

Ciudad entidad acreditante: Madrid, España

Fecha del reconocimiento: 03/11/2015

Anexo al Currículum Vitae Normalizado de Mercedes Novo

Participación en actividades de transferencia generadora de valor social

Convenios y contratos

Proyecto Innovación Educativa. Química física estructural 2002-2003

Referencia: USC 2003-PU013

Investigador principal: Al-Soufi, Wajih

Miembros del equipo: Novo Rodríguez, María de la Merced

Financiador/Programa: Centro de Tecnologías para el Aprendizaje (CeTA),

Universidad de Santiago de Compostela

Importe: 3311,96 €, Curso 2002-2003

Proyecto Innovación Educativa. Química física estructural 2003-2004

Referencia: USC 2003-PU013

Investigador principal: Al-Soufi, Wajih

Miembros del equipo: Novo Rodríguez, María de la Merced

Financiador/Programa: Centro de Tecnologías para el Aprendizaje (CeTA),

Universidad de Santiago de Compostela

Importe: 5955,00 €, Curso 2003-2004

II Campus de verano científico-Técnico de Lugo

Referencia: USC 2014-CP147

Investigador principal: Al-Soufi, Wajih

Miembros del equipo: Novo Rodríguez, María de la Merced

Financiador/Programa: Deputación Provincial de Lugo

Importe: 5.500,00 € Inicio: 01/12/2014 Fin: 31/03/2015

II Campus de Verano Científico-Técnico de Lugo

Referencia: USC 2014-RC002

Investigador principal: Al-Soufi, Wajih

Miembros del equipo: Novo Rodríguez, María de la Merced

Financiador/Programa: Fundación Pedro Barrié de la Maza

Importe: 4.000,00 € Inicio: 23/06/2014 Fin: 27/06/2014

III CAMPUS DE VERANO XUVENCIENCIA DE LUGO

Referencia: USC 2015-RC024

Investigador principal: Novo Rodríguez, María de la Merced

Miembros del equipo: Al-Soufi, Wajih

Financiador/Programa: Fundación Pedro Barrié de la Maza

Importe: 2.000,00 € Inicio: 20/05/2015 Fin: 31/12/2015

XuvenCiencia - ¡Aprender desde la experiencia! - FECYT 2015

Referencia: USC 2015-PN028, FCT-15-10046

Investigador principal: Novo Rodríguez, María de la Merced

Miembros del equipo: Al-Soufi, Wajih

Financiador/Programa: Fecyt

Importe: 9.700,00 € Inicio: 01/01/2016 Fin: 31/12/2016

III CAMPUS DE VERANO XUVENCIENCIA DE LUGO

Referencia: USC 2016-CL024

Investigador principal: Novo Rodríguez, María de la Merced

Miembros del equipo: Al-Soufi, Wajih

Financiador/Programa: Fundación Pedro Barrié de la Maza

Importe: 1.652,89 € Inicio: 04/04/2016 Fin: 31/12/2016

IV CAMPUS DE VERANO XUVENCIENCIA de Lugo

Referencia: USC, 2016-RC017

Investigador principal: Novo Rodríguez, María de la Merced
Miembros del equipo: Al-Soufi, Wajih
Financiador/Programa: Consellería de Cultura, Xunta de Galicia
Importe: 7.950,00 € Inicio: 26/06/2016 Fin: 02/07/2016

IV Xornada XuvenCiencia para profesorado. Mergullate na investigación

Referencia: USC 2017-RC022
Investigador principal: Novo Rodríguez, María de la Merced
Miembros del equipo: Al-Soufi, Wajih
Financiador/Programa: Centro Autonómico de Formación e Innovación, Xunta de Galicia
Importe: 8.105,79 € Inicio: 23/05/2017 Fin: 31/12/2017

V Campus de Verano XuvenCiencia de Lugo

Referencia: USC 2017-RC025
Investigador principal: Novo Rodríguez, María de la Merced
Miembros del equipo: Al-Soufi, Wajih
Financiador/Programa: Xunta de Galicia
Importe: 32.850,00 € Inicio: 02/07/2017 Fin: 31/12/2017

Servicio Kits educativos “XuvenCiencia en el aula”

Referencia: USC 2018-SG070
Investigador principal: Novo Rodríguez, María de la Merced
Miembros del equipo: Wajih Al-Soufi, Marta López Alonso, María Isabel Quiroga Berdeal, Ana Paula Losada García, Ana Manuela De Azevedo Gomes, Juan Luis Fernández Lorenzo, Montserrat Valcárcel Armesto, Jorge Dafonte Dafonte, Miguel Ángel González García, Javier José Cancela Barrio
Financiador/Programa: Centros de Enseñanzas Medias y Centros de Formación y Recursos
Inicio: 01/01/2018 (abierta)

XuvenCiencia - Hago, luego aprendo. - FECYT 2017

Referencia: USC 2017-PN188 , FCT-17-12096
Investigador principal: Novo Rodríguez, María de la Merced
Miembros del equipo: Al-Soufi, Wajih
Financiador/Programa: Fecyt
Importe: 12.000,00 € Inicio: 09/01/2018 Fin: 31/03/2019

Campus de Verano Científicos XuvenCiencia

Organizadora y docente de los Campus de Verano Científicos de Lugo en las siguientes ediciones:

I Campus de Verano Científico-Técnico, 25-28 de junio de 2013
II Campus de Verano Científico-Técnico, 23-27 de junio de 2014
III Campus de Verano XuvenCiencia, 22 al 26 de junio de 2015
IV Campus de Verano XuvenCiencia, 27 de junio al 1 de julio de 2016
V Campus de Verano XuvenCiencia, 2 al 8 de julio de 2017
VI Campus de Verano XuvenCiencia, 2 a 6 de julio de 2018

Jornadas XuvenCiencia para profesorado

Organizadora y docente de las siguientes “Jornadas XuvenCiencia para profesorado”:

I Jornada, 17 de enero de 2015, 8 horas
II Jornada, Fase 1, 13 de febrero de 2016, 8 horas
II Jornada, Fase 2, 26 de noviembre de 2016, 8 horas
III Jornada, Fase 1, 5 de noviembre de 2016, 8 horas
III Jornada, Fase 2, 28 de octubre de 2017, 8 horas
IV Jornada, 24 de mayo 2017, 8 horas
V Jornadas, 19 de octubre de 2018, 26 de octubre de 2018, 18 de enero de 2019, 22 de marzo de 2019,
Total 16 horas
Jornada de Formación “Photonics Explorer”, 11 de enero de 2019, 4 horas

Participación en Conferencias y Cursos

“EU-Comenius-Project SCICAMP Final Conference”, 7-9 de octubre de 2015, Berlin (Alemania). Cartel “Campus de Verano Xuvenciencia”, Mercedes Novo and Wajih Al-Soufi.

Conferencia LANDCARE FOR THE FUTURE del Proyecto Erasmus +, Strategic Partnership LANDCARE, 2015-1-ES01-KA203-01621, Comunicación “XUVENCIENCIA - PROMOTING SCIENCE AMONG YOUNG PEOPLE”, Al-Soufi, Wajih; Fernandez Lorenzo, Juan Luis; Varcancel Armesto, Montserrat; Lopez Alonso, Marta; Quiroga Berdeal, Maria Isabel; de Azevedo Gomes, Ana Manuela; Losada Garcia, Ana Paula; Pineiro Maseda, Lucas; Martinez Cabaleiro, Miguel; Novo Rodriguez, Mercedes

Jornada A DIVULGACIÓN DA CIENCIA EN GALICIA, organizada por el Consello da Cultura Gallega, 20 de abril de 2016 en Santiago de Compostela, total de 7 horas lectivas. Participación: Novo Rodríguez, Mercedes

III Jornada DivulgaTerra: pinchos de divulgación científica, comunicación oral “Un pasiño máis na loita contra o Alzheimer”, 15 de noviembre de 2018. Autora: Novo Rodríguez, Mercedes

“EUCU.Net Workshop: Round Table and General Assembly”, 17-18 de enero de 2019, Viena (Austria). Participación: Mercedes Novo Rodríguez y Marta López Alonso

Campañas de información y promoción para alumnado de enseñanza secundaria

Participación en las **campañas de información y promoción de las titulaciones de la Facultad de Ciencias** de la USC en los cursos 2012-2013, 2013-2014, 2015-2016, 2016-2017, 2017-2018 dirigidos a alumnado de enseñanza secundaria.



Ministerio de Economía y Competitividad
Secretaría de Estado de Investigación,
Desarrollo e Innovación

Currículum

Nombre: Saulo Vázquez Rodríguez

Fecha: 11/04/2019

Apellidos: Vázquez Rodríguez

Nombre: Saulo

Situación profesional actual

Organismo: Universidad de Santiago de Compostela
Facultad, Escuela o Instituto: Facultad de Química
Depto./Secc./Unidad estr.: Química Física
Dirección postal: Avda. das Ciencias s/n, 15706 Santiago de Compostela

Teléfono (indicar prefijo, número y extensión): 881 815709 ext. 15709

Fax: 881815704

Correo electrónico: saulo.vazquez@usc.es

Especialización (Códigos UNESCO): 2210 2210.91

Categoría profesional: Profesor titular

Fecha de inicio: 22/12/1992

Situación administrativa

Plantilla

Contratado

Interino

Becario

Otras situaciones especificar:

Dedicación A tiempo completo

A tiempo parcial

Líneas de investigación

Breve descripción, por medio de palabras claves, de la especialización y líneas de investigación actuales.

Dinámica de reacciones químicas, dinámica molecular, trayectorias clásicas, interacciones péptidos-superficies, disociaciones inducidas por colisiones y por superficies.

Formación Académica

Titulación Superior	Centro	Fecha
Licenciado en Ciencias Químicas	Universidad de Santiago de Compostela	Junio de 1984

Doctorado	Centro	Fecha
Ciencias Químicas	Universidad de Santiago de Compostela	Abril de 1989

--	--	--

Actividades anteriores de carácter científico profesional

Puesto	Institución	Fechas
Ayudante de Universidad (L.R.U.)	Universidad de Santiago de Compostela	1/89 a 11/90
Profesor Titular Interino (Universidad)	Universidad de Santiago de Compostela	11/90 a 12/92

Idiomas (R = regular, B = bien, C = correctamente)

Idioma	Habla	Lee	Escribe
Inglés	B	C	C

Participación en Proyectos de I+D financiados en Convocatorias públicas.

(nacionales y/o internacionales)

Título del proyecto: Simulación del proceso de combustión de bioalcoholes.
Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad (CTQ2014-58617-R)
Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela
Duración, desde: 1/01/2015 hasta: 31/12/2017 Cuantía de la subvención: 87.120,00 €
Investigador responsable: Antonio Fernández Ramos
Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: Consolidación e estruturación. REDES GI-1595 RCMM: Red de Ciencias y Materiales Moleculares. (2014-PG135) Ref.R2014/051.
Entidad financiadora: Consellería de Cultura, Educación e Ordenación Universitaria
Duración, desde: 24/06/2014 hasta: 23/06/2016 Cuantía de la subvención: 120.000,00 €
Investigador responsable: Enrique Guitián Rivera
Número de investigadores participantes: 34

Título del proyecto: Minstrel (Mestrelab INterface for STRucture and Energy computation in the chemical Laboratory): Un sistema computacional de modelización molecular orientado a las industrias farmacéutica y químico-textil (MINSTREL) (2014-CE043).
Entidad financiadora: Xunta de Galicia
Duración, desde: 13/02/2014 hasta: 30/06/2015 Cuantía de la subvención: 93.439,10 €
Investigador responsable: Javier Francisco Sardina López
Número de investigadores participantes: 2

Título del proyecto: Consolidación e estruturación. (GPC) GI-2132 QUÍMICA SUPRAMOLECULAR E NANOTUBOS PEPTÍDICOS QSNTF (2013-PG047) Ref.GPC2013-039.
Entidad financiadora: Consellería de Cultura, Educación e Ordenación Universitaria
Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela
Duración, desde: 15/08/2013 hasta: 31/12/2015 Cuantía de la subvención: 87120 €
Investigador responsable: Juan Ramón Granja Guillán
Número de investigadores participantes: 12

Título del proyecto: Consolidación e estruturación de unidades de investigación competitivas - REDES. (2012-PG208) Ref.CN 2012/314
Entidad financiadora: Consellería de Cultura, Educación e Ordenación Universitaria
Duración, desde: 17/06/2012 hasta: 16/06/2014 Cuantía de la subvención: 120.000,00 €
Investigador responsable: Enrique Guitián Rivera
Número de investigadores participantes: 87

Título del proyecto: Estudio teórico mediante métodos semiclásicos de procesos de transferencia protónica en zeolitas.
Entidad financiadora: Dirección Xeral de I + D (Xunta de Galicia; código 10PXIB209092PR)
Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela
Duración, desde: 10/08/2010 hasta: 30/09/2013 Cuantía de la subvención: 44965 €
Investigador responsable: Antonio Fernández Ramos
Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: Simulaciones de la dinámica de colisión y adsorción de péptidos sobre superficies monocapa auto-organizadas.

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación (CTQ2009-12588)

Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela

Duración, desde: 1/1/2010 hasta: 31/12/2012 Cuantía de la subvención: 60500 €

Investigador responsable: Saulo Vázquez Rodríguez

Número de investigadores participantes: 4

Título del proyecto: Partnership for International Research and Education (PIRE): Simulation of Electronic Non-Adiabatic Dynamics for Reactions with Organic Macromolecules, Liquids, and Surfaces* (<http://pire-europe.chem.ttu.edu/>)

Entidad financiadora: NSF (USA)

Entidades participantes: Texas Tech University, Iowa State University, Yale University, Università di Pisa, Universidad de Santiago de Compostela, y Universität of Wien

Duración, desde: 2006 hasta: 2010 Cuantía de la subvención: 2500000 \$

Investigador responsable: William L. Hase

Número de investigadores participantes: 10

*Este proyecto financia sólo a los participantes norteamericanos. Los europeos se benefician solamente con la incorporación temporal de estudiantes de grado, doctorado y post-doctorado americanos.

Título del proyecto: Simulaciones del procesos de "soft landing" de iones y péptidos sobre superficies monocapa auto-organizadas

Entidad financiadora: Xunta de Galicia (PGDIT07PXIB209072PR)

Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela

Duración, desde: 1/11/2007 hasta: 31/10/2010 Cuantía de la subvención: 70265 €

Investigador responsable: Saulo Vázquez Rodríguez

Número de investigadores participantes: 2

Título del proyecto: Simulaciones dinámicas de la transferencia de energía y descomposición unimolecular en disociaciones inducidas por colisiones y por superficies

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología (CTQ2006-06301/BQU)

Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela

Duración, desde: 1/10/2006 hasta: 30/09/2009 Cuantía de la subvención: 80000 €

Investigador responsable: Emilio Martínez Núñez

Número de investigadores participantes: 4

Título del proyecto: Dinámica de sistemas complejos con un coste computacional razonable: desarrollo de métodos, programas y aplicaciones

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología (BQU2003-01639)

Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela

Duración, desde: 15/11/2003 hasta: 14/11/2006 Cuantía de la subvención: 54800 euros

Investigador responsable: Antonio Fernández Ramos

Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: Estudio de la fotogénesis de la vitamina D₃

Entidad financiadora: Xunta de Galicia (2003/PX199)

Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela

Duración, desde: 21/10/2003 hasta: 20/10/2006 Cuantía de la subvención: 63100 euros

Investigador responsable: Miguel A. Ríos Fernández
Número de investigadores participantes: 4

Título del proyecto: Dinámica clásica de derivados de hidrocarburos sencillos en fase gas
Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología (BQU2000-0462)
Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela
Duración, desde: 20/12/2000 hasta: 20/12/2003 Cuantía de la subvención: 4317600 pts
Investigador responsable: Saulo Vázquez Rodríguez
Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: Desarrollo y extensión de modelos teóricos para el estudio de procesos de transferencia protónica
Entidad financiadora: Xunta de Galicia (CICETGA) Ref: XUGA20903A98
Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela
Duración, desde: 1/1/1998 hasta: 31/12/2000 Cuantía de la subvención: 5665000 pts
Investigador responsable: Jesús Rodríguez Otero
Número de investigadores participantes: 6

Título del proyecto: Diseño de un modelo estructural para las interacciones entre la hormona de la vitamina D y su receptor".
Entidad financiadora: Xunta de Galicia (XUGA20903A91, D.O.G. 13-01-1992).
Duración, desde: 01/01/1992 hasta: 31/12/1994 Cuantía de la subvención: 3900000 pts
Investigador responsable: S.A. Vázquez Rodríguez.
Número de investigadores participantes: 4

Título del proyecto: "Mecánica molecular de β -lactamas. Parametrización de un campo de fuerzas para MM3 y aplicación a cefalosporinas".
Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia (DGICYT proyecto nº PB91-0543-C02-02, B.O.E. del 19-10-1991).
Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela
Duración, desde: 22/06/1992 hasta: 21/06/1994 Cuantía de la subvención: 2500000 pts
Investigador responsable: S.A. Vázquez Rodríguez.
Número de investigadores participantes: 2

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Publicaciones o Documentos Científico-Técnicos

(CLAVE: L = libro completo, CL = capítulo de libro, A = artículo, R = "review", E = editor,
S = Documento Científico-Técnico restringido.)

