



---

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

---

## Curriculum vitae

Nombre: Francisco Javier Aoiz Moleres

Fecha: 13 noviembre 2016

**ATENCIÓN:** Deben firmarse al margen todas las hojas del curriculum

Apellidos: AOIZ MOLERES

Nombre: FRANCISCO JAVIER

DNI:

Fecha de nacimiento :

Sexo: V

---

### 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](mailto: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 cuasiclásticas. 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 espectroscopia 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. 07G/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 fotoiniados 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*

---

## 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  $C_2H_5X(X=Br,I)+KI \rightarrow KX+C_2H_5$  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  $\text{D}+\text{H}_2(v=0, j=0)\rightarrow\text{HD}(v', j')+\text{H}$ . 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.  Libro  
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.  Libro  
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  Libro  
Clave: A Volumen: 89 Páginas, inicial: 1427 final: 1434 Fecha: 1993

---

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.  Libro  
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.  Libro  
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  Libro  
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.  Libro  
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.  Libro  
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.  Libro  
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.  Libro  
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. 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(<sup>3</sup>P)+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 N<sub>2</sub> 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
- 
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. Alvarino, A. Laganà, F. J. Aoiz, M. Menéndez, E. Verdasco  
 Título: Quasiclassical trajectory simulation of the O(<sup>1</sup>D)+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(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub>→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+H<sub>2</sub>/D<sub>2</sub> 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+D<sub>2</sub> 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 CH<sub>3</sub>SCH<sub>3</sub> 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(<sup>1</sup>D)+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+D<sub>2</sub> 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+H<sub>2</sub>O 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 CD<sub>3</sub>SCD<sub>3</sub> on the first absorption band: Translational and internal energy transfer to CD<sub>3</sub> 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. Läufer, 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(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub>→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(<sup>1</sup>D)+HD reaction on the ground <sup>1</sup>A' and excited <sup>1</sup>A'' 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+D<sub>2</sub>→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 N<sub>2</sub> 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+H<sub>2</sub>/D<sub>2</sub>."

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+H<sub>2</sub> 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+D<sub>2</sub>→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 N<sub>2</sub> 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+H<sub>2</sub>O→OH+H<sub>2</sub> 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)+H<sub>2</sub> 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(<sup>2</sup>D)+H<sub>2</sub>.

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+D<sub>2</sub>→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(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub> 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(<sup>2</sup>D)+H<sub>2</sub> 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(<sup>1</sup>D)+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(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub> 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+D<sub>2</sub>→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+D<sub>2</sub> 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-d<sub>6</sub> at 210 nm: Experimental evidence for a prompt anisotropic CD<sub>3</sub> 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 CD<sub>3</sub>SOCD<sub>3</sub>: 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  Libro  
 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+N<sub>2</sub>O→OH+N<sub>2</sub> 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+D<sub>2</sub> collisions.  
 Ref.  revista: Journal of Chemical Physics  Libro  
 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. Busser-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  Libro  
 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  $OH(2\Pi)$  by  $HCl(1\Sigma)$ : Comparison of experiment and theory."  
 Ref.  revista: Physical Chemistry Chemical Physics  Libro  
 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  Libro  
 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  Libro  
 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  Libro  
 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 CH<sub>3</sub>SH 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+CH<sub>4</sub> 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+H<sub>2</sub> 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+D<sub>2</sub> 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 H<sub>2</sub> 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(X<sup>2</sup>Π)".  
 Ref.  revista: Journal of Chemical Physics (Communication)  Libro  
 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+H<sub>2</sub> 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 H<sub>3</sub><sup>+</sup> 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<sup>+</sup> + 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<sup>+</sup> + D<sub>2</sub> (v=0, j=0) → HD + D<sup>+</sup> 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+H<sub>2</sub> 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 <sup>2</sup>Σ)-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+D<sub>2</sub>. 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 <sup>2</sup>S+<sup>1</sup>Σ radicals by closed shell atoms: Theory and application to OH(A <sup>2</sup>Σ<sup>+</sup>)+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(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub> reaction. A comparison of crossed molecular beam experiments with quantum mechanical and quasiclassical trajectory calculations on the first two singlet (<sup>1</sup>1A' and <sup>1</sup>1A'") 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. Alvariño, F. J. Aoiz, V. J. Herrero, and V. Sáez-Rábanos.  
 Título: "Reaction dynamics of the D<sup>+</sup>+H<sub>2</sub> 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+D<sub>2</sub>(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 Dynamcis". 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. Bargaño, P. G. Jambrina, J. M. Alvariño, M. Menéndez, E. Verdasco, M. Hankel, S. C. Smith, F. J. Aoiz, and T. González-Lezana.  
 Título: "Energy dependent dynamics of the O(<sup>1</sup>D)+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+O<sub>3</sub> 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 + H<sub>2</sub> 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+H<sub>2</sub> 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+H<sub>2</sub> 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<sup>+</sup>+ H<sub>2</sub> and H<sup>+</sup> + D<sub>2</sub> 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+H<sub>2</sub><sup>+</sup> 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  $\Lambda$ -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 + D<sub>2</sub> 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 + D <sub>2</sub> Reaction Dynamics in the Limit of Low Product Recoil Energy".				
Ref. <input checked="" type="checkbox"/> 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 <sup>2</sup> Σ <sup>+</sup> )-Kr: The van der Waals complex and inelastic scattering"				
Ref. <input checked="" type="checkbox"/> 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( <sup>1</sup> D) + H <sub>2</sub> reaction."				
Ref. <input checked="" type="checkbox"/> 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( <sup>1</sup> D) + HF → F + OH mechanism by means of quasiclassical trajectories."				
Ref. <input checked="" type="checkbox"/> 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 + H <sub>2</sub> reaction."				
Ref. <input checked="" type="checkbox"/> 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. <input checked="" type="checkbox"/> 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. <input checked="" type="checkbox"/> 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. <input checked="" type="checkbox"/> 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+H <sub>2</sub> →H+HBr reaction"				
Ref. <input checked="" type="checkbox"/> 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. <input checked="" type="checkbox"/> 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+O<sub>3</sub> 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<sup>+</sup> 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<sup>+</sup> + H<sub>2</sub> 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. Gijbetsen, 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<sup>+</sup> + H<sub>2</sub> → OH<sup>+</sup> + 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 (A<sup>2</sup>Σ<sup>+</sup>) + 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 + D<sub>2</sub> 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 + O<sub>3</sub> 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 + D<sub>2</sub>(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<sup>++</sup> H<sub>2</sub> 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 + D<sub>2</sub> → 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: 10.1063/1.4955294
-

---

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

## 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: 9<sup>th</sup> 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+H<sub>2</sub> 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+H<sub>2</sub>/D<sub>2</sub> 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 H<sub>3</sub> 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 H<sub>3</sub> potential energy surfaces: experimental and quantum mechanical results for the H+D<sub>2</sub>→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 N<sub>2</sub> and N<sub>2</sub>-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 CH<sub>3</sub> 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+H<sub>2</sub>: 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+H<sub>2</sub>→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(<sup>1</sup>D)+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 H<sub>3</sub> 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 N<sub>2</sub> and N<sub>2</sub>-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+H<sub>2</sub>,D<sub>2</sub>,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(<sup>1</sup>D)+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+H<sub>2</sub> 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+D<sub>2</sub> 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 CH<sub>3</sub> 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(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub>O(H(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(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub>, HD reactions on new ab initio potential energy surfaces. A comparison with experimental results

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: 16<sup>th</sup> 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+H<sub>2</sub> and H+HCl reactions and their isotopic variants on a new ab initio potential energy surface

Tipo de participación: Poster

Congreso: 16<sup>th</sup> 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 N<sub>2</sub> and of mixtures of N<sub>2</sub> with He and Ne in free jets studied by resonance enhanced multiphoton ionization