Autores (p.o. de firma):

Título:

Ref. revista :

Libro

Clave: A

Volumen:

Páginas, inicial:

final:

Fecha:

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

Autores/as (p.o. de firma): S. A. Vázquez, Xose L. Otero and E. Martínez-Núñez.

Título: "A Trajectory-Based Method to Explore Reaction Mechanisms"

Ref.: Molecules: Vol. 23, Pags. 3156/1-3156/21, Año 2018.

Autores/as (p.o. de firma): A. Rodríguez, R. Rodríguez-Fernández, S. A. Vázquez, G. L. Barnes, J. J. P. Stewart and E. Martínez-Núñez.

Título: "tsscads2018: A code for automated discovery of chemical reaction mechanisms and solving the kinetics"

Ref.: J. Comput. Chem.: Vol. 39, Pags. 1922-1930, Año 2018.

Autores/as (p.o. de firma): Ferro-Costas, David; Martínez-Núñez, Emilio; Rodríguez-Otero, Jesús; Cabaleiro-Lago, Enrique; Estevez, Carlos M.; Fernández, Berta; Fernández-Ramos, Antonio; **Vázquez, Saulo A.**

Título: "Influence of Multiple Conformations and Paths on Rate Constants and Product Branching Ratios. Thermal Decomposition of 1-Propanol Radicals"

Ref.: J. Phys. Chem. A: Vol. 122(21), Pags. 4790-4800, Año 2018.

Autores/as (p.o. de firma): Wilhelm, Michael J.; Martínez-Núñez, Emilio; González-Vázquez, Jesús; **Vázquez, Saulo A.**; Smith, Jonathan M.; Dai, Hai-Lung.

Título: "Is photolytic production a viable source of HCN and HNC in astrophysical environments? A laboratory-based feasibility study of methyl cyanofornate"

Ref.: Astrophys. J.: Vol. 849, Pags. 15/1-15/12, Año 2017.

Autores/as (p.o. de firma): Spezia R, Martínez-Núñez E, **Vázquez S**, Hase WL.

Título: "Theoretical and computational studies of non-equilibrium and non-statistical dynamics in the gas phase, in the condensed phase and at interfaces"

Ref.: Phil. Trans. R. Soc. A: Vol. 375, Pags. 20170035, Año 2017.

Autores/as (p.o. de firma): J. A. Varela, S. A. Vázquez and E. Martínez-Núñez

Título: "An Automated Method to Find Reaction Mechanisms and Solve the Kinetics in Organometallic Catalysis"

Ref.: Chem. Sci, Vol. 8, Pags 3843-3851 Año 2017.

Autores/as (p.o. de firma): Roberto Rodríguez-Fernández, Francisco B. Pereira, Jorge M. C. Marques, Emilio Martínez-Núñez and **Saulo A. Vázquez**

Título: "GAFit: a general-purpose, user-friendly program for fitting potential energy surfaces"

Ref.: Comput. Physics Comm., Vol. 217, Pags. 89-98, Año 2017.

Autores/as (p.o. de firma): Wilhelm, Michael J.; Martínez-Núñez, Emilio; González-Vázquez, Jesús; **Vázquez, Saulo A.**; Smith, Jonathan M.; Dai, Hai-Lung

Título: "Predissociation of methyl cyanofornate: the HCN and HNC channels"

Ref.: arXiv.org, e-Print Archive, Pags. 1-10, Año 2016.

Autores/as (p.o. de firma): Pérez-Soto, Raul; **Vázquez, Saulo A.**; Martínez-Núñez, Emilio

Título: "Photodissociation of acryloyl chloride at 193 nm: interpretation of the product energy distributions, and new elimination pathways"

Ref.: Physical Chemistry and Chemical Physics, Vol. 18(6), Pags. 5019-5026, Año 2016.

Autores/as (p.o. de firma): Casas, José S.; Castano, M. Victoria; Couce, María D.; Sánchez, Agustín; Sordo, José; Torres, M. Dolores; **Vázquez, Saulo A.**; Vázquez-López, Ezequiel M.

Título: "Relevance of weak intermolecular forces on the supramolecular structure of free or DMSO solvated 5-(4-X-benzylidene)rhodanines (X = F, Cl, Br, I)"

Ref.: J. Mol. Struct., Vol. 1120, Pags. 100-114, Año 2016.

Autores/as (p.o. de firma): Calvelo, Martín; **Vázquez, Saulo**; García-Fandino, Rebeca

Título: "Molecular dynamics simulations for designing biomimetic pores based on internally functionalized self-assembling α,γ -peptide nanotubes"

Ref.: Physical Chemistry and Chemical Physics, Vol. 17(43), Pags. 28586-28601, Año 2015.

Autores/as (p.o. de firma): **Saulo A. Vázquez**, Emilio Martínez-Núñez

Título: "HCN elimination from vinyl cyanide: product energy partitioning, the role of hydrogen-deuterium exchange reactions and a new pathway"

Ref.: Physical Chemistry Chemical Physics, Vol. 17(10), Pags. 6948-6955, Año 2015.

Autores/as (p.o. de firma): Preston, Thomas J.; Dunning, Greg T.; Orr-Ewing, Andrew J.; **Vázquez, Saulo A.**

Título: "Direct and Indirect Hydrogen Abstraction in Cl + Alkene Reactions"

Ref.: Journal of Physical Chemistry A, Vol. 118, Pags. 5595-5607, Año 2014.

Autores/as (p.o. de firma): Jonathan Booth, **Saulo Vázquez**, Emilio Martínez-Núñez, Alison Marks, Jeff Rodgers, David R. Glowacki, Dmitrii V. Shalashilin

Título: "Recent applications of boxed molecular dynamics: a simple multiscale technique for atomistic simulations"

Ref.: Philosophical Transactions of the Royal Society A, Vol. 372, Pags. 20130384, Año 2014.

Autores/as (p.o. de firma): Subha Pratihari, Swapnil C. Kohale, **Saulo A. Vázquez**, William L. Hase

Título: "Intermolecular Potential for Binding of Protonated Peptide Ions with Perfluorinated Hydrocarbon Surfaces"

Ref.: Journal of Physical Chemistry B, Vol. 118, Pags. 5577-5588, Año 2014.

Autores/as (p.o. de firma): Juan J. Nogueira, Yang Wang, Fernando Martín, Manuel Alcamí, David R. Glowacki, Dmitrii V. Shalashilin, Emanuele Paci, Antonio Fernández-Ramos, William L. Hase, Emilio Martínez-Núñez, **Saulo A. Vázquez**
Título: "Unraveling the Factors That Control Soft Landing of Small Silyl Ions on Fluorinated Self-Assembled Monolayers "
Ref.: Journal of Physical Chemistry C, Vol. 118, Pags. 10159–10169, Año 2014.

Autores/as (p.o. de firma): Roberto Rodríguez-Fernández; **Saulo A. Vázquez;** Emilio Martínez-Núñez.
Título: "Collision-induced dissociation mechanisms of [Li(uracil)]⁺"
Ref.: Physical Chemistry and Chemical Physics, Vol. 15 (20), Pags. 7628-7637, Año 2013.

Autores/as (p.o. de firma): Teresa Cusati; Giovanni Granucci; Emilio Martínez-Núñez; Francesca Martini; Maurizio Persico; **Saulo A. Vázquez.**
Título: "Semiempirical Hamiltonian for simulation of azobenzene photochemistry"
Ref.: Journal of Physical Chemistry A, Vol. 116, Pags. 98-110, Año 2012.

Autores/as (p.o. de firma): Juan J Nogueira; Antonio Sanchez-Coronilla; Jorge M Marques; William L Hase; Emilio Martínez-Núñez; **Saulo A. Vázquez.**
Título: "Intermolecular potentials for simulations of collisions of SiNCS⁺ and (CH₃)₂SiNCS⁺ ions with fluorinated self-assembled monolayers"
Ref.: Chemical Physics, Vol. 399, Pags. 193-204 Año 2012

Autores/as (p.o. de firma): Nogueira, Juan; Homayoon, Zahra; **Vázquez, Saulo;** Martínez-Núñez, Emilio.
Título: "Chemical Dynamics Study of NO Scattering from a Perfluorinated Self-Assembled Monolayer"
Ref.: Journal of Physical Chemistry C, Vol. 115, Pags. 23817-23830 Año 2011.

Autores/as (p.o. de firma): Zahra Homayoon, **Saulo A. Vázquez,** Roberto Rodríguez-Fernández, Emilio Martínez-Núñez.
Título: "Ab Initio and RRKM Study of the HCN/HNC Elimination Channels from Vinyl Cyanide"
Ref.: Journal of Physical Chemistry A, Vol. 115(6), Pags. 979-985, Año 2011.

Autores/as (p.o. de firma): José S. Casas, Noelia Casanova, María S. García-Tasende, Agustín Sánchez, José Sordo, Ángeles Touceda, **Saulo Vázquez.**
Título: "Back to the Coordination Modes of the Thiosemicarbazone Chain: New Insights from Diorganolead(IV) and Lead(II) Derivatives of Isatin-3-thiosemicarbazone"
Ref.: European Journal of Inorganic Chemistry, Vol. 2010 (31), Pags. 4992–5004, Año 2010.

Autores/as (p.o. de firma): Nogueira, Juan; **Vázquez, Saulo;** Lourderaj, Upakarasamy; Hase, William; Martínez-Núñez, Emilio.
Título: "Chemical Dynamics Simulations of CO₂ in the Ground and First Excited Bend States Colliding with a Perfluorinated Self-Assembled Monolayer"
Ref.: Journal of Physical Chemistry C, Vol. 114(43), Pags. 18455-18464, Año 2010.

Autores/as (p.o. de firma): García-Fandiño, R.; Castedo, L.; Granja, J.R.; **Vázquez, S.A.**
Título: "Interaction and Dimerization Energies in Methyl-Blocked α,γ -Peptide Nanotube Segments"
Ref.: Journal of Physical Chemistry B, Vol. 114(15), Pags. 4973-4983, Año 2010.

Autores/as (p.o. de firma): Nogueira, Juan J.; Vázquez, Saulo A.; Mazyar, Oleg A.; Hase, William L.; Perkins, Bradford G., Jr.; Nesbitt, David J.; Martínez-Núñez, Emilio.

Título: "Dynamics of CO₂ Scattering off a Perfluorinated Self-Assembled Monolayer. Influence of the Incident Collision Energy, Mass Effects, and Use of Different Surface Models"

Ref.: Journal of Physical Chemistry A , Vol. 113(16), Pags. 3850-3865, Año 2009.

Autores/as (p.o. de firma): Nogueira, J. J.; Martínez-Núñez, E.; Vázquez, S. A.

Título: "Improved United-Atom Models for Perfluorinated Self-Assembled Monolayers"

Ref.: Journal of Physical Chemistry C, Vol. 113(8), Pags. 3300-3312, Año 2009.

Autores/as (p.o. de firma): Chang, Chih-Min; Huang, Yu-Hsuan; Liu, Suet-Yi; Lee, Yuan-Pern; Pombar-Perez, Marta; Martínez-Núñez, Emilio; Vázquez, Saulo A

Título: "Internal energy of HCl upon photolysis of 2-chloropropene at 193 nm investigated with time-resolved Fourier-transform spectroscopy and quasiclassical trajectories"

Ref.: Journal of Chemical Physics , Vol. 129(22), Pags. 224301/1-224301/11; Año 2008.

Autores/as (p.o. de firma): Vázquez, Saulo A.; Martínez-Núñez, Emilio.

Título: "Translational energy distributions in the photodissociation of fluorobenzene"

Ref.: Chemical Physics , Vol. 349(1-3), Pags.219-225; Año 2008.

Autores/as (p.o. de firma): Vázquez, Saulo A.; Morris, John R.; Rahaman, Asif; Mazyar, Oleg A.; Vayner, Grigoriy; Addepalli, Srirangam V.; Hase, William L.; Martínez-Núñez, Emilio.

Título: Inelastic Scattering Dynamics of Ar from a Perfluorinated Self-Assembled Monolayer Surface.

Ref.: Journal of Physical Chemistry A , Vol. 111(49), Pags.12785-12794; Año 2007.

Autores/as (p.o. de firma): J. S. Casas, E. E. Castellano, J. Ellena, M. S. García-Tasende, A. Sánchez, J. Sordo, A. Touceda, S. Vázquez

Título: "New lead(II) complexes with N,S-ligands, including a lead pyrazolonate with unusual packing flexibility"

Ref.: POLYHEDRON; Vol. 26; Pags. 4228-4238; Año 2007

Autores/as (p.o. de firma): A. Fernández-Ramos, E. Martínez-Núñez, S. A. Vázquez, M. A. Ríos, C. M. Estévez, M. Merchán y L. Serrano-Andrés

Título: "Hydrogen transfer vs. proton transfer in 7-hydroxy-quinoline-(NH₃)₃. A CASSCF/CASPT2 study"

Ref.: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A; Vol. 111 (26); Pags. 5907-5912; Año 2007

Autores/as (p.o. de firma): S. H. Mousavipour, A. Fernández-Ramos, R. Meana-Pañeda, Emilio Martínez-Núñez, S. A. Vázquez, M. A. Ríos

Título: "Direct-Dynamics VTST Study of the [1,7] Hydrogen Shift in 7-Methylocta-1,3(Z),5(Z)-triene. A Model System for the Hydrogen Transfer Reaction in Previtamin D₃"

Ref.: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A; Vol. 111; Pags. 719-725; Año 2007

Autores/as (p.o. de firma): T. Tarrazo-Antelo, E. Martínez-Núñez, S. A. Vázquez

Título: "Ab initio and RRKM study of the elimination of HF and HCl from chlorofluoroethylene"

Ref.: CHEMICAL PHYSICS LETTERS; Vol. 435; Pags. 176-181; Año 2007

Autores (p.o. de firma): T. L. Sordo, J. M. Ugalde, S. A. Vázquez

Título: Foundations of Statistical Mechanics

Ref. Libro: Theoretical and Computational Chemistry: Foundations, Methods and Techniques
Clave: ISBN: 978-84-8021-615-9 Volumen: Páginas, inicial: 95 final: 154 Fecha: 2007
Editorial (si libro): Publicacions de la Universitat Jaume I; Editores: Juan Andrés y Joan Bertran
Lugar de publicación: Castelló de la Plana, España

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, S. Vázquez
Título: "Rotational distributions of HBr in the photodissociation of vinyl bromide at 193nm: An investigation by direct quasiclassical trajectory calculations"
Ref.: CHEMICAL PHYSICS LETTERS; Vol. 425; Pags. 22-27; Año 2006

Autores/as (p.o. de firma): J. M. C. Marques, E. Martínez-Núñez, S. A. Vázquez
Título: "Trajectory Dynamics Study of Collision-Induced Dissociation of the Ar + CH₄ Reaction at Hyperthermal Conditions: Vibrational Excitation and Isotope Substitution."
Ref.: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A; Vol. 110; Pags. 7113-7121; Año 2006

Autores/as (p.o. de firma): R. García, J. M. Seco, S. A. Vázquez, E. Quiñoá, R. Riguera
Título: "Role of Barium(II) in the determination of the Absolute Configuration of chiral amines by ¹H NMR spectroscopy."
Ref.: JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY; Vol. 71; Pags. 1119-1130; Año 2006

Autores/as (p.o. de firma): E. Martinez-Nunez, S. A. Vazquez, F. J. Aoiz, J. F. Castillo
Título: "Quasiclassical Trajectory Study of the Collision-Induced Dissociation Dynamics of Ar + CH₃SH⁺ Using an Ab Initio Interpolated Potential Energy Surface."
Ref.: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A; Vol. 110; Pags. 1225–1231; Año 2006