Tipo de participación: Poster

Congreso: 16<sup>th</sup> 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 CH<sub>3</sub>SCH<sub>3</sub> 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 N<sub>2</sub> 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 4<sup>th</sup> 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+D<sub>2</sub> 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+H<sub>2</sub>O and H+D<sub>2</sub>O 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(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub> 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 CH<sub>3</sub>SCH<sub>3</sub> and CD<sub>3</sub>SCD<sub>3</sub> 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+H<sub>2</sub>O and H+D<sub>2</sub>O 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+N<sub>2</sub>O 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+D<sub>2</sub> 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  
 5<sup>th</sup> 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<sub>3</sub> fragments following the near ultraviolet photodissociation of dimethyl sulfide-d<sub>6</sub>*  
 5<sup>th</sup> 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<sub>2</sub>O and H+D<sub>2</sub>O reactions*  
 5<sup>th</sup> 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<sub>2</sub>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<sub>2</sub>(D<sub>2</sub>)*  
 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<sub>2</sub>*  
 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<sub>2</sub> 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 → 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. Alvariano, 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  $CD_3SOC D_3$  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-Nuñez, 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. 6<sup>th</sup> 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 CD<sub>3</sub>SCD<sub>3</sub>: CD<sub>3</sub> fragment (v,J) vector correlations*  
*XXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. 6<sup>th</sup> 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 CD<sub>3</sub>SOCD<sub>3</sub> at 220 nm: internal and translational energy distribution of the CD<sub>3</sub> fragment*  
*XXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. 6<sup>th</sup> 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 H<sub>2</sub> elimination in the photodissociation of difluoroethylenes at 193 nm*  
*XXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. 6<sup>th</sup> 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+N<sub>2</sub>O reaction*  
*XXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. 6<sup>th</sup> 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+CH<sub>4</sub> reaction using an ab initio potential energy surface constructed by interpolation*  
*27<sup>th</sup> 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(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub> and N(<sup>2</sup>D)+H<sub>2</sub>*  
*27<sup>th</sup> 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+CH<sub>4</sub> reaction using an ab initio potential energy surface constructed by interpolation*  
 27<sup>th</sup> 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: 27<sup>th</sup> 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+D<sub>2</sub> reaction: how the direction of the initial rotation does control the reactivity."  
 Congreso: 18<sup>th</sup> 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: STERODYNAMICS 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+D<sub>2</sub> 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(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub> and N(<sup>2</sup>D)+H<sub>2</sub>."  
 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° Congresso 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(<sup>2</sup>D)+H<sub>2</sub> 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+CH<sub>4</sub>(CD<sub>4</sub>) 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+D<sub>2</sub>(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+CH<sub>4</sub> 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: 10<sup>th</sup> International Workshop on Quantum Reactive Scattering. (QRS 10<sup>th</sup>)  
 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: 14<sup>th</sup> 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+H<sub>2</sub> 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+O<sub>3</sub> 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.  
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: "Multiple-slit interferences in reactive scattering."  
 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: "Multiple-slit interferences in reactive scattering."  
 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

#### 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  $F+H_2(D_2,HD)$ . 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  $F+H_2(D_2,HD)$  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.

## 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. Alvario.

---

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. Alvario.

---

Título: Dinámica y estereodinámica de colisiones átomo-diátomo reactivas e inelásticas.  
Calificación: Sobresaliente cum laude.  
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  $H_2+H_2$   
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

---

## 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

---

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

---

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

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: Desde enero de 2010

## 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 |

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.- | Periodo 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*
- Referee habitual de *J. Chem. Phys.*, *J. Phys. Chem.*, *Chem. Phys. Lett.*, etc.

## CITAS DE ARTÍCULOS CIENTÍFICOS SIGNIFICATIVOS PUBLICADOS ENTRE 1991-2010 (ACTUALIZADO A Noviembre de 2014)

**h index=43**

**Average Citations per Item: 25.49**

<b>1991</b>	
J. Chem. Phys. 94 7991-8007 (1991)	58
<b>1992</b>	
Journal Chem. Physics, 97, 7423-7436, (1992)	131
<b>1993</b>	
29. J. Chem. Soc. Faraday Trans., 89, 1427 (1993)	81
<b>1994</b>	
33. Chem. Phys. Lett., 218, 422-432 (1994)	42
34. Chem. Phys. Lett., 223, 215 (1994)	94
36. J. Chem. Phys., 101, 5781 (1994)	53
37. J. Phys. Chem., 98, 10665 (1994)	51
<b>1995</b>	
38. J. Chem. Phys., 102, 9248 (1995)	79
39. Science, 269, 207 (1995)	126
<b>1996</b>	
J. Phys. Chem. 100, 4071-4083(1996)	35
46. J. Chem. Phys. 105, 4964-4982 (1996)	209
49. Science, 273, 1519 (1996)	89
Chem. Phys. Lett. 262 589-597 (1996)	42
Chem. Phys. Lett. 256 561-568 (1996)	40
<b>1997</b>	
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
<b>1998</b>	
J. Chem. Phys. 108, 6160-6169 (1998)	37
J. Chem. Soc. Faraday Trans., 94, 2483 (1998)	145
J. Chem. Phys., 109, 7244 (1998)	77
<b>1999</b>	
Physical Chemistry Chemical Physics 1, 1149-1158 (1999)	31
J. Chem. Phys. 110, 9971-9981 (1999)	50
J. Chem. Phys. 111, 5368-5383 (1999)	75
J. Chem. Phys. 111, 4013-4024 (1999)	69
<b>2000</b>	
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)	56
Physical Chemistry Chemical Physics 2, 541-548 (2000)	22
<b>2001</b>	
Journal of Chemical Physics 114 (24): 10662-10672 (2001)	34
Phys. Rev. Lett. 86 (9): 1729-1732 (2001)	76
Journal of Chemical Physics 115 (5): 2074-2081 (2001)	22
<b>2002</b>	
Journal of Chemical Physics 116 (24): 10692-10703 (2002)	57
Physical Review Letter 89 (1) 013201 (2002)	77
<b>2003</b>	
J. Chem. Phys. 118 565-568 (2003)	156
<b>2004</b>	
J. Phys. Chem. A 108, 1616 (2004)	59
J. ChemPhys. 120, 3244 (2004)	42
<b>2005</b>	
Int. Rev. Phys. Chem. 24, 119-190 (2005)	62
J. Phys. Chem. 109, 6200-6217 (2005)	40
<b>2006</b>	
Journal of Physical Chemistry A 110 12546 (2006)	47
Journal of Physical Chemistry A 110 817-829 (2006)	67
<b>2011</b>	
Nature Chemistry 3, 597-602 (2011)	24
<b>2012</b>	
Science 336, 1687-1690 (2012)	14
J. Phys. Chem. Lett. 3, 493-497 (2012)	18



---

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

---

## **Curriculum vitae**

Nombre: Luis Bañares Morcillo

Fecha: 11/11/2016

**ATENCION:** Deben firmarse al margen todas las hojas del curriculum

Apellidos: BAÑARES MORCILLO

DNI:

Fecha de nacimiento :

Nombre: LUIS

Sexo: V

---

### Situación profesional actual

Organismo: UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

Facultad, Escuela o Instituto: CIENCIAS QUIMICAS

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

Dirección postal: Avda. Complutense s/n, 28040 Madrid

Teléfono (indicar prefijo, número y extensión): 913944228

Fax: 913944135

Correo electrónico: banares@quim.ucm.es

Especialización (Códigos UNESCO):

Categoría profesional: CATEDRATICO DE UNIVERSIDAD Fecha de inicio: 29/1/2007

Situación administrativa

Plantilla

Contratado

Interino

Becario

Otras situaciones especificar:

Dedicación A tiempo completo

A tiempo parcial

---

Organismo: CENTRO DE LÁSERES ULTRARRÁPIDOS

Facultad, Escuela o Instituto: CIENCIAS QUÍMICAS

Depto./Secc./Unidad estr.:

Dirección postal: Avda. Complutense s/n , 28040 Madrid

Teléfono (indicar prefijo, número y extensión): 913944321

Fax: 913944315

Correo electrónico: lbanares@ucm.es

Especialización (Códigos UNESCO):

Categoría profesional: DIRECTOR

Fecha de inicio: 1/1/2014

---

### Líneas de investigación

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

Dinámica molecular de las reacciones químicas. Femtoquímica. 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	1985

Doctorado	Centro	Fecha
Ciencias Químicas	Universidad Complutense de Madrid	1990

**Actividades anteriores de carácter científico profesional**

---

Puesto	Institución	Fechas
Ayudante de Facultad	Universidad Complutense de Madrid	1/10/89-30/9/94
Profesor Asociado (tiempo completo)	Universidad Complutense de Madrid	1/10/94-23/7/98
Visiting associate	California Institute of Technology (EE.UU.)	09/90-09/92
Becario Alexander von Humboldt	Universidad de Würzburg (Alemania)	1995-96
Profesor Titular de Universidad	Universidad Complutense de Madrid	24/7/98-28/1/07

---

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

Idioma	Habla	Lee	Escribe
Inglés	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. PB88/146

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

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 1989

hasta: 1992

Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Angel González Ureña

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Experimentos con haces moleculares. PB91/357

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

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 1993

hasta: 1996

Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Angel González Ureña

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Molecular Beam Studies. Proyecto coordinado de la Comunidad Económica Europea EEC SC1-0006-C

Entidad financiadora: C.E.E.

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Universidades de Manchester, Perugia y Amsterdam

Duración, desde: 1989

hasta: 1991

Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Angel González Ureña

Número de investigadores participantes:

---

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: 420.000 ptas.

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes:

---

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

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Explorando superficies de energía potencial ab initio para reacciones bimoleculares elementales. Cálculos dinámicos clásicos y mecanocuánticos y comparación directa con los experimentos. 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: 760.000 ptas.  
Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés  
Número de investigadores participantes: 5

---

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-C03-01

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: 16.840.000 ptas. (total proyecto coordinado 31.620.000 ptas)  
Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés  
Número de investigadores participantes: 5 (UCM); 10 total

---

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: 32.000.000 ptas  
Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés  
Número de investigadores participantes: 5

---

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-C03-01.

Entidad financiadora: D.G.I.C.Y.T.  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid  
Duración, desde: 2000 hasta: 2002 Cuantía de la subvención: 11.000.000 ptas. (UCM)  
Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés  
Número de investigadores participantes: 5

---

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: Unión Europea  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Universidad de Oxford, Universidad de Perugia, Universidad de Stuttgart, Universidad de Munich, Universidad de Nijmegen  
Duración, desde: 2000 hasta: 2004 Cuantía de la subvención: 150000 euros (UCM); total 1.499.000 euros  
Investigador responsable: Piergiorgio Casavecchia (Universidad de Perugia)  
Número de investigadores participantes: 10 (parte española)

---

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: 2001 Cuantía de la subvención: 1.320.000 ptas.



Investigador responsable: Francisco 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 Hispano-Alemañ Acciones Integradas HA1999-0050

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Cultura  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Universidad de Heidelberg  
Duración, desde: 2000 hasta: 2001 Cuantía de la subvención:  
Investigador responsable: Victor J. Herrero Ruíz de Loizaga  
Número de investigadores participantes: 3

---

Título del proyecto: Photodissociation of dimethyl sulfide using nanosecond and femtosecond lasers and imaging and photoelectron techniques.

Entidad financiadora: Human Potential Programme of EC. IHP-ARI action. Contract HPRI-CT-1999-00074. Financiación: acceso durante 10 días al Ultraviolet Laser Facility at FORTH (Ref. LB00402). Creta. Grecia.  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid- Ultraviolet Laser Facility at FORTH. Creta. Grecia  
Duración, desde: 2000 hasta: Cuantía de la subvención: viaje y dietas para 3 investigadores  
Investigador responsable: Luis Bañares Morcillo  
Número de investigadores participantes: 3

---

Título del proyecto: Desarrollo de métodos analíticos por HPLC-DAD, GC-MS y GC-REMPI/TOFMS para la determinación de hormonas sintéticas (trembolona, dietilestilbestrol, zeranol y similares) en piensos y agua destinada al consumo animal. Proyecto 07G/0044/2000.

Entidad financiadora: Consejería de Educación. Comunidad de Madrid  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid  
Duración, desde: 2001 hasta: 2002 Cuantía de la subvención: 3.565.000 ptas  
Investigador responsable: Roberto Izquierdo Hornillos  
Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Summer School on Femtochemistry and Femtobiology

Entidad financiadora: European Science Foundation  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid  
Duración, desde: 2000 hasta: Cuantía de la subvención: 9.000 euros  
Investigador responsable: Luis Bañares Morcillo  
Número de investigadores participantes: 2

---

Título del proyecto: Sistema láser de femtosegundo

Entidad financiadora: Unión Europea-Universidad Complutense de Madrid (Fondos FEDER)  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid  
Duración, desde: 2002 hasta: Cuantía de la subvención: 601.012 euros  
Investigador principal: Luis Bañares Morcillo  
Número de investigadores participantes: 3

---

Título del proyecto: Estudio experimental y teórico de la dinámica de fotodisociación y reacciones fotoinducidas con detección de

moléculas y radicales por espectroscopia láser multifotónica (BQU2002-04627-C02)

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

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2003

hasta: 2005

Cuantía de la subvención: 140.000 euros

Investigador principal: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes:9

---

Título del proyecto: 7th Workshop on Quantum Reactive Scattering

Entidad financiadora: Universidad Complutense de Madrid

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2003

hasta: 2003

Cuantía de la subvención: 1.800 euros

Investigador principal: Luis Bañares Morcillo

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: XVIII European Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVIII)

Entidad financiadora: European Science Foundation. ULTRA Network

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2003

hasta: 2003

Cuantía de la subvención: 7.000 euros

Investigador principal: Luis Bañares Morcillo

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: XVIII European Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVIII)

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2003

hasta: 2003

Cuantía de la subvención: 10.000 euros

Investigador principal: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes:3

---

Título del proyecto: Desarrollo de métodos analíticos por HPLC-DAD, GC-MS y GC-REMPI/TOFMS para la determinación de compuestos de acción hormonal (corticosteroides y anabolizantes) en piensos y aguas destinados al consumo animal (07G/0044/2000)

Entidad financiadora: Consejería de Educación. Comunidad de Madrid

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2004

hasta: 2004

Cuantía de la subvención: 45.802 euros

Investigador principal: Roberto Izquierdo Hornillos

Número de investigadores participantes:4

---

Título del proyecto: Ampliación de Sistema Láser de Femtosegundo

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología/Universidad Complutense de Madrid/ FEDER

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2004

hasta: 2004

Cuantía de la subvención: 195.838,53 euros

Investigador principal: Luis Bañares Morcillo

Número de investigadores participantes:5

---

Título del proyecto: Dinámica y control de la fotodisociación multicanal y de la fotoionización disociativa de moléculas pequeñas por medio de pulsos láser de femtosegundo y técnicas de imágenes

Entidad financiadora: Programa de Intercambio Hispano-Alemán *Acciones Integradas* HA2003-0047. Ministerio de Ciencia y Tecnología

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid y Universidad de Kassel (Alemania)

Duración, desde: 2004

hasta: 2005

Cuantía de la subvención: 10.608 euros

Investigador principal: Luis Bañares Morcillo  
Número de investigadores participantes:4

---

Título del proyecto: Desarrollo y puesta a punto de técnicas de caracterización y micromecanizado de materiales con pulsos láser de femtosegundos

Entidad financiadora: Consejería de Educación de la Comunidad Autónoma de Madrid GR/MAT/0494/2004  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid  
Duración, desde: 2005 hasta: 2005 Cuantía de la subvención: 38.525 euros  
Investigador principal: Luis Bañares Morcillo  
Número de investigadores participantes:5

---

Título del proyecto: Estudio de la dinámica molecular de procesos químicos mediante técnicas láser de nanosegundo y femtosegundo y métodos teóricos

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia CTQ2005-08493-C02-01  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid  
Duración, desde: 2006 hasta: 2008 Cuantía de la subvención: 160.000 euros  
Investigador principal: Luis Bañares Morcillo  
Número de investigadores participantes:10

---

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: Dinámica molecular de las reacciones químicas y femtoquímica