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, S. A. Vázquez, J. M. C. Marques, M. Xue, W. L. Hase
Título: "Quasiclassical dynamics simulation of the collision-induced dissociation of Cr(CO)₆⁺ with Xe."
Ref.: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS; Vol. 123; Pags. 154311/1-154311/9; Año 2005

Autores/as (p.o. de firma): J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, E. Martinez-Nunez, A. Fernandez-Ramos y S. Vazquez
Título: "Quasiclassical Trajectory Study of the F + CH₄ Reaction Dynamics on a Dual-Level Interpolated Potential Energy Surface"
Ref.: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A; Vol. 109; Pags. 8459–8470; Año 2005

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, S. Vázquez, G. Granucci, M. Persico y C. Estévez
Título: "Photodissociation of formic acid: A trajectory surface hopping study"
Ref.: CHEMICAL PHYSICS LETTERS; Vol. 412; Pags. 35–40; Año 2005

Autores/as (p.o. de firma): Marques, J. M. C.; Martinez-Nunez, E.; Fernandez-Ramos, A.; Vazquez, S. A.;
Título: "Trajectory Dynamics Study of the Ar + CH₄ Dissociation Reaction at High Temperatures: the Importance of Zero-Point-Energy Effects"
Ref.: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A; Vol. 109; Pags. 5415–5423; Año 2005

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, S. A. Vázquez, I. Borges Jr., A. B. Rocha, C. M. Estévez, J. F. Castillo y F. J. Aoiz

Título: On the Conformational Memory in the Photodissociation of Formic Acid

Ref.: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A; Vol. 109; Pags. 2836–2839; Año 2005

Autores/as (p.o. de firma): I. Borges, Jr., A.B. Rocha, E. Martínez-Núñez, S. Vázquez

Título: "Theoretical investigations on the vibronic coupling between the electronic states S0 and S1 of formic acid including the photodissociation at 248 nm"

Ref.: CHEMICAL PHYSICS LETTERS; Vol. 407; Pags. 166–170; Año 2005

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez

Título: "Quasiclassical trajectory calculations on the photodissociation of CF₂CHCl at 193 nm: product energy distributions for the HF and HCl eliminations

Ref.: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS; Vol. 122; Pags. 104316/1-104316/7; Año 2005

Autores/as (p.o. de firma): J. González-Vázquez, E. Martínez-Núñez, S. A. Vázquez, J. Santamaría, L. Bañares

Título: "RRKM and direct MP2/6-31G(d,p) quasiclassical trajectory study of the H₂ elimination in the photodissociation of vinyl chloride at 193 nm"

Ref.: CHEMICAL PHYSICS LETTERS; Vol. 396; Pags. 442–447; Año 2004

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez

Título: "Rovibrational distributions of HF in the photodissociation of vinyl fluoride at 193 nm: A direct MP2 quasiclassical trajectory study"

Ref.: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS; Vol. 121; Pags. 5179–5182; Año 2004

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, S. A. Vázquez y J. M. C. Marques

Título: "Quasiclassical trajectory study of the collision-induced dissociation of CH₃SH⁺ + Ar"

Ref.: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS; Vol. 121; Pags. 2571–2577; Año 2004

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, S. A. Vázquez, F. J. Aoiz, L. Bañares y J. F. Castillo

Título: "Further investigation of the HCl elimination in the photodissociation of vinyl chloride at 193 nm: a direct MP2/6-31G(d,p) trajectory study"

Ref.: CHEMICAL PHYSICS LETTERS; Vol. 386; Pags. 225–232; Año 2004

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, M. N. D. S. Cordeiro, S. A. Vázquez, F. J. Aoiz y L. Bañares

Título: "A direct classical trajectory study of the acetone photodissociation on the triplet surface"

Ref.: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS; Vol. 119; Pags. 10618–10625; Año 2003

Autores/as (p.o. de firma): M. N. D. S. Cordeiro, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos y S. A. Vázquez

Título: "Direct dynamics study of the photodissociation of triplet propanal at threshold"

Ref.: CHEMICAL PHYSICS LETTERS; Vol. 381; Pags. 37–44; Año 2003

Autores/as (p.o. de firma): T.-S. Ho, H. Rabitz, F. J. Aoiz, L. Bañares, S. A. Vázquez and L. B. Harding

Título: "Implementation of a fast analytic ground state potential energy surface for the N(2D)+H₂ reaction"

Ref.: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS; Vol. 119; Pags. 3063–3070; Año 2003

Autores/as (p.o. de firma): L. Bañares, F. J. Aoiz, **S. A. Vázquez**, T.-S. Ho, H. Rabitz
Título: "Quasi-classical trajectory calculations on a fast analytic potential energy surface for the C(1D)+H₂ reaction"
Ref.: CHEMICAL PHYSICS LETTERS; Vol. 374; Pags. 243–251; Año 2003

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, **S. A. Vázquez**, F. J. Aoiz y L. Bañares
Título: "A direct classical trajectory study of HCl elimination from the 193 nm photodissociation of vinyl chloride"
Ref.: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A; Vol. 107; Pags. 7611–7618; Año 2003

Autores/as (p.o. de firma): M. N. D. S. Cordeiro, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos y **S. A. Vázquez**
Título: "A direct DFT dynamics study of the photodissociation of triplet acetaldehyde"
Ref.: CHEMICAL PHYSICS LETTERS; Vol. 375; Pags. 591–597; Año 2003

Autores/as (p.o. de firma): **S. A. Vázquez**, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Santamaría, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos
Título: "Quasi-classical trajectory study of H₂ elimination in the photodissociation of difluoroethylenes at 193 nm"
Ref.: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS; Vol. 118; Pags. 6941–6945; Año 2003

Autores/as (p.o. de firma): A. Fernández-Ramos, E. Martínez-Núñez, J. M. C. Marques y **S. A. Vázquez**
Título: "Dynamics calculations for the Cl + C₂H₆ abstraction reaction. Thermal rate constants and kinetic isotope effects"
Ref.: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS; Vol. 118; Pags. 6280–6288; Año 2003

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, A. Peña-Gallego y **S. A. Vázquez**
Título: "Product energy distributions from ethylene photodissociation at 193 nm. A DFT direct classical trajectory study"
Ref.: CHEMICAL PHYSICS LETTERS; Vol. 369; Pags. 1–7; Año 2003

Autores (p.o. de firma): J. González-Vázquez, A. Fernández-Ramos, E. Martínez-Núñez y **S. A. Vázquez**
Título: "Dissociation of difluoroethylenes. I. Global potential energy surface, RRKM and VTST calculations"
Ref. revista: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A; Vol. 107; Pags. 1389–1397 ; Año: 2003
Clave: A

Autores (p.o. de firma): J. González-Vázquez, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, y **S. A. Vázquez**
Título: "Dissociation of difluoroethylenes. II. Direct classical trajectory study of the HF elimination from 1,2-difluoroethylene"
Ref. revista: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A ; Vol. 107; Pags: 1398–1404; Año: 2003
Clave: A

Autores (p.o. de firma): J. R. Flores, E. Martínez-Núñez, S. A. Vázquez y F. J. Gómez
Título: "A theoretical study of the dynamics of the S+cC₃H reaction"

Ref. revista: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A Libro
Clave: A **Volumen:** 106 **Páginas, inicial:** 8811 **final:** 8819 **Fecha:** 2002

Autores (p.o. de firma): J. Rodríguez-Otero, E. Martínez-Núñez, A. Peña-Gallego y S. A. Vázquez
Título: "The role of aromaticity in the planarity of lumiflavin"

Ref. revista: JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY Libro
Clave: A Volumen: 67 Páginas, inicial: 6347 final: 6352 Fecha: 2002

Autores (p.o. de firma): Garcia, Rosa; Seco, Jose M.; Vazquez, Saulo A.; Quinoa, Emilio; Riguera, Ricardo
Título: "Absolute Configuration of Secondary Alcohols by ¹H NMR: In Situ Complexation of α -Methoxyphenylacetic Acid Esters with Barium(II)"

Ref. revista: JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY Libro
Clave: A Volumen: 67 Páginas, inicial: 4579 final: 4589 Fecha: 2002

Autores (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, S. A. Vázquez y M. A. Ríos
Título: "Rate constants and kinetic isotope effects for Cl+CH₄-->ClH+CH₃. A comparison between LSC-IVR and statistical theories"

Ref. revista: CHEMICAL PHYSICS LETTERS Libro
Clave: A Volumen: 360 Páginas, inicial: 59 final: 64 Fecha: 2002

Autores/as (p.o. de firma): A. Peña-Gallego, E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Dissociation of ethylene and several deuterated derivatives at 157 and 193 nm by direct classical trajectories"
Clave: A Revista: CHEMICAL PHYSICS LETTERS;
Vol. 353; Pags. 418–425; Año 2002

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, S. A. Vázquez y A. J. C. Varandas
Título: "Unimolecular reaction dynamics of HSO. Further analysis of the influence of different barrier samplings on the product energy distributions"
Clave: A Revista: PHYSICAL CHEMISTRY AND CHEMICAL PHYSICS
Vol. 4; Pags. 279–287; Año 2002

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Dinámica de reacciones unimoleculares. Desviaciones del comportamiento estadístico"
Clave: A Revista.: QUIMICA NOVA;
Vol. 25; Pags. 579–588; Año 2002

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, I. Borges Jr. y S. A. Vázquez
Título: "Rate constants for the CH₃O + NO → CH₃ONO* reaction by classical trajectory and canonical variational transition state theory calculations"
Clave: A Revista: JOURNAL OF PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY;
Vol. 15; Pags. 123–129; Año 2002

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, J. M. C. Marques y S. A. Vázquez
Título: "A direct dynamics study of the H₂ elimination from 2,5-dihydrofuran"
Clave A Revista.: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS;
Vol. 115; Pags. 7872–7880; Año 2001

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, C. M. Estévez, J. R. Flores y S. A. Vázquez
Título: "Product energy distributions in the HF elimination from 1,1-difluoroethylene. A direct dynamics study"
Clave A Revista: CHEMICAL PHYSICS LETTERS;
Vol. 348; Pags. 81–88; Año 2001

Autores/as (p.o. de firma): A. Fernández-Ramos, E. Martínez-Núñez, Z. Smedarchina y S. A. Vázquez
Título: "Rate constants and isotope effects for the $\text{CH}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}$ reaction by an approximate semiclassical-initial value representation method"
Clave A Revista: CHEMICAL PHYSICS LETTERS;
Vol. 241; Pags. 351–357; Año 2001

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Ab initio calculations on the vinyl fluoride fragmentation reactions"
Clave: A Revista: STRUCTURAL CHEMISTRY;
Vol. 12; Pags. 95–100; Año 2001

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Anharmonic quasi-classical barrier sampling in trajectory calculations and their influence on the computed product energy distributions"
Clave: A Revista: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A;
Vol. 105; Pags. 4808–4813; Año 2001

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, A. Peña-Gallego, y S. A. Vázquez
Título: "The unimolecular dissociation of the propionyl radical. A classical dynamics study"
Clave: A Revista: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS;
Vol. 114; Pags. 3546–3553; Año 2001

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Three-center vs four-center HF elimination from vinyl fluoride. A classical dynamics study"
Clave: A Revista: CHEMICAL PHYSICS LETTERS;
Vol. 332; Pags. 583–590; Año 2000

Autores/as (p.o. de firma): A. Peña-Gallego, E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Dynamics of the cis-trans isomerization and Cl–O dissociation of chlorine nitrite. A statistical and classical trajectory study"
Clave: A Revista: PHYSICAL CHEMISTRY AND CHEMICAL PHYSICS;
Vol. 2; Pags. 5393–5299; Año 2000

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, A. Peña-Gallego, R. Rodríguez-Fernández y S. A. Vázquez
Título: "Direct dynamics simulation of methanethiol decomposition"
Clave: A Revista: CHEMICAL PHYSICS LETTERS;
Vol. 324; Pags. 88–94; Año 2000

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. Vázquez-Rodríguez

Título: "Ab initio and RRKM calculations on the dissociation of the propionyl radical"
Clave: A Revista: JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE;
Vol. 556; Pags. 123–129; Año 2000. Special issue in honor to Prof. Lou Allinger

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Rotational effects in the unimolecular dissociation of the acetyl radical"
Clave: A Revista.: CHEMICAL PHYSICS LETTERS;
Vol. 316; Pags: 471–476; Año 2000

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Unimolecular decomposition of CH_3SH^+ : an ab initio and RRKM study"
Clave: A Revista.: JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE (THEOCHEM);
Vol. 505; Pags. 109–116; Año 2000

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Further dynamical studies of the dissociation and elimination reactions of methyl nitrite"
Clave: A Revista: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS;
Vol. 111; Pags. 10501–10510; Año 1999

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Classical dynamics study of the unimolecular decomposition of CH_3SH^+ "
Clave: A Revista: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A;
Vol. 103; Pags. 9783–9793; Año 1999

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "A statistical study of the methyl nitrite isomerization reaction. Inverse secondary isotope effects"
Clave: A Revista: CHEMICAL PHYSICS LETTERS;
Vol. 310; Pags. 209–214; Año 1999

Autores/as (p.o. de firma): A. Peña-Gallego, E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Nonstatistical effects in the unimolecular dissociation of the acetyl radical"
Clave: A Revista: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS;
Vol. 110; Pags. 11323–11333; Año 1999

Autores/as (p.o. de firma): A. Peña-Gallego, E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Classical trajectory study of the cis-trans isomerization and F–O dissociation of FONO"
Clave: A Revista: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A;
Vol. 102; Pags. 8708–8715; Año 1998

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Dynamical study of the dissociation and elimination channels in the decomposition of methyl nitrite"
Clave: A Revista: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS;
Vol. 109; Pags. 8907–8919; Año 1998

Autores/as (p.o. de firma): A. Fernández-Ramos, E. Martínez-Núñez, M. A. Ríos, J. Rodríguez-Otero, S. A. Vázquez, y C. M. Estévez

Título: "Direct dynamics study of the dissociation and elimination channels in the thermal decomposition of methyl nitrite"

Clave: A Revista: JOURNAL OF AMERICAN CHEMICAL SOCIETY;

Vol. 120; Pags. 7594–7601; Año 1998

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez

Título: "Further studies of methyl nitrite cis-trans isomerization"

Clave: A Revista: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS;

Vol. 107; Pags. 5393–5405; Año 1997

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, S. A. Vázquez, y R. A. Mosquera

Título: "Conformational analysis of model compounds of Vitamin D by theoretical calculations"

Clave: A Revista: JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY;

Vol. 18; Pags. 1647–1655; Año 1997

Autores: B. Fernández, S.A. Vázquez y M.A. Ríos.

Título: "A Theoretical Study of 1-Amino-3-Butene and 3-Butene-1-Thiol".

Clave: A Revista: STRUCTURAL CHEMISTRY

Vol: 3, Pags 225-229. Año 1992

Autores: S.A. Vázquez, M.A. Ríos y L. Carballeira.

Título: "A Molecular Mechanics Study of Conformational Trends in Simple Alcohols and Ethers. Part II: Intramolecular Hydrogen Bonding."

Clave: A Revista: JOURNAL COMPUTATIONAL CHEMISTRY

Vol: 13, Pags: 851-859. Año 1992

Autores: B. Fernández, S.A. Vázquez y M.A. Ríos

Título: "Theoretical Study of some Nitriles: Intramolecular Hydrogen Bonds and Anomeric Effect"

Clave: A Revista: JOURNAL COMPUTATIONAL CHEMISTRY

Vol: 13, Pags 722-729. Año 1992

Autores: S.A. Vázquez, J.S. Andrews, C.W. Murray, R.D. Amos y N.C. Handy.

Título: "An Investigation of the Three Oxidation Forms of Lumiflavin"

Clave: A Revista: JOURNAL CHEMICAL SOCIETY PERKIN TRANS 2

Vol: (6) Pags 889-895. Año 1992

Autores: N.L. Allinger, S.A. Vázquez y K. Chen

Título: "Molecular Mechanics Calculations (MM3) on Conjugated Ketones"

Clave: A Revista: JOURNAL MOLECULAR STRUCTURE (TEOCHEM)

Vol: 260, Pags 161-178. Año 1992

Autores: S.A. Vázquez, M.A. Ríos y L. Carballeira.

Título: "A Molecular Mechanics Study of Conformational Trends in Simple Alcohols and Ethers. Part I: Geometric Trends."