Entidad financiadora: UCM-Comunidad de Madrid. Grupo 910729  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid  
Duración, desde: 2006 hasta: 2006 Cuantía de la subvención: 15.210 euros  
Investigador principal: Francisco Javier Aoiz Molerés  
Número de investigadores participantes:10

---

Título del proyecto: UV photodissociation of acetaldehyde by slice imaging: the CH<sub>4</sub>+CO molecular channel

Entidad financiadora: EC Contract: RII3-CT-2003-506350. Project ULF-FORTH 001302  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, FORTH Creta (Grecia)  
Duración, desde: 2006 hasta: 2006 Cuantía de la subvención: acceso de 4 semanas para  
investigadores  
Investigador principal: Luis Bañares Morcillo  
Número de investigadores participantes:3

---

Título del proyecto: Dinámica molecular de las reacciones químicas y femtoquímica

Entidad financiadora: UCM-Comunidad de Madrid. Grupo 910729  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid  
Duración, desde: 2007 hasta: 2007 Cuantía de la subvención: 14.000 euros  
Investigador principal: Francisco Javier Aoiz Molerés  
Número de investigadores participantes:10

---

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

Título del proyecto: Science and applications of ultrafast ultraintense lasers (SAUUL)

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Entidades 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

Duración, desde: 2008 hasta: 2012 Cuantía de la subvención: 4.500.000 euros

Investigador coordinador: Luis Roso Franco (Universidad de Salamanca)

Investigador principal de la UCM: Luis Bañares Morcillo

Número de investigadores participantes:50

---

Título del proyecto: Adquisición de un sistema láser de nanosegundos de estado sólido

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia. Ayudas en forma de anticipos reembolsables para proyectos de infraestructura científico-tecnológica. UCMA06-33-054

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2008 hasta: 2008 Cuantía de la subvención: 352.333,76 euros

Investigador principal: Luis Bañares Morcillo

Número de investigadores participantes:10

---

Título del proyecto: Dynamic strong field control of photodissociation processes

Entidad financiadora: Programa de Intercambio Hispano-Alemán *Acciones Integradas* HA2007- 0094. Ministerio de Educación y Ciencia

Entidades participantes: Consejo Superior de Investigaciones Científicas y Universidad de Kassel (Alemania)

Duración, desde: 2008 hasta: 2009 Cuantía de la subvención: 11.490 euros

Investigador principal: Rebeca de Nalda Mínguez

Número de investigadores participantes:5

---

Título del proyecto: Estructura y reactividad de moléculas bioactivas solvatadas en agregados de van der Waals: estudio espectroscópico y de la dinámica en tiempo real (femtosegundos)

Entidad financiadora: Ayudas para programas de cooperación interuniversitaria e investigación científica entre España e Iberoamérica. Agencia Española de Cooperación Internacional. Ministerio de Asuntos Exteriores. A/7763/07

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid y Universidad Nacional de Córdoba (Argentina)

Duración: 2008 Cuantía de la subvención: 23.000 euros

Investigador principal: Luis Bañares Morcillo

Número de investigadores participantes:5

---

Título del proyecto: Chemistry With Ultrashort Pulses and Free-Electron Lasers: Looking for Control Strategies Through "Exact" Computations

Entidad financiadora: COST Action: CM0702 (Proposal OC-2007-1-1076)

Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid, Universidad Complutense de Madrid, ...

Duración, desde: 2008 hasta: Cuantía de la subvención:

Investigador principal: Fernando Martín (Universidad Autónoma de Madrid)

Número de investigadores participantes:>50

---

Título del proyecto: Dinámica molecular de las reacciones químicas y femtoquímica

Entidad financiadora: UCM-Comunidad de Madrid. Grupo 910729

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2008 hasta: 2008 Cuantía de la subvención: 12.782,40 euros

Investigador principal: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes:10

---

Título del proyecto: VUV photodissociation of acetonitrile by slice imaging

Entidad financiadora: EC Contract: RII3-CT-2003-506350. Project ULF-FORTH 00143  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, FORTH Creta (Grecia)  
Duración, desde: 2008 hasta: 2008 Cuantía de la subvención: acceso de 4 semanas para 4 investigadores  
Investigador principal: Luis Bañares Morcillo  
Número de investigadores participantes:4

---

Título del proyecto: Ultrafast control of quantum systems by strong laser fields (FASTQUAST)

Entidad financiadora: Marie Curie Initial Training Networks (ITN). Proyecto: PITN-GA-2008-214962  
Entidades 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)  
Duración, desde: 2008 hasta: 2012 Cuantía de la subvención: 5 Meuro  
Investigador principal: Rebeca de Nalda Mínguez  
Número de investigadores participantes:>50

---

Título del proyecto: Dinámica de procesos químicos: Experimentos fotoiniciados con láseres de nanosegundo y femtosegundo y métodos teóricos

Entidad financiadora: Subdirección General de Proyectos de Investigación. Ministerio de Ciencia e Innovación. Proyecto CTQ2008-02578/BQU  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid  
Duración, desde: 2009 hasta: 2013 Cuantía de la subvención: 408.000 euros  
Investigador principal: Francisco Javier Aioz Moleres  
Número de investigadores participantes:10

---

Título del proyecto: Dinámica molecular de las reacciones químicas y femtoquímica

Entidad financiadora: UCM-Comunidad de Madrid. Grupo 910729  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid  
Duración, desde: 2009 hasta: 2010 Cuantía de la subvención: 9.300 euros  
Investigador principal: Francisco Javier Aioz Moleres  
Número de investigadores participantes:10

---

Título del proyecto: New methods for the generation of phase-stabilized laser pulses in the ultraviolet and extreme ultraviolet ranges

Entidad financiadora: Programa de Intercambio Hispano-Portugués Acciones Integradas. Ministerio de Ciencia e Innovación  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Instituto de Ciencias Fotónicas, Universidad de Oporto  
Duración, desde: 2009 hasta: 2010 Cuantía de la subvención: 9.000 euros  
Investigador principal: Rosa Weigand Talavera (Investigador portugués: Elder Crespo)  
Número de investigadores participantes:10

---

Título del proyecto: Congreso ECAMP10. 10th European Conference on Atoms, Molecules and Photons

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación  
Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid, Universidad Complutense de Madrid, CSIC, Universidad de Barcelona, Universidad de Salamanca  
Duración, desde: 2010 hasta: 2010 Cuantía de la subvención: 19.000 euros  
Investigador principal: Fernando Martín García  
Número de investigadores participantes:5

---

Título del proyecto: Congreso FEMTO10: The Madrid Conference on Femtochemistry

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación. Proyecto CTQ2010-10959-E/BQU

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, CSIC  
Duración, desde: 2011 hasta: 2011 Cuantía de la subvención: 8.000 euros  
Investigador principal: Luis Bañares Morcillo  
Número de investigadores participantes: 4

---

Título del proyecto: Dinámica molecular de las reacciones químicas y femtoquímica

Entidad financiadora: Programa de creación y consolidación de grupos de investigación UCM-Santander. Grupo 910729. Convocatoria GR35/10-A.  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid  
Duración, desde: 2011 hasta: 2011 Cuantía de la subvención: 3.688,53 euros  
Investigador principal: Francisco Javier Aoiz Moleres  
Número de investigadores participantes:10

---

Título del proyecto: Photodissociation of nitromethane at 193 nm

Entidad financiadora: EU FP7 programs LASERLAB-EUROPE II (Grant No. 228334)  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, FORTH Creta (Grecia)  
Duración, desde: 2012 hasta: Cuantía de la subvención:  
Investigador principal: Luis Bañares Morcillo  
Número de investigadores participantes:4

---

Título del proyecto: Dinámica de procesos moleculares con láser y métodos teóricos

Entidad financiadora: Subdirección General de Proyectos de Investigación. Ministerio de Ciencia e Innovación. Proyecto CTQ2012-37404-C02-01  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid  
Duración, desde: 2013 hasta: 2015 Cuantía de la subvención: 217.000 euros  
Investigador principal: Francisco Javier Aoiz Moleres  
Número de investigadores participantes: 12

---

Título del proyecto: Renovación de un equipo de fluorescencia resuelta en tiempos en la escala de femtosegundos

Entidad financiadora: Programa Campus de Excelencia Internacional (fondo 092CEMONOI). Campus Moncloa  
Entidades participantes: CAI de Láseres Ultrarrápidos, Universidad Complutense de Madrid  
Duración, desde: 2013 hasta: Cuantía de la subvención: 138.556 euros  
Investigador principal: Luis Bañares Morcillo  
Número de investigadores participantes: 5

---

Título del proyecto: Funcionamiento y mantenimiento de equipos de espectrofotometría específicos (RSD)

Entidad financiadora: Contrato de Asesoría (Art. 83) con Remote Sensing Lab S.L.  
Entidades participantes: CAI de Láseres Ultrarrápidos, Universidad Complutense de Madrid  
Duración, desde: 2014 hasta: Cuantía de la subvención: 2.500 euros  
Investigador principal: Luis Bañares Morcillo  
Número de investigadores participantes: 2

---

Título del proyecto: Photodissociation dynamics of acrolein at various UV and VUV wavelengths studied by slice imaging

Entidad financiadora: EC Contract: 284464 (7<sup>th</sup> Framework Program). Project ULF-FORTH002034  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, FORTH Creta (Grecia)  
Duración, desde: 2014 hasta: Cuantía de la subvención: Acceso 4 semanas  
Investigador principal: Luis Bañares Morcillo  
Número de investigadores participantes:3

---

Título del proyecto: Diseño multiescala de materiales avanzados DIMMAT

Entidad financiadora: Programa de Actividades de I+D entre grupos de investigación de la Comunidad de Madrid en Tecnologías 2013. ÁREA 2: NANOCIENCIA, MATERIALES AVANZADOS, TECNOLOGÍAS INDUSTRIALES Y TRANSPORTE (MIT). Proyecto S2013/MIT-2775.

Entidades participantes: IMDEA Materiales, CSIC, Universidad Politécnica de Madrid, Universidad Carlos III de Madrid, Universidad Complutense de Madrid,

Duración, desde: 2015 hasta: 2018 Cuantía de la subvención: 888.475 euros

Investigador coordinador: María Teresa Pérez Prado (IMDEA Materiales)

Investigador principal UCM: Luis Bañares Morcillo

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Red española sobre ciencia, aplicaciones y tecnología de los láseres ultrarrápidos

Entidad financiadora: Subdirección General de Proyectos de Investigación. Ministerio de Economía y Competitividad. Proyecto FIS2014-59264-REDC

Entidades 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

Duración, desde: 2015 hasta: 2016 Cuantía de la subvención: 35.000 euros

Investigador coordinador: Luis Roso Franco

Investigador principal UCM: Luis Bañares Morcillo

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Intermolecular coulombic decay in large photoactivated systems

Entidad financiadora: EC Contract: 284464 (7<sup>th</sup> Framework Program). Project MBI002126

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Max Born Institute, Berlín (Alemania)

Duración, desde: 2015 hasta: Cuantía de la subvención: Acceso 4 semanas

Investigador principal: Luis Bañares Morcillo

Número de investigadores participantes:3

---

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

Entidad financiadora: Subdirección General de Proyectos de Investigación. Ministerio de Ciencia e Innovación. Proyecto CTQ2015-65033-P

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2016 hasta: 2018 Cuantía de la subvención: 223.400 euros

Investigador principal: Francisco Javier Aoz Molerés y Luis Bañares Morcillo

Número de investigadores participantes: 15

---

Título del proyecto: In search of intramolecular coulombic decay in a polyatomic dissociating molecule

Entidad financiadora: EC Contract: 654148 (H2020). Project MBI002239

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Max Born Institute, Berlín (Alemania)

Duración, desde: 2016 hasta: Cuantía de la subvención: Acceso 4 semanas

Investigador principal: Luis Bañares Morcillo

Número de investigadores participantes: 4

---

Título del proyecto: UV-VUV photodissociation dynamics of nitromethane and acetaldehyde with universal detection

Entidad financiadora: EC Contract: 654148 (H2020). Project ULF-FORTH002262

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, FORTH Creta (Grecia)

Duración, desde: 2016 hasta: Cuantía de la subvención: Acceso 4 semanas

Investigador principal: Luis Bañares Morcillo

Número de investigadores participantes: 4

---

## 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): L. Bañares, J. Alonso, M. Menzinger, A. González Ureña

Título: Microcanonical Variational Transition State Theory: Quasi-collinear configurations. Application to the Cl+ICH<sub>3</sub>->CII+CH<sub>3</sub> excitation function

Ref.  revista : J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2  Libro  
Clave: A Volumen: 82 Páginas, inicial: 1033 final: Fecha: 1986  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): L. Bañares Morcillo, A. González Ureña, M. Menzinger

Título: *Isotope effect on the location of Variational Transition State: The Hydrogen Exchange Reaction*

Ref.  revista: Int. J. Chem. Kin.  Libro  
Clave: A Volumen: 18 Páginas, inicial: 1079 final: Fecha: 1986  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

- 3.- F.J. Aoiz, L. Bañares, F.L. Tabarés, A. González Ureña  
*Reactor de flujo rápido de gases con descarga de microondas y detección por fluorescencia inducida por láser. Aplicación a reacciones tipo NH<sub>2</sub><sup>+</sup> molécula orgánica*  
Studia Chemica, **11**, 227 (1986). Clave: A
- 4.- M. Menéndez, L. Bañares, J. Alonso, A. González Ureña  
*Communication on Variational Transition State Theory*  
Faraday Discuss. Chem. Soc., **84**, 463 (1987). Clave: A
- 5.- M. Menéndez, L. Bañares, J. Alonso, A. González Ureña  
*Kinematics and Dynamical effects in the total and differential excitation functions. A Variational Transition State Theory Analysis*  
Chem. Phys., **120**, 273 (1988). Clave: A
- 6.- J. Alonso, L. Bañares, M. Menéndez, A. González Ureña  
*Variational Transition State Calculation: Collision energy dependence of the M+RX→MX+R (M=Alkali, X=Halogen, R=Radical) reaction family*  
Can. J. Chem., **66**, 1410 (1988). Clave: A
- 7.- M. Menéndez, L. Bañares, A. González Ureña, J. C. Whitehead  
*Classical trajectory studies of the reagent rotational energy dependence for the reactions X+CH<sub>3</sub>I→XI+CH<sub>3</sub> (X=Na, F)*  
J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2, **82**, 1765 (1988). Clave: A
- 8.- L. Bañares, A. González Ureña  
*Simple oven design for highly reactive metal beam applications*  
J. Phys. E, Sci. Instrum., **22**, 1046 (1989). Clave: A
- 9.- L. Bañares, A. González Ureña, A. Aguilar-Navarro