Clave: A Revista: JOURNAL COMPUTATIONAL CHEMISTRY

Vol: 12, Pags: 872-879. Año 1991

Autores: L. Carballeira, B. Fernández, R.A. Mosquera, M.A. Ríos, J. Rodríguez y S. Vázquez
Título: "An "Ab Initio" Gradient Study of Polyazacyclohexanes"
Clave: A Revista: JOURNAL MOLECULAR STRUCTURE (TEOCHEM)
Vol: 205, Pags: 223-234. Año 1990

Autores: R.A. Mosquera, S. Vázquez, M.A. Ríos y C. Van Alsenoy
Título: "An "Ab Initio" Gradient Study of Ethylhydrazine".
Clave: A Revista: JOURNAL MOLECULAR STRUCTURE (TEOCHEM)
Vol: 206, Pags: 49-66. Año 1990

Autores: R.A. Mosquera, S. Vázquez, M.A. Ríos y C.A. Van Alsenoy
Título: "An Ab-Initio Gradient Study of Trimethylhydrazine"
Clave: A Revista: JOURNAL MOLECULAR STRUCTURE (TEOCHEM)
Vol: 184 Pags 311-322. Año 1989

Autores: S. Vázquez, R.A. Mosquera, M.A. Ríos y C.A. Van Alsenoy
Título: "Ab-Initio Gradient Optimized Molecular Geometry and Conformational Analysis of 1,2-Propanediol at the 4-21G Level"
Clave: A Revista: JOURNAL MOLECULAR STRUCTURE (TEOCHEM)
Vol: 184, Pags 323-342. Año 1989

Autores: S. Vázquez, R.A. Mosquera, M.A. Ríos y C.A. Van Alsenoy
Título: "Ab-Initio Optimized Molecular Geometry and Conformational Analysis of 2-Methoxyethanol at the 4-21G Level"
Clave: A Revista: JOURNAL MOLECULAR STRUCTURE (TEOCHEM)
Vol: 95, Pags: 95-104. Año 1989

Autores: B. Fernández, R.A. Mosquera, M.A. Ríos y S. Vázquez
Título: "Geometrical Trends and Rotational Constants of 1-fluoro-2-propanol and 2-fluoropropanol by "ab initio" calculations".
Clave: A Revista: TETRAHEDRON COMPUTER METHODOLOGY
Vol: 2, Pags: 85-92. Año 1989

Autores: S. Vázquez, R.A. Mosquera, M.A. Ríos y C.A. Van Alsenoy
Título: "Ab Initio-Gradient Optimized Molecular Geometry and Conformational Analysis of 1,3-Propanediol at the 4-21G level"
Clave: A Revista: JOURNAL MOLECULAR STRUCTURE (TEOCHEM)
Vol: 181 Pags: 149-167 Año 1988

Autores: L. Carballeira, M.A. Ríos y S.A. Vázquez
Título: "Estructura y Conformación de Compuestos Dihidro aromáticos. Estudio por Mecánica Molecular deDihidrofenantrenos".
Clave: A Revista: ANALES DE QUÍMICA
Vol: 82 Pags: 462-467 Año: 1986.

Autores: F.J. Sardina, E. Quiñoá, L. Castedo, R. Riguera, R.A. Mosquera y S. Vázquez

Título: "Complete Structural Analysis of Cyclic Polyhalogenated Monoterpenes. A Force Field-2D NMR Study"
Clave: A Revista: JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY
Vol: 51 Pags: 4970-4973. Año 1986

Autores: L. Carballeira, P. Pérez Herraiz, M.A. Ríos y S. Vázquez.
Título: "Estudio Conformacional de Dialquilacetamidas por Mecánica Molecular".
Clave: A Revista: STUDIA CHEMICA
Vol: 11, Pags : 645-650 Año 1986

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Participación en contratos de I+D de especial relevancia con Empresas y/o Administraciones
(nacionales y/o internacionales)

Título del contrato/proyecto:

Tipo de contrato:

Empresa/Administración financiadora:

Entidades participantes:

Duración, desde: hasta:

Investigador responsable:

Número de investigadores participantes:

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO:

Título del contrato/proyecto:

Tipo de contrato:

Empresa/Administración financiadora:

Entidades participantes:

Duración, desde: hasta:

Investigador responsable:

Número de investigadores participantes:

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO:

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Patentes y Modelos de utilidad

Inventores (p.o. de firma):

Título:

N. de solicitud:

País de prioridad:

Fecha de prioridad:

Entidad titular:

Países a los que se ha extendido:

Empresa/s que la están explotando:

Inventores (p.o. de firma):

Título:

N. de solicitud:

País de prioridad:

Fecha de prioridad:

Entidad titular:

Países a los que se ha extendido:

Empresa/s que la están explotando:

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Estancias en Centros extranjeros (estancias continuadas superiores a un mes)

CLAVE: D = doctorado, P = postdoctoral, I = invitado, C = contratado, O = otras (especificar).

Centro: Departamento de Química
Localidad: Amberes País Bélgica Fecha: 19/1/87 Duración (semanas): 8
Tema: Cálculos ab initio en éteres y alcoholes
Clave: D

Centro: Departamento de Química
Localidad: Amberes País Bélgica Fecha: 9/11/88 Duración (semanas): 8
Tema: Cálculos ab initio en éteres y alcoholes
Clave: P

Centro: Departamento de Química
Localidad: Georgia País USA Fecha: 10/5/89 Duración (semanas): 24
Tema: Desarrollo de un campo de fuerzas de mecánica molecular para aldehidos y cetonas conjugadas.
Clave: P

Centro: Departamento de Química
Localidad: Cambridge País Inglaterra Fecha: 28/2/90 Duración (semanas): 34
Tema: Aplicación de un método directo para los cálculos ab initio de radicales.
Clave: P

Centro: Departamento de Química
Localidad: Cambridge País Inglaterra Fecha: 9/7/91 Duración (semanas): 6
Tema: Aplicación de un método directo para los cálculos ab initio de radicales (continuación).
Clave: P

Centro: Departamento de Química
Localidad: Bristol País Inglaterra Fecha: 3/9/2013 Duración (semanas): 12
Tema: Estudio computacional de reacciones en disolución.
Clave: I

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Contribuciones a Congresos

Autores:
Título:
Tipo de participación:
Congreso:

Publicación:

Lugar celebración:

Fecha:

Autores: S.A. Vázquez

Título: **GAFit**: a general-purpose, user-friendly program for fitting potential energy surfaces.

Tipo de participación: Ponencia invitada

Congreso: MOLIM Whorkshop on Intermolecular Interactions)

Publicación:

Lugar celebración: Santiago de Compostela

Fecha: 2-4 Octubre 2017

Autores: S.A. Vázquez

Título: **Decomposition**: Formation of HCN and HNC via concerted three-body dissociations.

Tipo de participación: Ponencia invitada

Congreso: XIV International Workshop on Quantum Reactive Scattering (QRS XIV)

Publicación:

Lugar celebración: Trieste (Italia)

Fecha: 3-6 Julio 2017

Autores: S.A. Vázquez

Título: Computer simulations of soft landing of ions on self-assembled monolayers.

Tipo de participación: Ponencia invitada

Congreso: XIII Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2015)

Publicación:

Lugar celebración: Aveiro (Portugal)

Fecha: 6-9 Septiembre 2015

Autores: S.A. Vázquez

Título: Dynamics simulations of collisions of gases with a perfluorinated self-assembled monolayer.

Tipo de participación: Ponencia invitada

Congreso: XIV International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP-XIV)

Publicación:

Lugar celebración: El Escorial (Madrid)

Fecha: 13-19 Septiembre 2009

Autores: J.J. Nogueira, E. Martínez-Núñez, S.A. Vázquez

Título: Classical trajectory simulations of soft-landing of silyl ions onto a fluorinated self-assembled monolayer surface

Tipo de participación: póster

Congreso: 9th Iberian Join Meeting on Atomic and Molecular Physics

Publicación:

Lugar celebración: Capuchos, Portugal

Fecha: 7-9 Septiembre 2008

Autores: M. Pombar Pérez, E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez

Título: Chemical dynamics simulations of the 2-chloropropene photodissociation channels at 193 nm.

Tipo de participación: póster

Congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2008)

Publicación:

Lugar celebración: Palma de Mallorca

Fecha: 2-5 Septiembre 2008

Autores: J.J. Nogueira, E. Martínez-Núñez, S.A. Vázquez
Título: Soft-landing of silyl ions on a fluorinated self-assembled monolayer surface simulated by classical trajectories
Tipo de participación: comunicación oral presentada por J.J. Nogueira
Congreso: 19th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry
Publicación:
Lugar celebración: Santiago de Compostela, España Fecha: 13-18 Julio 2008

Autores: E. Martínez-Núñez, J.J. Nogueira, S.A. Vázquez, O. Mazzyar, A. Rahaman y W. L. Hase
Título: Inelastic scattering dynamics of Ar and CO₂ on a fluorinated self-assembled monolayer surface.
Tipo de participación: comunicación oral de 20 minutos (presentada por E. Martínez-Núñez)
Congreso: Elementary Reactive Processes at Surfaces
Publicación:
Lugar celebración: San Sebastián Fecha: 30 Agosto-1 Septiembre 2007

Autores: E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, S.A. Vázquez, J.M.C. Marques, M. Xue y W. L. Hase
Título: Quasiclassical dynamics simulation of the collision-induced dissociation of Cr(CO)₆⁺ with Xe.
Tipo de participación: comunicación oral de 20 minutos (presentada por S.A. Vázquez)
Congreso: 20th International Conference on Molecular Energy Transfer
Publicación:
Lugar celebración: Arcachon (Francia) Fecha: 3-7 Junio 2007

Autores: E. Martínez-Núñez, S.A. Vázquez, F. J. Aoiz y J. F. Castillo
Título: Quasiclassical trajectory study of the collision-induced dissociation dynamics of Ar + CH₃SH⁺ using ab initio interpolated potential energy surface.
Tipo de participación: póster
Congreso: 20th International Conference on Molecular Energy Transfer
Publicación:
Lugar celebración: Arcachon (Francia) Fecha: 3-7 Junio 2007

Autores: A. Fernández-Ramos, E. Martínez-Núñez, S. Vázquez-Rodríguez, M. A. Ríos, C. M. Estévez, L. Serrano-Andrés y M. Merchán
Título: "Proton transfer vs. hydrogen transfer in 7-hydroxy-quinoline·(NH₃)₃. A CASSCF/CASPT2 study"
Tipo de participación: póster
Congreso: XIIIth International Congress of Quantum Chemistry
Publicación:
Lugar celebración: Kyoto, Japón Fecha: 21-26 mayo 2006

Autores: J.M.C. Marques, E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: Collision-induced dissociation of methane with rare-gas atoms at hyperthermal energies: a trajectory dynamics study.
Tipo de participación: comunicación oral de 20 minutos (presentada por J.M.C. Marques)
Congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2006)
Publicación:
Lugar celebración: Santiago de Compostela Fecha: 18-21 Julio 2006

Autores: R. Meana-Pañeda, S. A. Vázquez y A. Fernández-Ramos
Título: Direct dynamics study of the hydrogen abstraction reaction from propane by atomic hydrogen.
Tipo de participación: póster
Congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2006)
Publicación:
Lugar celebración: Santiago de Compostela Fecha: 18-21 Julio 2006

Autores: S. Vázquez, E. Martínez-Núñez, I. Borges Jr., A. B. Rocha, C. M. Estévez, J. F. Castillo y F. J. Aoiz
Título: On the Conformational Memory in the Photodissociation of Formic Acid
Tipo de participación: póster

Congreso: 7th Iberian Join Meeting on Atomic and Molecular Physics

Publicación:

Lugar celebración: Lisboa (Portugal)

Fecha: 21-23 Marzo 2005

Autores: S. Vázquez y E. Martínez-Núñez

Título: Rovibrational distributions of HF in the photodissociation of vinyl fluoride at 193 nm: A direct MP2 quasiclassical trajectory study

Tipo de participación: póster

Congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA2004)

Publicación:

Lugar celebración: Valladolid

Fecha: 15-17 Septiembre 2004

Autores: E. Martínez-Núñez, S. A. Vázquez, y J.M.C. Marques

Título: "Quasiclassical trajectory study of the collision-induced dissociation of $\text{CH}_3\text{SH}^+ + \text{Ar}$.

Tipo de participación: póster

Congreso: 18th International Symposium on Gas Kinetics

Publicación:

Lugar celebración: Bristol (UK)

Fecha: 7-12 Agosto 2004

Autores: S. Vázquez y E. Martínez-Núñez

Título: Rovibrational distributions of HF in the photodissociation of vinyl fluoride at 193 nm: A direct MP2 quasiclassical trajectory study

Tipo de participación: póster

Congreso: 18th International Symposium on Gas Kinetics

Publicación:

Lugar celebración: Bristol (UK)

Fecha: 7-12 Agosto 2004

Autores: J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, S. Vázquez, E. Martínez-Núñez y A. Fernández-Ramos

Título: Quasiclassical trajectory studies of the $\text{F} + \text{CH}_4$ reaction using an ab initio potential energy surface constructed by interpolation

Tipo de participación: póster

Congreso: 27th International Symposium on Free Radicals

Publicación:

Lugar celebración: Taipei (Taiwan)

Fecha: 25-30 Julio 2004

Autores: E. Martínez-Núñez, J.M.C. Marques y S. A. Vázquez

Título: Dissociation of the methanethiol radical cation induced by collisions with Ar atoms: an investigation by quasiclassical trajectories

Tipo de participación: póster

Congreso: 27th International Symposium on Free Radicals

Publicación:

Lugar celebración: Taipei (Taiwan)

Fecha: 25-30 Julio 2004

Autores: E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez

Título: Quasiclassical trajectory study of the 193 nm photodissociation of CF_2CHCl

Tipo de participación: póster

Congreso: 27th International Symposium on Free Radicals

Publicación:

Lugar celebración: Taipei (Taiwan)

Fecha: 25-30 Julio 2004

Autores: S. A. Vázquez, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, F.J. Aoiz, L. Bañares y J. F. Castillo

Título: "A direct classical trajectory study of the HCl elimination from the 193 nm photodissociation of vinyl chloride"

Tipo de participación: póster

Congreso: XVIII International Conference on Molecular Energy Transfer

Publicación:

Lugar celebración: El Escorial, Madrid

Fecha: junio de 2003

Autores: E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, S. A. Vázquez, F.J. Aoiz, L. Bañares y M.N.D.S. Cordeiro

Título: "A direct classical trajectory study of the acetone photodissociation on the triplet surface"

Tipo de participación: comunicación oral de 20 minutos (presentada por S. A. Vázquez)

Congreso: XVIII International Conference on Molecular Energy Transfer

Publicación:

Lugar celebración: El Escorial, Madrid

Fecha: 15-20 junio de 2003

Autores: S. A. Vázquez

Título: "Statistical vs. nonstatistical dynamics in unimolecular reactions: an investigation by classical trajectories"

Tipo de participación: ponencia invitada (plenary lecture)

Congreso: Electronic structure: Principles and applications (ESPA2002)

Publicación:

Lugar celebración: Sevilla

Fecha: septiembre de 2002

Autores: Jesús González-Vázquez, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos and S. A. Vázquez

Título: "Direct classical trajectory study of the HF elimination from difluoroethylenes. Analysis of the product energy distributions"

Tipo de participación: Póster

Congreso: Electronic structure: Principles and applications (ESPA2002)

Publicación:

Lugar celebración: Sevilla

Fecha: 11-13, septiembre de 2002

Autores/as: A. Peña-Gallego, E. Martínez-Núñez, y S. A. Vázquez

Título: "A direct classical trajectory study of the product energy distribution from ethylene excited at 193 and 157 nm"

Tipo de participación: Póster

Congreso: Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics 2002 (IBER2002)

Lugar de celebración: Lisboa (Portugal).

Año: 2002

Autores/as: A. Peña-Gallego, E. Martínez-Núñez, y S. A. Vázquez

Título: "Product energy partitioning in the dissociation of ethylene by direct classical trajectories"

Tipo de participación: Póster

Congreso: Quantum simulations of complex many-body systems: from theory to algorithms.

Lugar de celebración: Kerkrade (Holanda).

Año: 2002

Autores/as: J. González-Vázquez, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos y S. A. Vázquez

Título: "Product energy partitioning in the dissociation of 1,2-difluoroethylene by direct classical trajectories"

Tipo de participación: Póster

Congreso: Quantum simulations of complex many-body systems: from theory to algorithms.

Lugar de celebración: Kerkrade (Holanda).

Año: 2002

Autores/as: E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos y S. A. Vázquez

Título: "A linearized semiclassical-initial value representation study of the forward and reverse $\text{Cl} + \text{CH}_4 \rightarrow \text{ClH} + \text{CH}_3$ reaction and H/D kinetic isotope effects."