- Collision dynamics of the Cs+ICH<sub>3</sub>→Csl+CH<sub>3</sub>: Backward versus sideways scattering as a function of collision energy*  
J. Chem. Soc., Faraday Trans., **86**, 2063 (1990). Clave: A
- 10.- L. Bañares, M. Menéndez, J.C. Whitehead, J.G. Muga, A. González Ureña  
*Classical trajectory studies versus statistical model predictions of the reagent rotational energy dependence for the reaction Cl+ICH<sub>3</sub>→ClI+CH<sub>3</sub>*  
Chem. Phys., **146**, 139 (1990). Clave: A
- 11.- L. Bañares, A. González Ureña  
*Collision energy effects in the Cs+ICH<sub>3</sub>→Csl+CH<sub>3</sub>*  
J. Chem. Phys., **93**, 6473 (1990). Clave: A
- 12.- L. Bañares, A. Aguilar-Navarro, A. González Ureña  
*Estudio dinámico molecular de la reacción Cs+ICH<sub>3</sub>→Csl+CH<sub>3</sub> por la técnica de haces moleculares*  
Anales de Física, **86**, 140 (1990). Clave: A
- 13.- A. González Ureña, E. Verdasco, L. Bañares, M. Menéndez  
*Dinámica de las reacciones químicas por haces moleculares*  
Revista de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, **84**, 363 (1990). Clave: A
- 14.- L. Bañares, A. González Ureña  
*Laser induced crossed-beam charge transfer: Energy threshold of the Na(3<sup>2</sup>P<sub>3/2</sub>)+I<sub>2</sub>→Na<sup>+</sup>+I<sub>2</sub><sup>-</sup> channel*  
Chem. Phys. Lett., **176**, 178 (1991). Clave: A
- 15.- A. Heikal, L. Bañares, D. H. Semmes, A. H. Zewail  
*Real-time dynamics of vibrational predissociation in anthracene-Ar<sub>n</sub> (n=1,2,3)*  
Chem. Phys., **156**, 231 (1991). Clave: A
- 16.- L. Bañares, A. González Ureña  
*Attacking atom effects in the M (M=Na, K, Rb, Cs)+CH<sub>3</sub>I→MI+CH<sub>3</sub> Collision Dynamics*  
J. Phys. Chem., **95**, 8219 (1991). Clave: A
- 17.- L. Bañares, A. González Ureña  
*Measurement of chemi-ionization processes using a microchannel plate ion detector*  
Meas. Sci. Technology, **2**, 989 (1991). Clave: A
- 18.- L. Bañares, M. G. Velarde, A. González Ureña  
*Laser-induced crossed-beam charge transfer: collision energy effects of Na(3<sup>2</sup>P<sub>3/2,1/2</sub>)+I<sub>2</sub>→Na<sup>+</sup>+I<sub>2</sub><sup>-</sup> system*  
J. Chem. Phys., **95**, 5474 (1991). Clave: A
- 19.- L. Bañares, S. Skowronek, C. Perdiguero, A. González Ureña  
*Laser induced charge transfer under crossed-beam conditions: applications to the Na+I<sub>2</sub>→Na<sup>+</sup>+I<sub>2</sub><sup>-</sup> system*  
Laser Chem., **12**, 33 (1992). Clave: A
- 20.- L. Bañares, A. González Ureña  
*Chemiionization cross-section by time profile measurements under crossed-beam conditions. The Ba+Cl<sub>2</sub>→BaCl<sup>+</sup>+Cl<sup>-</sup> reaction*  
J. Molecular Structure (Theochem), **258**, 271 (1992). Clave: A
- 21.- L. Bañares, A. A. Heikal, A. H. Zewail  
*Ultrafast dynamics of isomerization reactions: structural effects in stilbene(s)*  
J. Phys. Chem., **96**, 4127 (1992). Clave: A
- 22.- A. González Ureña, L. Bañares, E. Verdasco  
*Simple surface ionization detector for total reactive scattering measurements*  
Meas. Sci. Technology, **3**, 1109 (1992). Clave: A

- 23.- S. Pedersen, L. Bañares, A. H. Zewail  
*Femtosecond vibrational transition-state dynamics in a chemical reaction*  
J. Chem. Phys., **97**, 8801 (1992). Clave: A
- 24.- J.L. Herek, S. Pedersen, L. Bañares, A. H. Zewail  
*Femtosecond real-time probing of reactions IX: Hydrogen atom transfer*  
J. Chem. Phys., **97**, 9046 (1992). Clave: A
- 25.- S. Skowronek, L. Bañares, A. González Ureña  
*High resolution laser-beam spectroscopy using a continuous tunable narrow-band dye laser*  
*Laser Beam Characterization*, P.M. Mejías, H. Weber, R. Martínez-Herrero, A. González Ureña Editors, Real Sociedad Española de Optica, Madrid 1993. Clave: CL
- 26.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos  
*Classical dynamics calculations for the  $F+H_2 \rightarrow HF+H$  reaction on two recent potential energy surfaces*  
Chem. Phys. Lett., **218**, 422 (1994). Clave: A
- 27.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, K. Stark, H.J. Werner  
*Classical dynamics of the  $F+H_2 \rightarrow HF+H$  reaction on a new ab initio potential energy surface. A direct comparison with experiment*  
Chem. Phys. Lett., **223**, 215 (1994). Clave: A
- 28.- F. J. Aoiz, L. Bañares, M. J. D'Mello, V.J. Herrero, V. Sáez Rábanos, L. Schnieder, R.E. Wyatt  
*Quantum mechanical and quasi-classical calculations for the  $H+D_2 \rightarrow HD+D$  reaction. Reaction probabilities and differential cross sections*  
J. Chem. Phys., **101**, 5781 (1994). Clave: A
- 29.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero and V. Sáez Rábanos  
*Energy dependence of the reaction cross section for the  $F+H_2 \rightarrow HF+H$  reaction from quasi-classical trajectory calculations*  
Chem. Phys., **187**, 227 (1994). Clave: A
- 30.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, K. Stark, H.-J. Werner  
*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*  
J. Phys. Chem., **98**, 10665 (1994). Clave: A
- 31.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, K. Stark, H.-J. Werner  
*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*  
J. Chem. Phys., **102**, 9248 (1995). Clave: A
- 32.- 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  
*Experimental studies and theoretical predictions for the  $H+D_2 \rightarrow HD+D$  reaction*  
Science, **269**, 207 (1995). Clave: A
- 33.- F. J. Aoiz, L. Bañares  
*Vibrational energy effects on the classical dynamics of the  $Cl+HD(v=0,1) \rightarrow HCl(DCl)+H(D)$  reaction*  
Chem. Phys. Lett., **247**, 232 (1995). Clave: A
- 34.- F. J. Aoiz, L. Bañares, T. Díez-Rojo, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos  
*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*  
J. Phys. Chem., **100**, 4071 (1996). Clave: A

- 35.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, K. Stark, H.-J. Werner  
*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*  
Chem. Phys. Lett., **254**, 341 (1996). Clave: A
- 36.- M. Faubel, B. Martínez-Haya, L. Y. Rusin, U. Tappe, J. P. Toennies, F. J. Aoiz, L. Bañares  
*F-D<sub>2</sub> state resolved reactive scattering at 180 meV and 240 meV collision energies I: A high resolution crossed molecular beam experiment*  
Chem. Phys., **207**, 227 (1996). Clave: A
- 37.- F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Faubel, B. Martínez-Haya, L. Y. Rusin, U. Tappe, J. P. Toennies  
*F-D<sub>2</sub> state resolved reactive scattering at 180 meV and 240 meV collision energies II: Quasi-classical cross sections. A comparison with the experimental results*  
Chem. Phys., **207**, 245 (1996). Clave: A
- 38.- J. S. Baskin, L. Bañares, S. Pedersen, A.H. Zewail  
*Femtosecond real-time probing of reactions. 20. Dynamics of twisting, alignment and IVR in the trans-stilbene isomerization reaction*  
J. Phys. Chem., **100**, 11920 (1996). Clave: A
- 39.- 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  
*Quantum, classical and experimental beam studies of the simplest Cl reaction*  
Science, **273**, 1519 (1996). Clave: A
- 40.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero  
*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*  
J. Chem. Phys., **105**, 6086 (1996). Clave: A
- 41.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, K. Stark, I. Tanarro, H.-J. Werner  
*The  $F+HD$  reaction: Cross sections and rate constants on an ab initio potential energy surface*  
Chem. Phys. Lett., **262**, 175 (1996). Clave: A
- 42.- F. J. Aoiz, L. Bañares  
*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*  
J. Phys. Chem., **100**, 18108 (1996). Clave: A
- 43.- A. A. Heikal, J. S. Baskin, L. Bañares, A. H. Zewail  
*Structural effects on the isomerization dynamics of trans-stilbenes: IVR, microcanonical reaction rates and the nature of the transition state*  
J. Phys. Chem. A, **101**, 572 (1997). Clave: A
- 44.- E. Wrede, L. Schnieder, K. H. Welge, F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero  
*High resolution study of the  $H+D_2\rightarrow HD+D$  reaction dynamics at a collision energy of 2.2 eV*  
Chem. Phys. Lett., **265**, 129 (1997). Clave: A
- 45.- L. Bañares, T. Baumert, M. Bergt, B. Kiefer, G. Gerber  
*Femtosecond photodissociation dynamics of  $Fe(CO)_5$  in the gas phase*  
Chem. Phys. Lett., **267**, 141 (1997). Clave: A
- 46.- E. Wrede, L. Schnieder, K. H. Welge, F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, V. Sáez Rábanos  
*The  $H+D_2$  reaction in the vicinity of the conical intersection*  
J. Chem. Phys., **106**, 7862 (1997). Clave: A
- 47.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, I. Tanarro

- The H+D<sub>2</sub>→HD+D reaction. Quasiclassical trajectory study of cross sections, rate constants and kinetic isotope effect*  
 J. Phys. Chem. A, **101**, 6165 (1997). Clave: A
- 48.- F. J. Aoiz, L. Bañares, B. Martínez-Haya, J. F. Castillo, D. E. Manolopoulos, K. Stark, H.-J. Werner  
*An ab initio simulation of molecular beam experiments for the F+H<sub>2</sub>→HF+H reaction*  
 J. Phys. Chem. A, **101**, 6403 (1997). Clave: A
- 49.- L. Bañares, M. J. D'Mello  
*Quantum mechanical rate constants for the D+H<sub>2</sub>→HD+H reaction on the BKMP2 potential energy surface*  
 Chem. Phys. Lett., **277**, 465 (1997). Clave: A
- 50.- A. J. Alexander, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Brouard, J. Short, J. P. Simons  
*Stereodynamics of the reaction O(<sup>1</sup>D<sub>2</sub>)+H<sub>2</sub>(v=0) →OH(X<sup>2</sup>II;v'=0,N',f)+H: State-resolved linear and rotational angular momentum distributions*  
 J. Phys. Chem. A, **101**, 7544 (1997). Clave: A
- 51.- A. J. Alexander, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Brouard, V. J. Herrero, J. P. Simons  
*Classical reaction probabilities, cross sections and rate constants for the O(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub>→OH+H reaction*  
 Chem. Phys. Lett., **278**, 313 (1997). Clave: A
- 52.- A. J. Alexander, D. A. Blunt, M. Brouard, J. P. Simons, F. J. Aoiz, L. Bañares, Y. Fujimura, M. Tsubouchi  
*O(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub>→OH(v',N')+H: The anatomy of a reaction*  
 Faraday Discuss. Chem. Soc., **108**, 375 (1997). Clave: A
- 53.- L. Bañares, T. Baumert, M. Bergt, B. Kiefer, G. Gerber  
*The ultrafast photodissociation of Fe(CO)<sub>5</sub> in the gas phase*  
 J. Chem. Phys., **108**, 5799 (1998). Clave: A
- 54.- L. Bañares, F. J. Aoiz, V. J. Herrero, M. J. D'Mello, B. Niederjohann, K. Seekamp-Rahn, E. Wrede, L. Schnieder  
*Experimental and quantum mechanical study of the H+D<sub>2</sub> reaction near 0.5 eV: the assessment of the H<sub>3</sub> potential energy surfaces*  
 J. Chem. Phys., **108**, 6160 (1998). Clave: A
- 55.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero  
*Recent results on quasi-classical trajectory computations of elementary reactions*  
 Faraday Research Article en J. Chem. Soc. Faraday Trans., **94**, 2483 (1998). Clave: A
- 56.- J. F. Castillo, B. Hartke, H.-J. Werner, F. J. Aoiz, L. Bañares, B. Martínez-Haya  
*Quantum mechanical and quasi-classical simulations of molecular beam experiments for the F+H<sub>2</sub>→HF+H reaction on two ab initio potential energy surfaces*  
 J. Chem. Phys., **109**, 7224 (1998). Clave: A
- 57.- M. Faubel, B. Martínez-Haya, L. Y. Rusin, U. Tappe, J. P. Toennies, F. J. Aoiz, L. Bañares  
*Rotational state resolved differential cross sections for the reaction F+D<sub>2</sub>→DF+D at collision energies 140-240 meV*  
 J. Phys. Chem. A, **102**, 8695 (1998). Clave: A
- 58.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero  
*Classical versus quantum mechanical calculations of the dynamics of elementary reactions: from state resolved cross sections to rate constants*  
 Capítulo en *Advances in Classical Trajectory Methods Vol. III: Comparisons of Classical and Quantum Dynamics*; W. L. Hase, Ed.; JAI Press, Connecticut, 1998. Clave: CL
- 59.- F. J. Aoiz, J. F. Castillo, L. Bañares  
*Chemical Reaction Theory. General Discussion*  
 Faraday Discuss., **110**, 215 (1998).  
 F. J. Aoiz, J. F. Castillo, L. Bañares, B. Martínez-Haya

- ibid.*, **110**, 220 (1998).  
 F. J. Aoiz, L. Bañares  
*ibid.*, **110**, 245 (1998).  
 F. J. Aoiz, L. Bañares  
*ibid.*, **110**, 365 (1998). Clave: A
- 60.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, M. Menéndez, J. E. Verdasco  
*Quantum mechanical and quasi-classical rate constant calculations for the  $O(^3P)+HCl \rightarrow OH+Cl$  reaction*  
 Phys. Chem. Chem. Phys., **1**, 1149 (1999). Clave: A
- 61.- E. Wrede, L. Schnieder, K. H. Welge, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, B. Martínez-Haya, V. J. Herrero  
*The dynamics of the hydrogen exchange reaction at 2.20 eV collision energy: experimental and theoretical differential cross sections*  
 J. Chem. Phys., **110**, 9971 (1999). Clave: A
- 62.- B. Martínez-Haya, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, J. M. Launay  
*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*  
 Phys. Chem. Chem. Phys., **1**, 3415 (1999). Clave: A
- 63.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo  
*Spin orbit effects in quantum mechanical rate constant calculations for the  $F+H_2 \rightarrow HF+H$  reaction*  
 J. Chem. Phys., **111**, 4013 (1999). Clave: A
- 64.- M. P. De Miranda, F. J. Aoiz, L. Bañares, V. Sáez Rábanos  
*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*  
 J. Chem. Phys., **111**, 5368 (1999). Clave: A
- 65.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero  
*A theoretical study of the dynamics of the  $O(^1D)+HD$  reaction at 0.196 eV collision energy. Comparison with experimental results*  
 Chem. Phys. Lett., **310**, 277 (1999). Clave: A
- 66.- B. Martínez-Haya, I. Zapater, P. Quintana, M. Menéndez, E. Verdasco, J. Santamaría, L. Bañares, F. J. Aoiz  
*Photodissociation of dimethyl sulfide at 227.5 nm: resonance enhanced multiphoton ionization of the methyl fragment*  
 Chem. Phys. Lett., **311**, 159 (1999). Clave: A
- 67.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, V. J. Herrero  
*Comment on "Reaction cross sections for the  $H+D_2(v=0,1)$  system for collision energies up to 2.5 eV: A multiconfiguration Hartree wave-packet propagation study" [J. Chem. Phys. 110, 241 (1999)]*  
 J. Chem. Phys., **111**, 9891 (1999). Clave: A
- 68.- 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  
*Stereochemistry and Control in Molecular Reaction Dynamics. General Discussion*  
 Faraday Discuss., **113**, 206 (1999).  
 F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo  
*ibid.*, **113**, 209 (1999).  
 F. J. Aoiz, M. P. de Miranda, L. Bañares  
*ibid.*, **113**, 210 (1999).  
 A. J. Alexander, R. N. Zare, F. J. Aoiz, S. A. Kandel, L. Bañares  
*ibid.*, **113**, 334 (1999). Clave: A
- 69.- S. A. Kandel, A. J. Alexander, Z.-H. Kim, R. N. Zare, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, V. Sáez Rábanos  
 *$Cl+HD(v=1)$  reaction dynamics: comparison between theory and experiment*  
 J. Chem. Phys., **112**, 670 (2000). Clave: A