Tipo de participación: Póster

Congreso: Quantum simulations of complex many-body systems: from theory to algorithms.
Lugar de celebración: Kerkrade (Holanda). Año: 2002

Autores/as: I. Borges, Jr., E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Classical trajectory and canonical variational calculations of rate constants"
Tipo de participación: Póster
Congreso: XI Simpósio brasileiro de química teórica.
Lugar de celebración: Caxambu (Brasil). Año: 2001

Autores/as: C. M. Estévez, E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "HF vibrational quantum number distributions on the unimolecular decomposition of 1,1 and 1,2 difluoroethylene"
Tipo de participación: Póster
Congreso: ESCR: Electronic Structure and Chemical Reactivity. An International Symposium in Honor of Prof. Juan Bertran.
Lugar de celebración: Bellaterra (España). Año: 2001

Autores/as: E. Martínez-Núñez, A. Peña-Gallego, S. A. Vázquez y A. J. C. Varandas
Título: "Unimolecular reaction dynamics of HSO. Analysis of the influence of different barrier samplings on the product energy distributions"
Tipo de participación: Póster
Congreso: ESCR: Electronic Structure and Chemical Reactivity. An International Symposium in Honor of Prof. Juan Bertran.
Lugar de celebración: Bellaterra (España). Año: 2001

Autores/as: A. Peña-Gallego, E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Direct dynamics simulation of the ethylene dissociation"
Tipo de participación: Póster
Congreso: ESCR: Electronic Structure and Chemical Reactivity. An International Symposium in Honor of Prof. Juan Bertran.
Lugar de celebración: Bellaterra (España). Año: 2001

Autores/as: E. Martínez-Núñez, A. Peña-Gallego y S. A. Vázquez
Título: "Anharmonic quasi-classical barrier samplings in trajectory calculations and their influence on the computed product energy distributions"
Tipo de participación: Póster
Congreso: ESCR: Electronic Structure and Chemical Reactivity. An International Symposium in Honor of Prof. Juan Bertran.
Lugar de celebración: Bellaterra (España). Año: 2001

Autores/as: E. Martínez-Núñez, S. A. Vázquez y A. J. C. Varandas
Título: "Unimolecular reaction dynamics of HSO"
Tipo de participación: Póster
Congreso: Vth Femtochemistry Conference
Lugar de celebración: UCLM-Toledo (España). Año: 2001

Autores/as: E. Martínez-Núñez, A. Peña-Gallego, S. A. Vázquez
Título: "Nonstatistical effects in the unimolecular dissociation of the propionyl radical"
Tipo de participación: Póster
Congreso: 16th International Symposium on Gas Kinetics
Lugar de celebración: Cambridge (Gran Bretaña). Año: 2000

Autores/as: . E. Cabaleiro-Lago, A. Fernández-Ramos, J. M. Hermida-Ramón, E. Martínez-Núñez, A. Peña-Gallego, y S. A. Vázquez.
Título: "Dynamical study of the unimolecular dissociation of the acetyl radical"
Tipo de participación: Póster
Congreso: 5th World Congress of Theoretically Oriented Chemists. WATOC
Lugar de celebración: Londres (Gran Bretaña) Año: 1999

Autores/as: . E. Cabaleiro-Lago, A. Fernández-Ramos, J. M. Hermida-Ramón, E. Martínez-Núñez, A. Peña-Gallego, y S. A. Vázquez
Título: "Unimolecular decomposition of CH₃SH⁺: an ab initio and RRKM study"
Tipo de participación: Póster
Congreso: 5th World Congress of Theoretically Oriented Chemists. WATOC
Lugar de celebración: Londres (Gran Bretaña) Año: 1999

Autores/as: E. Cabaleiro-Lago, A. Fernández-Ramos, J. M. Hermida-Ramón, E. Martínez-Núñez, A. Peña-Gallego, y S. A. Vázquez.
Título: "Dynamical study of three decomposition channels of CH₃SH⁺"
Tipo de participación: Póster
Congreso: 5th World Congress of Theoretically Oriented Chemists. WATOC
Lugar de celebración: Londres (Gran Bretaña) Año: 1999

Autores/as: E. Martínez-Núñez, A. Peña-Gallego and S. A. Vázquez
Título: "The unimolecular decomposition of MeONO.II: classical dynamics simulations"
Tipo de participación: Póster
Congreso: Second European Conference on Computational Chemistry.
Lugar de celebración: Lisboa (Portugal) Año: 1997

Autores/as: S. A. Vázquez, A. Fernández-Ramos, E. Martínez-Núñez, and M. A. Ríos.
Título: "The unimolecular decomposition of MeONO.I: a direct dynamics study"
Tipo de participación: Póster
Congreso: Second European Conference on Computational Chemistry.
Lugar de celebración: Lisboa (Portugal) Año: 1997

Autores/as: A. Peña-Gallego, E. Martínez-Núñez, y S. A. Vázquez.
Título: "Classical trajectory study of the cis-trans isomerization of FONO"
Tipo de participación: Póster
Congreso: Second European Conference on Computational Chemistry..
Lugar de celebración: Lisboa (Portugal) Año: 1997

Autores/as: S. A. Vázquez y E. Martínez-Núñez

Título: "Cálculos ab initio para el potencial de isomerización cis-trans del nitrito de metilo"
Tipo de participación: Póster
Congreso: XXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.
Lugar de celebración: Cáceres (España) Año: 1996

Autores/as: E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Estudio dinámico de la isomerización cis-trans del nitrito de metilo"
Tipo de participación: Póster
Congreso: XXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.
Lugar de celebración: Cáceres (España) Año: 1996

Título: "Estudio por mecánica molecular de la barrera de interconversión conformacional en 9,10-dihidrofenantrenos",
Tipo de presentación: Póster
Congreso: XX Reunión Bienal de la R.S.E.Q.,
Lugar: Castellón, Septiembre-1984.

Título: "Conformaciones de ciclohexanos polihalogenados. Mecánica molecular y ecuación de Karplus generalizada",
Tipo de presentación: póster
Congreso: XXI Reunión Bienal de la R.S.E.Q.,
Lugar Santiago de Compostela, Septiembre-1986.

Título: "Diseño de Campos de Fuerzas de Mecánica Molecular en Base a Cálculos ab initio. II. Hidracinas Alifáticas",
Tipo de presentación: póster
Congreso: XXII Reunión Bienal de la R.S.E.Q.,
Lugar: Murcia, Septiembre-1988.

Título: "Estudio ab initio de 1-oxa-3-azociclohexano",
Tipo de presentación póster
Congreso: XXII Reunión Bienal de la R.S.E.Q.,
Lugar: Murcia, Septiembre-1988.

Título: "Efecto de la Rotación de los Metilos en la Estabilidad de la Forma Enólica de la Acetilacetona. Estudio ab initio",
Tipo de presentación póster
Congreso XXII Reunión Bienal de la R.S.E.Q.,
Lugar: Murcia, Septiembre-1988.

Título: "Potencial de Hidrógeno O-H..O en Cálculos de Mecánica Molecular",
Tipo de presentación póster
Congreso XXII Reunión Bienal de la R.S.E.Q.,
Lugar: Murcia, Septiembre-1988.

Título: "Modificación del campo de fuerzas de Allinger y col.",
Tipo de presentación póster
Congreso XI Encontro da Sociedade Portuguesa de Química,
Lugar: Lisboa, Diciembre-1988.

Título: "Relaciones estructura actividad a través de cálculos de mecánica molecular: barreras de rotación del verapamilo y análogos",

Tipo de presentación póster

Congreso VI Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica,
Lugar Granada, Septiembre-1989.

Título: "Relaciones estructura-actividad en analogos del ácido clavulánico: Estudio AM1 de derivados con el grupo hidroxilo sustituido",

Tipo de presentación póster

Congreso 7º Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica,
Lugar: Jaca, Septiembre-1991.

Título: "On the reliability of 4-21G(O*) basis set for the conformational description of peroxides",

Tipo de presentación póster

Congreso 13º Encontro Sociedade Portuguesa de Química,
Lugar Lisboa, Enero-1992.

Título: "Análisis conformacional de trimetilhidracina mediante cálculos ab initio",

Tipo de presentación póster

Congreso XVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina,
Lugar Peñíscola, Septiembre-1987.

Título: "Análisis conformacional de etilhidracina mediante cálculos ab initio",

Tipo de presentación póster

Congreso XVII Congreso Q.T.E.L.,
Lugar Peñíscola, Septiembre-1987.

Título "Análisis conformacional de propanodiolos mediante cálculos ab initio. Parte I: 1,2-propanodiol",

Tipo de presentación póster

Congreso XVII Congreso Q.T.E.L.,
Lugar Peñíscola, Septiembre-1987.

Título "Análisis conformacional de propanodiolos mediante cálculos ab initio. Parte II: 1,3-propanodiol",

Tipo de presentación póster

Congreso XVII Congreso Q.T.E.L.,
Lugar Peñíscola, Septiembre-1987.

Título "Conformational Ab-Initio Analysis of Metanolmethylamine",

Tipo de presentación póster

Congreso: Workshop on Quantum Chemistry,
Lugar Girona, Junio-1988.

Título "Conformational Analysis of Poliazacyclohexanes by Ab-Initio Calculations",

Tipo de presentación póster

Congreso Workshop on Quantum Chemistry,

Lugar Girona, Junio-1988.

Titulo "Ab Initio Calculations and Conformational Analysis of 2-Methoxyethanol",

Tipo de presentación póster

Congreso Workshop on Quantum Chemistry,

Lugar Girona, Junio-1988.

Titulo "Empirical Molecular Mechanics Force Fields Developed by Fitting Ab Initio Calculations. I. Linear and Cyclic Peroxides",

Tipo de presentación póster

Congreso Workshop on Quantum Chemistry,

Lugar Girona, Junio-1988.

Titulo "Intramolecular Hydrogen Tunneling in 2,3-dihydroxypropenal",

Tipo de presentación póster

Congreso NATO Advanced Study Institute on New Theoretical Concepts for Understanding Organic Reactions,

Lugar Sant Feliu de Guíxols (Girona), Junio-1988.

Titulo "Conformational Study and Intramolecular Proton Transfer in the enol form of acetylacetone by ab initio calculations",

Tipo de presentación póster

Congreso NATO Advanced Study Institute on New Concepts for Understanding Organic Reactions,

Lugar Sant Feliu de Guíxols (Girona), Junio-1988.

Titulo "Modification of the MM2 Force Field for Alcohols and Ethers. Conformational Trends",

Tipo de presentación póster

Congreso "Sixth European Symposium on Organic Chemistry",

Lugar Belgrado (Yugoslavia), septiembre-1989.

Titulo "Molecular Mechanics for the N-C-O Unit",

Tipo de presentación: comunicación oral presentada por B. Fernández

Congreso "Sixth European Symposium on Organic Chemistry",

Lugar Belgrado (Yugoslavia), Septiembre -1989.

Titulo "Conformational Analysis of the Core of the Prostaglandin Endoperoxide PGH2 and Other Cyclic Peroxides by Molecular Mechanics",

Tipo de presentación póster

Congreso "Sixth European Symposium on Organic Chemistry",

Lugar Belgrado (Yugoslavia), Septiembre-1989.

Autores/as: B. Fernández, M.A. Ríos, M.A. Mosquera y S. A. Vázquez

Titulo "Study of the Geometric Trends of 1-Fluoro-2-Propanol and 2-Fluoropropanol by Ab Initio Calculations",

Tipo de presentación: póster

Congreso "Forty Years of Quantum Chemistry",

Lugar Athens (U.S.A.), 16-19 octubre-1989.

Titulo "Ab Initio Conformational Analysis of Propanonitriles",
Tipo de presentación póster
Congreso " Forty Years of Quantum Chemistry ",
Lugar Athens (U.S.A.), 16-19 Octubre-1989.

Titulo "An Structural Comparison of Potential HIV Inhibitors: 2',3'-Didesoxinucleosides and 2',3'-Carbonucleosides",
Tipo de presentación póster
Congreso NATO Advanced Study Institute on the Application of Charge Density Research to Chemistry and Drug Design",
Lugar: Sant Feliu de Guixols, Abril-1990.

Titulo "An Ab Initio study of some β -lactam derivatives",
Tipo de presentación póster
Congreso Quantum Chemistry and Molecular Properties Summer School,
Lugar: Sostrup Slot, Dinamarca, Agosto-1990.

Titulo "Study of the Geometric Trends and Rotational Constants of 1,3,-Fluoropropanol by "ab initio" Calculations",
Tipo de presentación póster
Congreso XIX Congresso Internazionale dei Chimici Teorici dei Paesi di Espressione Latina,
Lugar Roma, Septiembre-1990.

Titulo "An ab initio 6-31G* Study of Some Nitriles",
Tipo de presentación póster
Congreso XIX Congresso Internazionale dei Chimici Teorici dei Paesi di Espressione Latina,
Lugar Roma, Septiembre-1990.

Titulo "A Structural Study of the N,N-Dimethyl-1-aminoethanol",
Tipo de presentación póster
Congreso XIX Congresso Internazionale dei Chimici Teorici dei Paesi di Expressione Latina,
Lugar Roma, Septiembre-1990.

Titulo "Molecular Structure of Lumiflavin using the DSCF method",
Tipo de presentación: póster
Congreso 23rd Quantum Theory Conference,
Lugar Oxford, Inglaterra, Septiembre 1990.

Tesis Doctorales dirigidas

Título: GAFit: a computational tool kit for parameterizations of potential energy surfaces

Doctorando: Roberto Rodríguez Fernández

Universidad: Santiago de Compostela

Facultad / Escuela: Instituto Singular de Investigación en Química Biológica y Materiales Moleculares

Fecha: 24/10/2014

Calificación: Sobresaliente cum laude

Codirigida por Emilio Martínez Núñez

Título: Classical trajectory simulations of collisions between polyatomic molecules and a self-assembled monolayer surface

Doctorando: Juan José Nogueira Pérez

Universidad: Santiago de Compostela

Facultad / Escuela: Facultad de Química

Fecha: 21/10/2011

Calificación: Sobresaliente cum laude

Codirigida por Emilio Martínez Núñez

Título: Superficies de energía potencial y dinámica de reacciones unimoleculares

Doctorando: Ángeles Peña Gallego

Universidad: Santiago de Compostela

Facultad / Escuela: Facultad de Química

Fecha: 24/05/2002

Calificación: Sobresaliente cum laude y Premio Extraordinario

Codirigida por Emilio Martínez Núñez

Título: Estudio teórico de reacciones unimoleculares en fase gas

Doctorando: Emilio Martínez Núñez

Universidad: Santiago de Compostela

Facultad / Escuela: Facultad de Química

Fecha: 15/04/1999

Calificación: Sobresaliente cum laude y Premio Extraordinario

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Participación en comités y representaciones internacionales

Título del Comité:

Entidad de la que depende:

Tema:

Fecha:

Título del Comité:

Entidad de la que depende:

Tema:

Fecha:

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Experiencia en organización de actividades de I+D

Organización de congresos, seminarios, jornadas, etc., científicos-tecnológicos

Título: Theoretical and Computational Studies of Non-Equilibrium and Non-Statistical Dynamics in Gas-Phase, Condensed-Phase, and Interfacial Reactions

Tipo de actividad: Congreso CECAM (Miembro del Comité Organizador)

Ambito: Internacional

Fecha: 11-13 Abril, 2016

Título: Ninth Triennial Congress of the World Association of the Theoretical and Computational Chemists (WATOC2011)

Tipo de actividad: Congreso (Miembro del Comité Ejecutivo y Responsable del Comité Organizador Local)

Ambito: Internacional

Fecha: 17-21 Julio, 2011

Título: 10th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER 2009)

Tipo de actividad: Congreso (Presidente del Comité Organizador Local)

Ambito: España y Portugal

Fecha: 12-15 Julio, 2009

Título: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA)

Tipo de actividad: Congreso (Presidente del Comité Organizador)

Ambito: Organizado en España con carácter internacional

Fecha: 18-21 Julio, 2006

Título: XIII International workshop on Quantum Atomic & Molecular Tunneling in Solids and other Condensed Phases (Santiago de Compostela, 27-31 Julio, 2005)

Tipo de actividad: Congreso (Miembro del Comité Organizador Local)

Ambito: Internacional

Fecha: 27-31 Julio, 2005

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Experiencia de gestión de I+D
Gestión de programas, planes y acciones de I+D

Título:

Tipo de actividad:

Fecha:

Título:

Tipo de actividad:

Fecha:

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Otros méritos o aclaraciones que se desee hacer constar
(utilice únicamente el espacio equivalente a una página).

Coordinador de la Universidad de Santiago de Compostela del Programa de Doctorado Interuniversitario "Química Teórica y Computacional desde el curso académico 2002-2003 hasta el 2009-2010, ambos incluidos.

Coordinador de la Universidad de Santiago de Compostela del Master Interuniversitario "Química Teórica y Modelización Computacional desde el 21 de abril 2010

Editor invitado del número especial 2092 de la revista "Philosophical Transactions of the Royal Society A" (volumen 375, año 2017), titulado "Theoretical and computational studies of non-equilibrium and non-statistical dynamics in the gas phase, in the condensed phase and at interfaces".



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

Currículum

Nombre: JUAN ENRIQUE VERDASCO COSTALES

Fecha: 11-Abril-2019

Apellidos: VERDASCO COSTALES

Nombre: JUAN ENRIQUE

Situación profesional actual

Organismo: UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

Facultad, Escuela o Instituto: FACULTAD DE CIENCIAS QUIMICAS

Depto./Secc./Unidad estr.: QUIMICA FISICA I

Dirección postal: Facultad de Ciencias Químicas, Avda. Complutense s/n. Ciudad Universitaria 28040-MADRID

Teléfono (indicar prefijo, número y extensión): 91 394 4717

Fax: 91 394 4135

Correo electrónico: verdasco@quim.ucm.es

Especialización (Códigos UNESCO): 220699

Categoría profesional: Profesor Titular de Universidad

Fecha de inicio: 24/05/1995

Situación administrativa

Plantilla

Contratado

Interino

Becario

Otras situaciones especificar:

Dedicación

A tiempo completo

A tiempo parcial

Líneas de investigación

Breve descripción, por medio de palabras claves, de la especialización y líneas de investigación actuales.

Dinámica molecular, espectroscopia láser, fotodisociación. Método de trayectorias cuasiclásicas. Métodos mecanocuánticos de dispersión elástica.

Formación Académica

Titulación Superior	Centro	Fecha
Licenciado en Ciencias Químicas	Universidad Complutense de Madrid	Jun. 1982
Grado de Licenciatura	Universidad Complutense de Madrid	Dic. 1982

Doctorado	Centro	Fecha
Ciencias Químicas	Universidad Complutense de Madrid	Jun. 1989

Actividades anteriores de carácter científico profesional

Puesto	Institución	Fechas
Becario FPI	Ministerio de Educación y Ciencia	1/1/85-30/9/87
Becario MEC/Fulbright	Ministerio de Educación y Ciencia	1/9/89-31/3/91
Ayudante LRU de Facultad	Universidad Complutense de Madrid	1/10/87-30/9/92
Profesor Asociado tipo II (T. C.)	Universidad Complutense de Madrid	1/10/92-26/1/93
Profesor Titular Universidad Interino	Universidad Complutense de Madrid	27/1/93-23/5/95

Idiomas (R = regular, B = bien, C = correctamente)

Idioma	Habla	Lee	Escribe
INGLES	C	C	C

Participación en Proyectos de I+D financiados en Convocatorias públicas.

(nacionales y/o internacionales)

Título del proyecto: Experimentos con haces moleculares: secciones estado a estado.

Entidad financiadora: DGICYT

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 1989 hasta: 1991 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Angel González Ureña

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Molecular beam studies

Entidad financiadora: CEE

Entidades participantes: Universidades de Manchester, Amsterdam, Perugia y Madrid

Duración, desde: 1989 hasta: Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Ángel González Ureña

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Experimentos con haces moleculares

Entidad financiadora: DGICYT

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 1992 hasta: 1995 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Ángel González Ureña

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Espectroscopia de Ionización multifotónica resonante (REMPI) de radicales y Moléculas. Aplicación al estudio de reacciones elementales: Experimentos y cálculos teóricos

Entidad financiadora: DGICYT

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 1997 hasta: 1999 Cuantía de la subvención: 31.620 Mptas (UCM: 16.840 Mptas)

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes: UCM 5

Título del proyecto: Cromatografía de gases y ablación láser con espectrometría de masas por tiempo de vuelo e ionización láser multifotónica (GC-LA/TOFMS-REMPI). Proyecto de infraestructura científico-técnica IN97-0380. Programa de I + D en medio ambiente.

Entidad financiadora: DGICYT- Comunidad de Madrid - Universidad Complutense de Madrid

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 1998 hasta: 2000 Cuantía de la subvención: 32 MPts

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Estudio de procesos de fotodisociación, reacciones elementales y transferencia de energía en fase gaseosa: experimentos con ionización multifotónica y cálculos teóricos.

Entidad financiadora: DGICYT

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2000

hasta: 2002

Cuantía de la subvención: 18 Mptas (UCM: 11Mptas)

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: REACTION DYNAMICS: Experimental and Theoretical Studies on the Dynamics of Reactions of Atoms and Radicals of Fundamental and Practical Importance. Research Training Network of the EC. Project HPRN-CT-1999-00007.

Entidad financiadora: UE

Entidades participantes: UCM, U. Perugia, U. Oxford, U. Bielefeld, U. Nijmegen, U. Stuttgart, U. Freiburg

Duración, desde: 2000

hasta: 2002

Cuantía de la subvención: 1.499.000 €

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Estudio experimental y teórico de la dinámica de fotodisociación y reacciones fotoiniciadas con detección de moléculas y radicales por espectroscopia láser multifotónica.

Entidad financiadora: DGICYT

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2003

hasta: 2005

Cuantía de la subvención: 140.000,00 €

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes: 8

Título del proyecto: Sistema Láser de Femtosegundo. UNCM00-33-009

Entidad financiadora: Universidad Complutense de Madrid- Unión Europea

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2002

hasta: 2003

Cuantía de la subvención: 600.000,00 €

Investigadores responsables: Francisco Javier Aoiz Molerés y Luis Bañares Morcillo

Número de investigadores participantes: 4

Título del proyecto: Equipamiento para el Centro de Determinación Molecular. UNCM01-35-002

Entidad financiadora: Universidad Complutense de Madrid- Unión Europea.

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2002

hasta: 2003

Cuantía de la subvención: 227.772,10 €

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Proyecto de acondicionamiento y reubicación del Centro de determinación Estructural Molecular UNCMA-C002

Entidad financiadora: Universidad Complutense de Madrid - Unión Europea.

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2003 hasta: 2004 Cuantía de la subvención: 2.123.857,00 €

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Estudio de la dinámica molecular de procesos químicos mediante técnicas láser de nanosegundo y femtosegundo y métodos teóricos.

Entidad financiadora: DGICYT (CTQ2005-08493-C02-01)

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2005 hasta: 2008 Cuantía de la subvención: 160.000,00 €

Investigador responsable: Luis Bañares Morcillo

Número de investigadores participantes: 10

Título del proyecto: Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación Universidad Complutense-Comunidad de Madrid IV PRICIT: Grupo de Dinámica molecular de las reacciones químicas y Femtoquímica.

Entidad financiadora: Comunidad de Madrid-U.C.M. Grupo: 910729

Entidades participantes: Universidad de Complutense de Madrid

Duración, desde: 30/12/2005 hasta: 29/12/2006 Cuantía de la subvención: 15.210,00 €

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes: 11

Título del proyecto: Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación Universidad Complutense-Comunidad de Madrid IV PRICIT: Grupo de Dinámica molecular de las reacciones químicas y Femtoquímica.

Entidad financiadora: Comunidad de Madrid-U.C.M. Grupo: 910729

Entidades participantes: Universidad de Complutense de Madrid

Duración, desde: 1/1/2006 hasta: 31/12/2007 Cuantía de la subvención: 14.000,00 €

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes: 10

Título del proyecto: Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación Universidad Complutense-Comunidad de Madrid IV PRICIT: Grupo de Dinámica molecular de las reacciones químicas y Femtoquímica.

Entidad financiadora: Comunidad de Madrid-U.C.M. Grupo: 910729

Entidades participantes: Universidad de Complutense de Madrid

Duración, desde: 1/1/2008 hasta: 31/12/2008 Cuantía de la subvención: 12.782,40 €

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes: 10

Título del proyecto: Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación Universidad Complutense-Comunidad de Madrid IV PRICIT: Grupo de Dinámica molecular de las reacciones químicas y Femtoquímica.

Entidad financiadora: Comunidad de Madrid-U.C.M. Grupo: 910729

Entidades participantes: Universidad de Complutense de Madrid

Duración, desde: 1/1/2008 hasta: 31/12/2010 Cuantía de la subvención: 9.610,00 €

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes: 12

Título del proyecto: Dinámica de procesos químicos: Experimentos fotoiniciados con láseres de nanosegundo y femtosegundo y métodos teóricos.

Entidad financiadora: DGICYT (CTQ2008-02578/BQU)

Entidades participantes: UCM, UPM, USAL, UPV

Duración, desde: 2008 hasta: 2013

Cuantía de la subvención: 408.000,00 €

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes: 14

Título del proyecto: Procesos moleculares fotoinducidos y colisionales por medio de experimentos láser y métodos teóricos.

Entidad financiadora: CTQ2015-65033-P/ (MINECO/FEDER)

Entidades participantes: UCM, UPM, USAL, UPV

Duración, desde: 1/1/2016 hasta: 31/12/2018

Cuantía de la subvención: 270.314,00 €

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés /Luis Bañares Morcillo

Número de investigadores participantes: 12

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Publicaciones o Documentos Científico-Técnicos

(CLAVE: L = libro completo, CL = capítulo de libro, A = artículo, R = "review", E = editor,
S = Documento Científico-Técnico restringido.)

1.-

Autores (p.o. de firma): V. Sáez Rábanos, E. Verdasco, A. Segura and A. González Ureña

Título: Observed differential cross section of the $\text{CH}_3\text{I} + \text{Na} \rightarrow \text{NaI} + \text{CH}_3$ system. Model analysis and comparison with related reactions.

Ref. revista : Mol. Phys.

Libro

Clave: A Volumen: 50 Páginas, inicial: 825 final: 840 Fecha: 1983

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

2.-

Autores (p.o. de firma): V. Sáez Rábanos, E. Verdasco, V. J. Herrero and A. González Ureña

Título: Maximum in the translational energy dependence of the cross section for the $\text{Na} + \text{CH}_3\text{I} \rightarrow \text{NaI} + \text{CH}_3$ reaction

Ref. revista: J. Chem. Phys.

Libro

Clave: A Volumen: 81 Páginas, inicial: 5725 final: 5729 Fecha: 1984

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

3.-

Autores (p.o. de firma): V. Sáez Rábanos, F. J. Aoiz, V. J. Herrero, E. Verdasco and A. González Ureña

Título: Molecular beam study of the radical group effect in the $\text{K} + \text{RI} \rightarrow \text{KI} + \text{R}$ ($\text{R} = \text{CH}_3, \text{C}_2\text{H}_5, \text{nC}_3\text{H}_7$) reactive collisions

Artículo: Mol. Phys. 59, 707-720 (1986)

4.-

Autores (p.o. de firma): E. Verdasco, V. Sáez Rábanos, F. J. Aoiz and A. González Ureña

Título: Chemiluminescence from the $\text{Ca}^*(^3\text{P}) + \text{SF}_6$ reaction: Absolute cross-section, photon yields, and electronic branching

Artículo: Phys. Chem., 91, 2073-2075 (1987)

5.-

Autores (p.o. de firma): E. Verdasco, V. Sáez Rábanos, F. J. Aoiz and A. González Ureña

Título: Influence of the radical group upon total reaction cross-section: molecular beam study of the $\text{K} + \text{RI} \rightarrow \text{KI} + \text{R}$ ($\text{R} = \text{CH}_3, \text{C}_2\text{H}_5, \text{C}_3\text{H}_7$) reactions

Artículo: Mol. Phys., 62, 1207-1211 (1987)

6.-

Autores (p.o. de firma): A. González Ureña, V. Sáez Rábanos and E. Verdasco

Título: Communication on $\text{Ca}^* + \text{SF}_6$

Artículo: Far. Disc. Chem. Soc., 84, 179 (1987)

7.-

Autores (p.o. de firma): E. Verdasco, V. Sáez Rábanos and A. González Ureña

Título: Reaction dynamics of translational and electronic excitation in $\text{Ca}^* + \text{SF}_6$ collisions

Artículo: Laser Chem., 10, 51-61 (1989)

8.-

Autores (p.o. de firma): A. González Ureña, E. Verdasco and V. Sáez Rábanos

Título: Pulsed metastable atom source for low-vapor pressure metals

Artículo: Meas. Sci. Technol., 1, 250-254 (1990)

9.-

Autores (p.o. de firma): E. Verdasco and A. González Ureña

Título: High-resolution Excitation Function by Time Profile Crossed-beam Chemiluminescence

Artículo: *J. Chem. Soc. Faraday Trans.*, **86**, 1017 (1990)

10.-

Autores (p.o. de firma): E. Verdasco and A. González Ureña

Título: Reaction cross-section from time profile cross-beam chemiluminescence: application to electronically excited calcium-atom reactions

Artículo: *Chem. Phys. Lett.*, **168**, 551-555 (1990)

11.-

Autores (p.o. de firma): E. Verdasco and A. González Ureña

Título: Reaction dynamics of electronically excited calcium atoms with carbon tetrachloride

Artículo: *Chem. Phys. Lett.*, **169**, 437-440 (1990)

12.-

Autores (p.o. de firma): E. Verdasco, V. Sáez Rábanos, H. H. Telle and A. González Ureña

Título: Lifetime measurements of CaCl* ($A^2\Pi$) in a molecular beam

Artículo: *Laser Chem.*, **10**, 239-246 (1990)

13.-

Autores (p.o. de firma): E. Verdasco and A. González Ureña

Título: Reaction cross-sections by time profile measurements under crossed-beam conditions: The Ca (3P , 1D) + N₂O → CaO* + N₂ reaction

Artículo: *J. Chem. Phys.*, **93**, 428-433 (1990)

14.-

Autores (p.o. de firma): E. Verdasco, M. Menéndez, M. Garay and A. González Ureña; O. Benoist d'Azy, F. J. Poblete and G. Taïeb

Título: Reaction dynamics of electronically excited calcium atom

Artículo: *Laser Chem.*, **12**, 123-136 (1992)

15.-

Autores (p.o. de firma): Z. S. Huang, J. E. Verdasco, C. Wittig and R. A. Beaudet

Título: High-resolution infrared diode laser spectroscopy of SO ($^3\Sigma^-$) in a secondary-slit supersonic expansion

Artículo: *Chem. Phys. Lett.*, **192**, 309-314 (1992)

16.-

Autores (p.o. de firma): S. W. Bunte, J. B. Miller, Z. S. Huang, J. E. Verdasco, C. Wittig and R. A. Beaudet

Título: Infrared Absorption Spectroscopy of the Weakly Bonded CO-Cl₂ Complex

Artículo: *J. Phys. Chem.*, **96**, 4140-4143 (1992)

17.-

Autores (p.o. de firma): A. González Ureña, L. Bañares and E. Verdasco

Título: Simple surface ionization detector for total reactive scattering measurements

Artículo: *Meas. Sci. Technol.*, **3**, 1109-1111 (1992)

18.-

Autores (p.o. de firma): M. Menéndez, M. Garay, E. Verdasco and A. González Ureña

Título: Collision Energy and Product Polarization Effects in the $\text{Ca}^* (^1\text{D}_2) + \text{HCl} \rightarrow \text{CaCl}^* (\text{A, B}) + \text{H}$ Reaction

Artículo: *J. Chem. Soc. Far. Trans.*, **89**, 1493-1499 (1993).

19.-

Autores (p.o. de firma): M. Garay, M. Menéndez, E. Verdasco, J. Castaño and A. González Ureña

Título: Product Polarization in the $\text{Ca} (^1\text{D}_2) + \text{HCl} \rightarrow \text{CaCl} (\text{B}) + \text{H}$ reaction

Artículo: *J. Phys. Chem.*, **97**, 5836-5838 (1993)

20.-

Autores (p.o. de firma): M. Menéndez, M. Garay, E. Verdasco and A. González Ureña

Título: On the determination of D_0^0 (CaCl) from translational energy threshold measurements

Artículo: *J. Chem. Phys.*, **99**, 2760-2764 (1993)

21.-

Autores (p.o. de firma): M. Menéndez, M. Garay, E. Verdasco and A. González Ureña

Título: Collision energy effects in the $\text{Ca} (^1\text{D}) + \text{HCl} \rightarrow \text{CaCl} (\text{A}) + \text{H}$ reaction cross-section

Artículo: *An. Fis.*, **90** 123-126 (1994)

22.-

Autores (p.o. de firma): M. Menéndez, M. Garay, J. E. Verdasco, and A. González Ureña

Título: Crossed-beam (full collision) versus van der Waals (half collision) studies. Application to the determination of the D_0^0 ($\text{Ca} \cdots \text{HCl}$)

Artículo: *J. Chem. Phys.*, **100**, 756-757 (1994)

23.-

Autores (p.o. de firma): M. Esteban, M. Garay, J. M. García Tijero, E. Verdasco and A. González Ureña

Título: Influence of the radical size on the $\text{Ca}^* + \text{ROH} \rightarrow \text{CaOH}^* + \text{R}$ ($\text{R} = \text{CH}_3, \text{C}_2\text{H}_5, \text{C}_3\text{H}_7$) reaction cross-section

Artículo: *Chem. Phys. Lett.*, **230**, 525-529 (1994)

24.-

Autores (p.o. de firma): M. Garay, M. Esteban, E. Verdasco, and A. González Ureña

Título: High Sensitivity in Reaction Cross-section Measurements by Optical Methods: The $\text{Ca} (^1\text{D}_2) + \text{C}_2\text{H}_5\text{OH} \rightarrow \text{CaOH}^* + \text{C}_2\text{H}_5$ Reaction

Artículo: *J. Chem. Soc. Far. Trans.*, **90**, 3731-3732 (1994)

25.-

Autores (p.o. de firma): M. Garay, M. Esteban, E. Verdasco, and A. González Ureña

Título: Reaction Cross Section and Product Polarization in the $\text{Ca} (^1\text{D}_2) + \text{HBr} \rightarrow \text{CaBr} (\text{A,B}) + \text{H}$ Reaction

Artículo: *Chem. Phys.*, **195**, 235- (1995)

26.-

Autores (p.o. de firma): M. Garay, M. Esteban, E. Verdasco, and A. González Ureña

Título: Estudio por Haces Moleculares del Efecto del Grupo Radical en la Dinámica de las Reacciones: $\text{Ca}^* + \text{ROH}$ y $\text{K} + \text{RI}$ ($\text{R} = \text{CH}_3, \text{C}_2\text{H}_5, \text{C}_3\text{H}_7$)

Artículo: *Anales de Química*, **91**, 19 (1995)

27.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, B. Friedrich, V.J. Herrero, V. Sáez Rábanos and E. Verdasco

Título: Effect of pendular orientation on the reactivity of H + DCl: a quasiclassical trajectory study

Artículo: *Chem. Phys. Lett.*, 289, 132-140 (1998)

28.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. T. Martínez, M. Menéndez, V. Sáez Rábanos, and E. Verdasco

Título: Quasiclassical trajectory study of the Li + HF → LiF + H reaction

Artículo: *Chem. Phys. Lett.*, 299, 25-34. (1999)

29.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, T. Díez Rojo, V.J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, L. Ramonat, I. Tanarro, and E. Verdasco

Título: The low temperature rotational relaxation of N₂ studied with Resonance Enhanced Multiphoton Ionization

Artículo: *J. Phys. Chem. A*, 103, 823-832 (1999)

30.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, M. Menéndez, and E. Verdasco

Título: Quantum mechanical and Quasiclassical rate constant calculations for the O (³P) + HCl → OH + Cl

Artículo: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 1, 1149-1158 (1999)

31.-

Autores (p.o. de firma): B. Martínez-Haya, I. Zapater, P. Quintana, M. Menéndez, E. Verdasco, J. Santamaría, L. Bañares and F. J. Aoiz

Título: Photodissociation of Dimethyl Sulfide at 227.5 nm: Resonance Enhanced Multiphoton Ionization of the Methyl Fragment

Artículo: *Chem. Phys. Lett.*, 311, 159-166 (1999)

32.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, I. Tanarro, E. Verdasco

Título: Reaction cross-sections for the H + HCl (DCI) reaction: a quasiclassical trajectory study reaction

Artículo: *Chem. Phys. Lett.*, 306, 179-186 (1999)

33.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. Menéndez, V. Sáez Rábanos and E. Verdasco

Título: Stereochemistry and control in molecular reaction dynamics. General Discussion

Artículo: *Faraday Disc. Chem. Soc.*, 113, 338-339 (1999)

34.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, E. Verdasco, V. Sáez Rábanos, H. J. Loesch, M. Menéndez and F. Stienkemeier

Título: Experimental and theoretical study of the Li + HF (v=1) → LiF + H reaction

Artículo: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2, 541-548 (2000)

35.-

Autores (p.o. de firma): M. T. Martínez, M.L. Hernández, J.M. Alvaríño, A. Laganà, F. J. Aoiz, M. Menéndez and E. Verdasco

Título: Quasiclassical trajectory simulation of the O(¹D) + HCl → OH + Cl, ClO + H reactions on an improved potential energy surface

Artículo: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2, 589-597 (2000)

36.-

Autores (p.o. de firma): B. Martínez-Haya, L. Bañares, F. J. Aoiz, P. Quintana and E. Verdasco

Título: Photodissociation of CD₃SCD₃ on the first absorption band: translational and internal energy transfer studied with resonance enhanced multiphoton ionization and time of flight spectrometry

Artículo: *J. Phys. Chem. A*, **104**, 10150-10158 (2000)

37.-

Autores (p.o. de firma): P. Quintana, R. F. Delmahl, D. H. Parker, B. Martínez-Haya, F. J. Aoiz, L. Bañares and E. Verdasco

Título: Velocity map imaging and REMPI study of the photodissociation of CH₃SCH₃ from the first absorption band

Artículo: *Chem. Phys. Lett.*, **325**, 146-152 (2000)

38.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro and E. Verdasco

Título: Low temperature rotational relaxation of N₂ in collisions with Ne

Artículo: *J. Phys. Chem. A*, **105**, 6976-6982 (2001)

39.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro and E. Verdasco

Título: Gas phase molecular relaxation at very low temperatures. A comparative study of N₂ and its mixtures with He and Ne

Artículo: *Vacuum*, **64**, 417-423 (2002)

40.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro and E. Verdasco

Título: Low temperature rotational relaxation of N₂ in collisions with He.

Artículo: *Chem. Phys. Lett.*, **367**, 500-506 (2003)

41.-

Autores (p.o. de firma): Barr J, Torres I, Bañares L, Verdasco JE, Aoiz FJ

Título: Near UV photodissociation of CD₃SCD₃: CD₃ fragment (v, J) vector correlations

Artículo: *Chem. Phys. Lett.*, **373**, 550-557 (2003).

42.- Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, J. E. Verdasco, V. J. Herrero, V. S. Rábanos and M. A. Alexander

Título: Attractive and repulsive interactions in the inelastic scattering of NO by Ar. A comparison between classical trajectory and close-coupling quantum mechanical results

Artículo: *J. Chem. Phys.*, **119**, 5860-5866 (2003).

43.-

Autores (p.o. de firma): I. Torres, J. Barr, J. E. Verdasco, L. Bañares, F. J. Aoiz

Título: Near UV photodissociation of dimethyl sulphide: a direct mechanism on the second absorption band

Artículo: *Chem. Phys. Lett.*, **394**, 307-312 (2004).

44.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. S. Rábanos, J. E. Verdasco.

Título: Classical stereodynamics in Ar plus NO inelastic collisions

Artículo: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **6**, 4407-4415 (2004).

45.-

Autores (p.o. de firma): J. Barr, I. Torres, J. Verdasco, L. Bañares, F. J. Aoiz, B. Martínez-Haya
Título: Photodissociation dynamics of dimethyl sulfide following excitation within the first absorption band.
Artículo: *J. Phys. Chem.*, **108**, 7936-7948 (2004).

46.-

Autores (p.o. de firma): Ralf Bobbenkamp, Alexandra Paladini, Andrew Russe and H.J. Loesch, Marta Menéndez, Enrique Verdasco and F. J. Aoiz., H.-J. Werner
Título: Effect of rotational energy on the reaction $\text{Li} + \text{HF}(v=0, j) \rightarrow \text{LiF} + \text{H}$: An experimental and computational study
Artículo: *J. Chem. Phys.*, **122**, 244304 (2005).

47.-

Autores (p.o. de firma): G. A. Amaral, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, G. A. Pino, I. Tanarro, I Torres, E. Verdasco
Título: Low temperature rotational relaxation of CO in self-collision and in collisions with Ne and He
Artículo: *J. Phys. Chem.*, **109**, 9402-9413 (2005).

48-

Autores (p.o. de firma): J. Klos, F. J. Aoiz, E. Verdasco, M. Brouard, S. Marinakis and S. Stolte
Título: Fully quantum state-resolved inelastic scattering between He and NO ($X^2\Pi$)
Artículo: *J. Chem. Phys.*, **127**, 031102 (2007).

49-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, E. Verdasco, M. Brouard, J. Klos, S. Marinakis and S. Stolte
Título: Inelastic Scattering of He atoms and NO ($X^2\Pi$) molecules: The Role of Parity on the Differential Cross Section.
Artículo: *J. Phys. Chem. A*, **113**, 14636-14649 (2009).

50.-

Autores (p.o. de firma): P. Bargaño, P. G. Jambrina, J. M. Alvario, M. L. Hernández, F. J. Aoiz, M. Menéndez, E. Verdasco and T. González-Lezana
Título: Dynamics of the $\text{O}(^1\text{D}) + \text{HCl} \rightarrow \text{OH} + \text{Cl}$ Reaction at a 0.26 eV Collision Energy: A Comparison between Theory and Experiment.
Artículo: *J. Phys. Chem. A*, **113**, 14237-14250 (2009).

51.-

Autores (p.o. de firma): P. Bargaño, P. G. Jambrina, J. M. Alvario, M. Menéndez, E. Verdasco, Hankel, M, Smith, S. C, F. J. Aoiz, and T. González-Lezana
Título: Energy dependent dynamics of the $\text{O}(^1\text{D}) + \text{HCl}$ reaction: A quantum, quasiclassical and statistical study.
Artículo: *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 8502-8514 (2011).

52.-

Autores (p.o. de firma): V. Sáez Rábanos, E. Verdasco, F. J. Aoiz, V. J. Herrero.
Título: Influence of vibration in the reactive scattering of D plus MuH: the effect of dynamical bonding.
Artículo: *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 13530-13537 (2016).

Participación en contratos de I+D de especial relevancia con Empresas y/o Administraciones
(nacionales y/o internacionales)

Título del contrato/proyecto:

Tipo de contrato:

Empresa/Administración financiadora:

Entidades participantes:

Duración, desde: hasta:

Investigador responsable:

Número de investigadores participantes:

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO:

Título del contrato/proyecto:

Tipo de contrato:

Empresa/Administración financiadora:

Entidades participantes:

Duración, desde: hasta:

Investigador responsable:

Número de investigadores participantes:

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO:

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Patentes y Modelos de utilidad

Inventores (p.o. de firma):

Título:

N. de solicitud:

País de prioridad:

Fecha de prioridad:

Entidad titular:

Países a los que se ha extendido:

Empresa/s que la están explotando:

Inventores (p.o. de firma):

Título:

N. de solicitud:

País de prioridad:

Fecha de prioridad:

Entidad titular:

Países a los que se ha extendido:

Empresa/s que la están explotando:

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Estancias en Centros extranjeros
(estancias continuadas superiores a un mes)

CLAVE: D = doctorado, P = postdoctoral, I = invitado, C = contratado, O = otras (especificar).

Centro: University of Southern California
Localidad: Los Angeles País USA Fecha: 1989 Duración (semanas): 86
Tema: Espectroscopia láser IR de alta resolución en complejos de van der Waals y radicales libres
Clave: P

Centro:
Localidad: País Fecha: Duración (semanas):
Tema:
Clave:

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Contribuciones a Congresos

1.-

Autores: V. Sáez Rábanos, E. Verdasco, V. J. Herrero and A. González Ureña

Título: On the collision energy dependence of the $\text{CH}_3\text{I} \rightarrow \text{NaI} + \text{CH}_3$

Tipo de participación: Poster

Congreso: X International Symposium on Molecular Beams

Publicación:

Lugar celebración: Cannes, Francia

Fecha: 1985

2.-

Autores: V. Sáez Rábanos, F. J. Aoiz, V. J. Herrero, E. Verdasco and A. González Ureña

Título: *Molecular beam study of the radical group effect in the $K + \text{RI} \rightarrow \text{KI} + \text{R}$ ($\text{R} = \text{CH}_3, \text{C}_2\text{H}_5, \text{nC}_3\text{H}_7$) reactive collisions*

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: 9th International Symposium on Gas Kinetics

Publicación:

Lugar celebración: Burdeos, Francia

Fecha: 1986

3.-

Autores: E. Verdasco, V. Sáez Rábanos, F. J. Aoiz and A. González Ureña

Título: *Reaction Dynamics of Translational and Electronic Excitation in $\text{Ca}(^3\text{P}) + \text{SF}_6$ collisions*

Tipo de participación: Comunicación oral

Lugar de celebración: XIth International Symposium on Molecular Beams, Edinburgh, Gran Bretaña (1987)

4.-

Autores: E. Verdasco, V. Sáez Rábanos, T. Contreras and A. González Ureña

Título: *State-to-state excitation functions by time profile of crossed beam chemiluminescence*

Tipo de participación: Poster

Lugar de celebración: Xth International Symposium on Gas Kinetics, Swansea, Gran Bretaña (1988)

5.-

Autores: A. González Ureña, V. Sáez Rábanos y E. Verdasco Costales

Título: *Interacción haz-fotón y reacciones químicas*

Tipo de participación: Comunicación oral

Lugar de celebración: Simposio Internacional sobre rayos láser y haces moleculares, Fundación Ramón Areces, Madrid, España (1988)

6.-

Autores: E. Verdasco, V. Sáez Rábanos, T. Contreras and A. González Ureña

Título: *Metastable atom source for low vapor (alkaline earth) metals*

Tipo de participación: Poster

Lugar de celebración: XIIth International Symposium on Molecular Beams, Perugia, Italy (1989)

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

7.-

Autores: A. González Ureña and E. Verdasco

Título: *Reaction Dynamics from Scalar Determinations. Translational and Vibrational Energy*

Tipo de participación: Comunicación oral

Lugar de celebración: 4th Europhysics Summer School on Chemical Physics. Molecular Dynamics with Lasers, Murcia, España (1989)

8.-

Autores: A. González Ureña, E. Verdasco and M. Menéndez

Título: *Reaction Dynamics from Scalar Determinations. Rotational and Electronic Energy*

Tipo de participación: Comunicación oral

Lugar de celebración: 4th Europhysics Summer School on Chemical Physics. Molecular Dynamics with Lasers, Murcia, España (1989)

9.-

Autores: A. González Ureña, E. Verdasco, L. Bañares y M. Menéndez

Título: *Dinámica de las reacciones químicas por haces moleculares*

Tipo de participación: Comunicación oral

Lugar de celebración: Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Madrid, España (1990)

10.-

Autores: E. Verdasco, M. Menéndez, H. H. Telle and A. González Ureña

Título: *Lifetime Measurements of Molecular Beams of Radicals by Laser Induced Fluorescence*

Tipo de participación: Poster

Lugar de celebración: OPTOLEC, I Exhibition and Congress on Laser and Electro-Optics, Madrid, España. (1990)

11.-

Autores: M. Menéndez, M. Garay, E. Verdasco and A. González Ureña

Título: *Reaction Dynamics of electronically excited alkaline earth atoms*

Tipo de participación: Poster

Lugar de celebración: XIII International Symposium on Molecular Beams, El Escorial, Madrid, España (1991)

12.-

Autores: Z. S. Huang, J. E. Verdasco, C. Wittig, and R. A. Beaudet

Título: *IR Diode Laser Spectroscopy of Radicals in Supersonic Expansions*

Tipo de participación: Comunicación oral

Lugar de celebración: XIII International Symposium on Molecular Beams, El Escorial, Madrid, España (1991)

13.-

Autores: A. González Ureña, E. Verdasco, L. Bañares, M. Menéndez, S. Skowronek, J. Castaño, C. Perdiguero and M. Garay

Título: *Reactive collisions with electronically excited atoms*

Tipo de participación: Comunicación oral

Lugar de celebración: Fourth European Conference on Atomic and Molecular Physics, Riga, Latvia (1992)

14.-

Autores: M. Menéndez, M. Garay, E. Verdasco, J. Castaño and A. González Ureña

Título: *Searching for resonances in the total reaction cross-section: A crossed beam study of the $\text{Ca}^*(^1D) + \text{HCl} \rightarrow \text{CaCl}^*(A) + \text{H}$ reaction*

Tipo de participación: Comunicación oral

Lugar de celebración: XIV International Symposium on Molecular Beams, Asilomar, California, U.S.A. (1992)

15.-

Autores: M. Menéndez, M. Garay, E. Verdasco, J. Castaño and A. González Ureña

Título: *Oscillations in the total reaction cross-section: A crossed beam study of the $Ca^*(^1D) + HCl \rightarrow CaCl(A) + H$ reaction*

Tipo de participación: Poster

Lugar de celebración: I South European Conference on Atomic and Molecular Physics, Gandía, España, (1992)

16.-

Autores: M. Menéndez, M. Garay, E. Verdasco, J. Castaño and A. González Ureña

Título: *Oscillations in the total reaction cross-section: A crossed beam study of the $Ca^*(^1D) + HCl \rightarrow CaCl(A) + H$ reaction*

Tipo de participación: Poster

Lugar de celebración: European Meeting on Photons, Beams, and Chemical Dynamics, Orsay, París, Francia. (1992)

17.-

Autores: M. Menéndez, M. Garay, E. Verdasco, and A. González Ureña,

Título: *Energy, Impact Parameter and Product Polarization Effects in the $Ca^*(^3P, ^1D) + HCl \rightarrow CaCl^*(A) + H$ reaction*

Tipo de participación: Comunicación oral

Lugar de celebración: Orientation and Polarization Effects in Chemical Reaction Dynamics (a NATO Advanced Workshop), Assisi, Italia, (1992)

18.-

Autores: M. Garay, M. Menéndez, E. Verdasco, and A. González Ureña,

Título: *Reaction Dynamics of Excited Atoms. Crossed-Beam Studies of the $Ca(^1D_2, ^3P_J) + HX (X= Br, Cl) \rightarrow CaX(A, B) + H$ reactions*

Tipo de participación: Poster

Lugar de celebración: XV International Symposium on Molecular Beams, Berlín, Alemania (1993)

19.-

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, T. Díez-Rojo, M. Menéndez, P. Quintana, J. E. Verdasco, V. J. Herrero, I. Tanarro, V. Sáez Rábanos

Título: *Espectroscopia de Ionización Multifotónica Resonante (REMPI). Puesta a Punto y Primeros Resultados*

Tipo de participación: Comunicación oral

Lugar de celebración: XV Reunión Nacional de Espectroscopia, Oviedo, España, (1996)

20.-

Autores: F. J. Aoiz, M. Menéndez, E. Verdasco, and V. Sáez Rábanos, B. Berning, H. J. Werner, and H. J. Loesch

Título: *Influence of the Rotational and Translational Energy on the Reaction Cross-section for the $Li + HF$ Reaction in a New *ab initio* Potential Energy Surface. A Comparison with Experimental Results*

Tipo de participación: Poster

Lugar de celebración: Stereo Dynamics of Chemical Reactions, Bielefeld, Alemania (1996)

21.-

Autores: F. J. Aoiz, M. Menéndez, E. Verdasco, and V. Sáez Rábanos

Título: *The Dynamics of the $Li + HF$ Reaction. Quasiclassical Trajectory Studies on Several Potential Energy Surfaces and Comparison With Experimental Results*

Tipo de participación: Conferencia invitada

Lugar de celebración: III Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics, Mira, Portugal (1998)

22.-

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, E. Verdasco

Título: *A quasi-classical trajectory study of the $O+H_2/D_2$ reactions: cross sections and rate constants*

Tipo de participación: Comunicación oral

Lugar de celebración: 15th International Symposium on Gas Kinetics, Bilbao, España (1998)

23.-

Autores: F. J. Aoiz, M. T. Martínez, M. Menéndez, V. Sáez Rábanos, and E. Verdasco
Título: *Dynamic Study of the Li + HF (v=1) Reaction by Quasiclassical Trajectory Calculations on an New ab initio Potential Energy Surface*

Tipo de participación: Comunicación oral

Lugar de celebración: XV International Symposium on Gas Kinetics, Bilbao, España (1998)

24.-

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, T. Díez-Rojo, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, L. Ramonat, I. Tanarro, J. E. Verdasco

Título: *Relajación Molecular en Expansiones Supersónicas de Nitrógeno*

Tipo de participación: Poster

Lugar de celebración: XVI Reunión Nacional de Espectroscopia, Sevilla, España, (1998)

25.-

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, T. Díez-Rojo, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro, J. E. Verdasco

Título: *Espectroscopia de Ionización Multifotónica Resonante (REMPI) de Radicales y Moléculas*

Tipo de participación: Comunicación oral

Lugar de celebración: XVI Reunión Nacional de Espectroscopia, Sevilla, España, (1998)

26.-

Autores: J. M. Alvaríño, F. J. Aoiz, M. L. Hernández, A. Laganà, T. Martínez, M. Menéndez, E. Verdasco

Título: *Quasiclassical dynamics and stereodynamics of the O(1D) + HCl reaction*

Tipo de participación: Poster

Lugar de celebración: XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI), Asisi, Italia (1999)

27.-

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, T. Díez-Rojo, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro, E. Verdasco

Título: *Low temperature rotational relaxation of N₂ and N₂-He mixtures in free jets studied by resonance enhanced multiphoton ionization*

Tipo de participación: Poster

Lugar de celebración: XVIII International Symposium on Molecular Beams, Ameland, The Netherlands, (1999)

28.-

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, E. Verdasco, I. Zapater

Título: *Photodissociation of dimethyl sulfide at 220-230 nm studied by 2+1 resonance enhanced multiphoton ionization of the CH₃ radical in a molecular beam*

Tipo de participación: Poster

Lugar de celebración: XVIII International Symposium on Molecular Beams, Ameland, The Netherlands (1999)

29.-

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro and E. Verdasco

Título: *Low temperature rotational relaxation of N₂ and mixtures of N₂ with He and Ne in free jets studied by resonance enhanced multiphoton ionization*

Tipo de participación: Poster

Lugar de celebración: XVI Symposium International on Gas Kinetics, Leeds, Reino Unido, (2000)

30.-

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, M. Menéndez, V. Sáez Rábanos, I. Tanarro and E. Verdasco

Título: *Quasi-classical trajectory study of the Cl+H₂, and H+H+HCl reactions and their isotopic variants on a new ab initio potential energy surface*

Tipo de participación: Poster

Lugar de celebración: XVI Symposium International on Gas Kinetics, Leeds, Reino Unido (2000)

31.-

Autores: B. Martínez-Haya, P. Quintana, F. J. Aoiz, L. Bañares, E. Verdasco, M. Menéndez, R. F. Delmdahl, D. H. Parker, P. Samartzis, D. J. Smith, T. N. Kitsopoulos
Título: Fotodisociación del CH₃SCH₃ en la primera banda de absorción
Tipo de participación: Comunicación oral
Lugar de celebración: XVII Reunión Nacional de Espectroscopia León, España (2000)

32.-

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro, J. E. Verdasco
Título: Estudio por fotoionización resonante (REMPI) de la relajación rotacional del N₂ por colisiones con gases nobles a baja temperatura
Tipo de participación: Póster
Lugar de celebración: XVII Reunión Nacional de Espectroscopia, León, España (2000)

33.-

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, B. Martínez-Haya, P. Quintana, E. Verdasco
Título: The photodissociation of CH₃SCH₃ and CD₃SCD₃ in the first absorption band studied by velocity map ion imaging and REMPI
Tipo de participación: Póster
Lugar de celebración: Gordon Research Conference on Molecular Energy Transfer, Ventura, E.E.U.U. (2001)

34.-

Autores: J. Barr, I. Torres, P. Quintana, F. J. Aoiz, L. Bañares, E. Verdasco, B. Martínez-Haya
Título: *Recoil energy, rovibrational population, and alignment of CD₃ fragments following the near ultraviolet photodissociation of dimethyl sulfide-d₆*
5th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics
Tipo de participación: poster
Lisboa, Portugal 23-26 Marzo 2002

35.-

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, E. Verdasco, V. Sáez Rábanos, M. P. Miranda
Título: *Stereodynamics of elementary reactions and inelastic processes: H+D₂ and Ar+NO*
Congreso: *STEREODYNAMICS 2002*
Tipo de participación: Conferencia invitada
Lugar: Schoorl, Holanda. 1-6 Diciembre 2002

36.-

Autores: L. Bañares, J. G. Izquierdo, R. Izquierdo-Hornillos, M. Menéndez, G. Pino y E. Verdasco
Título: Analysis of PAHs and synthetic hormones by laser multiphoton ionization with time-of-flight mass spectrometry and gas chromatography
Tipo de participación: Póster
Lugar de celebración: XVII International Conference on Molecular Energy Transfer. Madrid, Spain, 7-11 Julio (2003)

37.-

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, I. Torres, J. E. Verdasco
Título: Near UV Photodissociation of CD₃SCD₃: CD₃ Fragment (v,J) Vectors Correlations
Tipo de participación: Póster
Lugar de celebración: XVII International Conference on Molecular Energy Transfer. Madrid, Spain, 7-11 Julio (2003)

38.-

Autores: : M. Alexander, F.J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, and J. E. Verdasco

Título: Inelastic Scattering of NO by Ar. A Comparison between Classical Trajectories and Closed-Coupling States-Resolved Differential Cross Sections

Tipo de participación: Póster

Lugar de celebración: XXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. San Lorenzo de El Escorial, Spain, 15-20 Junio (2003)

39.-

Autores: : F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Menéndez, K. A. Peterson, E. Verdasco

Título: A Quasiclassical Trajectory Study of the Dynamics of the $O(^1D)+HBr \rightarrow OH(OBr)+Br(H)$ Reaction on an *Ab Initio* Potential Energy Surface

Tipo de participación: Póster

Lugar de celebración: XVII International Conference on Molecular Energy Transfer. San Lorenzo de El Escorial, Spain, 15-20 Junio (2003)

40.-

Autores: : F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, I. Torres, J. E. Verdasco

Título: Rotational Alignment of the CD_3 Fragment Following the Near UV Photodissociation of CD_3SCD_3

Tipo de participación: Póster

Lugar de celebración: XVII International Conference on Molecular Energy Transfer. San Lorenzo de El Escorial, Spain, 15-20 Junio (2003)

41.-

Autores: R. Bobbenkamp, and H.J. Loesch, M. Menéndez, E. Verdasco and F. J. Aoiz

Título: On the influence of reagent rotation in the reactive process $Li+HF(v=0,j) \rightarrow LiF+H$

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: MOLEC XV, the International Conference on Dynamics of Molecular Systems

Publicación:

Lugar celebración: Nunspeet, The Netherlands

Fecha: 5-10 September 2004

42.-

Autores: R. Bobbenkamp, and H.J. Loesch, M. Menéndez, E. Verdasco and F. J. Aoiz

Título: The dynamics of the reactive process $Li+HF \rightarrow LiF+H$: new experimental and theoretical results

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: International Symposium on Stereodynamics of Chemical Reactions 2004

Publicación:

Lugar celebración: Osaka, Japan

Fecha: 28 November-3 December 2004

43.-

Autores: G. A. Amaral, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, M. Menéndez, G. A. Pino, I. Torres, J. E. Verdasco, V. J. Herrero, I. Tanarro, B. Martínez-Haya

Título: Rotational relaxation at low temperatures in free jets of CO, CO/Ne, and CO/He studied with resonance enhanced multiphoton ionization (REMPI) spectroscopy

Tipo de participación: Póster

Congreso: XIX Colloquium on High Resolution Spectroscopy

Publicación:

Lugar celebración: Salamanca, España

Fecha: 11-15 Septiembre 2005

44.-

Autores: J. G. Izquierdo, G. Pino, M. Menéndez, R. Izquierdo-Hornillos, J. E. Verdasco, L. Bañares

Título: Performance of a gas chromatographic technique with laser multiphoton ionization and time-of-flight mass spectrometry

Tipo de participación: Póster

Congreso: VII Congreso de Fotoquímica

Publicación:

Lugar celebración: Logroño, España

Fecha: 22-24 Junio 2005

45.-

Autores: J G. A. Amaral, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, M. Menéndez, G. A. Pino, I. Torres, J. E. Verdasco, V. J. Herrero, I. Tanarro, B. Martínez-Haya

Título: Free jet study of rotational energy transfer in CO-CO, CO-Ne and CO-He collisions at low temperatures

Tipo de participación: Póster

Congreso: XX Reunión Nacional de Espectroscopia y IV Congreso Ibérico de Espectroscopia

Publicación:

Lugar celebración: Ciudad Real, España

Fecha: 10-14 Septiembre 2006

46.-

Autores: V. Sáez Rábanos, J E. Verdasco, V. J. Herrero, J. Aldegunde, P. G. Jambrina, F. J. Aoiz

Título: Effects of vibrational excitation on the reactivity of D+MuH

Tipo de participación: Póster

Congreso: XXVI International Symposium on Molecular Beams

Publicación:

Lugar celebración: Segovia, España

Fecha: 28 June-3 July 2015

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Tesis Doctorales dirigidas

Título: Estudio de procesos fotoiniciados mediante espectroscopia de ionización multifotónica resonante (REMPI)

(Codirección con Javier Aoiz Molerés)

Doctorando: Pablo Quintana Romojaro

Universidad: Universidad Complutense de Madrid

Facultad / Escuela: Ciencias Químicas

Fecha: 8-Noviembre-2002

Calificación: Sobresaliente Cum Laude

Título:

Doctorando:

Universidad:

Facultad / Escuela:

Fecha:

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Participación en comités y representaciones internacionales

Título del Comité:

Entidad de la que depende:

Tema:

Fecha:

Título del Comité:

Entidad de la que depende:

Tema:

Fecha:

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Experiencia en organización de actividades de I+D
Organización de congresos, seminarios, jornadas, etc., científicos-tecnológicos

Título: Exhibition and Congress on Laser and Electro-Optics
Exhibition and Congress on Laser and Electro-Optics OPTOLEC I

Tipo de actividad: Miembro del comité organizador local Ámbito: Congreso Internacional

Fecha: Madrid, 17-19 Septiembre 2000

Título: XIII International Symposium on Molecular Beams

Tipo de actividad: Miembro del comité organizador local Ámbito: Congreso Internacional

Fecha: El Escorial, Madrid, 2-7 Junio de 1991

Título: Láseres en Medicina e Industria

Tipo de actividad: Secretario Ámbito: Curso Verano de la UCM

Fecha: Aguadulce, Almería, 5-9 Agosto 1991

Título: Aplicaciones analíticas y medioambientales del láser

Tipo de actividad: Secretario Ámbito: Curso Verano de la UCM

Fecha: Aguadulce, Almería, 27-31 Julio 1992

Título: Espectroscopia láser y dinámica molecular

Tipo de actividad: Secretario Ámbito: Curso Verano de la UCM

Fecha: Aguadulce, Almería, 2-6 Agosto 1993

Título: Estereodinámica vía láseres y haces moleculares

Tipo de actividad: Secretario Ámbito: Curso Verano de la UCM

Fecha: Roquetas de Mar, Almería, 11-15 Julio 1994

Título:

Tipo de actividad: Ámbito:

Fecha:

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Experiencia de gestión de I+D
Gestión de programas, planes y acciones de I+D

Título:

Tipo de actividad:

Fecha:

Título:

Tipo de actividad:

Fecha:

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Otros méritos o aclaraciones que se desee hacer constar
(Utilice únicamente el espacio equivalente a una página).

TRAMOS DE INVESTIGACION (sexenios).....	4
TRAMOS DOCENTES (quinquenios).....	5

LIBROS DE TEXTO:

- Colaboración en la traducción del libro de texto *Fisicoquímica* de I. N. Levine, Tercera Edición. Ed. McGraw-Hill Interamericana de España, Madrid 1991.
- Autor de los capítulos 38 y 57 en el libro *Química Física* (J. Núñez Delgado y J. Bertrán Rusca Ed.) (ISBN 84-344-8050-6). Ariel Ciencia. Barcelona 2002.
- Autor del capítulo 8 del libro *Problemas de Química Física* (J. Núñez Delgado y J. Bertrán Rusca Ed.) (ISBN 978-84-96477-48-3). Delta. Madrid. 2006

CURSOS DE VERANO:

2 conferencias invitadas en "Summer School Spectroscopy of the atmospheres" (SPECAT 09): Gas phase chemistry of the troposphere I and II. Jaca (Huesca). Julio 2009