- 70.- A. J. Alexander, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Brouard, J. P. Simons  
*Product rotational angular momentum polarization in the reaction  $O(^1D_2)+H_2 \rightarrow OH+H$*   
Phys. Chem. Chem. Phys., **2**, 571 (2000). Clave: A
- 71.- 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  
*Dynamics of the  $Cl+H_2/D_2$  reaction: a comparison of crossed molecular beam experiments with quasiclassical trajectory and quantum mechanical calculations*  
Phys. Chem. Chem. Phys., **2**, 599 (2000). Clave: A
- 72.- F. Fernández-Alonso, B. D. Bean, J. D. Ayers, A. E. Pomerantz, R. N. Zare, L. Bañares, F. J. Aoiz  
*Evidence for scattering resonances in the  $H+D_2$  reaction*  
Angewante Chemie, Int. Ed., **39**, 2748-2752 (2000). Clave: A
- 73.- P. Quintana, R. E. Delmdahl, D. H. Parker, B. Martínez-Haya, F. J. Aoiz, L. Bañares, E. Verdasco  
*Velocity map imaging and REMPI study of the photodissociation of  $CH_3SCH_3$  from the first absorption band*  
Chem. Phys. Lett., **325**, 146 (2000). Clave: A
- 74.- F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Brouard, J. F. Castillo, V. J. Herrero  
*The dynamics of the  $O(^1D)+HD$  reaction. A quasiclassical trajectory multisurface study*  
J. Chem. Phys., **113**, 5339 (2000). Clave: A
- 75.- N. Balucani, L. Cartechini, P. Casavecchia, G. G. Volpi, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Menéndez, W. Bian, H.-J. Werner  
*Dynamics of the  $Cl+D_2$  reaction: A comparison of crossed molecular beam experiments with quasi-classical trajectory calculations on a new ab initio potential energy surface.*  
Chem. Phys. Lett., **328**, 500 (2000). Clave: A
- 76.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Santamaría  
*Quasi-classical trajectory study of the dynamics of the  $H+H_2O$  reaction: differential cross-sections and product rotational polarization.*  
Chem. Phys. Lett., **329**, 517 (2000). Clave: A
- 77.- B. Martínez-Haya, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Quintana, E. Verdasco  
*Photodissociation of  $CD_3SCD_3$  on the first absorption band: translational and internal energy transfer to the  $CD_3$  fragment studied by resonant multiphoton ionization and time-of-flight spectrometry*  
J. Phys. Chem. A, **104**, 10150 (2000). Clave: A
- 78.- F. J. Aoiz, L. Bañares, T. Bohm, A. Hanf, V. J. Herrero, K.-H. Jung, A. Lauter, K.-W. Lee, M. Menéndez, V. Saez Rabanos, I. Tanarro, H.-R. Volpp, J. Wolfrum  
*Experimental and theoretical reaction cross sections for the  $H+HCl$  system*  
J. Phys. Chem. A, **104**, 10452 (2000). Clave: A
- 79.- B. Martínez-Haya, P. Quintana, L. Bañares, P. Samartzis, D. J. Smith, T. N. Kitsopoulos  
*The photodissociation of  $CH_3SCH_3$  and  $CD_3SCD_3$  at 220-231 nm investigated by velocity map ion imaging*  
J. Chem. Phys., **114**, 4450 (2001). Clave: A
- 80.- 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  
*Insertion and abstraction pathways in the reaction  $O(^1D)+H_2 \rightarrow OH+H$*   
Phys. Rev. Lett., **86**, 1729 (2001). Clave: A
- 81.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo  
*On the existence of resonances in the  $H+D_2 \rightarrow HD(v=0, j'=7)+D$  reaction at collision energies 0.64-1.30 eV*  
J. Chem. Phys., **114**, 8237 (2001). Clave: A
- 82.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, B. Martínez-Haya, M. P. de Miranda

- The stereodynamics of the O(<sup>1</sup>D)+HD reaction on the ground 1<sup>1</sup>A' and excited 1<sup>1</sup>A'' potential energy surfaces*  
 J. Chem. Phys., **114**, 8328 (2001). Clave: A
- 83.- D. Skouteris, H.-J. Werner, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, M. Menéndez, N. Balucani, L. Cartechini, P. Casavecchia  
*Experimental and theoretical differential cross sections for the reactions Cl+H<sub>2</sub>/D<sub>2</sub>*  
 J. Chem. Phys., **114**, 10662 (2001). Clave: A
- 84.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro and E. Verdasco  
*Low temperature rotational relaxation of N<sub>2</sub> in collisions with Ne*  
 J. Phys. Chem. A, **105**, 6976 (2001). Clave: A
- 85.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, M. Menéndez, D. Skouteris, H.-J. Werner  
*A quantum mechanical and quasi-classical trajectory study of the Cl+H<sub>2</sub> reaction and its isotopic variants. Dependence of the integral cross section on the collision energy and reagent rotation*  
 J. Chem. Phys., **115**, 2074 (2001). Clave: A
- 86.- F. Fernández-Alonso, B. D. Bean, R. N. Zare, L. Bañares, F. J. Aoiz, J. F. Castillo  
*Forward scattering in the H+D<sub>2</sub>→HD+D reaction: comparison between experiment and theoretical predictions*  
 J. Chem. Phys., **115**, 4534 (2001). Clave: A
- 87.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro and E. Verdasco  
*Gas phase molecular relaxation at very low temperatures. A comparative study of N<sub>2</sub> and of its mixtures with He and Ne*  
 Vacuum, **64**, 417 (2002). Clave: A
- 88.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares  
*A quasi-classical trajectory study of the H+H<sub>2</sub>O→OH+H<sub>2</sub> reaction dynamics at 1.4 eV collision energy on a new ab initio potential energy surface*  
 Chem. Phys. Lett., **356**, 120 (2002). Clave: A
- 89.- 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, X. Yang  
*The O(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub> reaction at 56 meV collision energy: a comparison between quantum mechanical, quasi-classical trajectory and crossed beam results*  
 J. Chem. Phys., **116**, 10692 (2002). Clave: A
- 90.- N. Balucani, L. Cartechini, G. Capozza, E. Segoloni, P. Casavecchia, G. G. Volpi, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, J. M. Launay  
*Quantum effects in the differential cross sections for the insertion reaction N(<sup>2</sup>D)+H<sub>2</sub>*  
 Phys. Rev. Lett., **89**, 013201-1 (2002). Clave: A
- 91.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, D. Sokolovski  
*Energy evolution of forward scattering in the H+D<sub>2</sub>→HD(v=3, j=0)+D reaction*  
 J. Chem. Phys., **117**, 2546 (2002). Clave: A
- 92.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya  
*A quasiclassical trajectory and quantum mechanical study of the O(<sup>1</sup>D)+D<sub>2</sub> reaction dynamics. Comparison with high resolution molecular beam experiments*  
 Phys. Chem. Chem. Phys., **4**, 4379 (2002). Clave: A
- 93.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, D. Sokolovski, F. Fernández-Alonso, R. D. Bean, J. D. Ayers, A. E. Pomerantz, R. N. Zare  
*Observation of scattering resonances in the H+D<sub>2</sub> reaction: direct probe of the HD<sub>2</sub> transition-state geometry*  
 Capítulo en *Femtochemistry and Femtobiology; Ultrafast dynamics in Molecular Science*; A. Douhal and J. Santamaría, Eds.; World Scientific, Singapore, 2002. Clave: CL
- 94.- F. J. Aoiz, L. Bañares, E. Verdasco

Capítulos en *Química Física II. Sección VIII. Capítulos 50-57*, págs. 1227-1456 Joan Bertrán y Javier Núñez (Coords.). Ariel Ciencia, Barcelona, 2002. Clave: CL

- 95.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro and E. Verdasco  
*Low temperature rotational relaxation of N<sub>2</sub> in collisions with He*  
*Chem. Phys. Lett.*, **367**, 500 (2003). Clave: A
- 96.- L. Bañares, F. J. Aoiz, P. Honvault, B. Busseray-Honvault, J.-M. Launay  
Quantum mechanical and quasi-classical trajectory study of the C(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub> reaction dynamics  
*J. Chem. Phys.*, **118**, 565 (2003). Clave: A
- 97.- M. Brouard, I. Burak, D. Minayev, P. O'Keeffe, C. Vallance, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, D. H. Zhang, M. A. Collins  
The dynamics of the H+D<sub>2</sub>O→OD+HD reaction at 2.5 eV: experiment and theory  
*J. Chem. Phys.*, **118**, 1162 (2003). Clave: A
- 98.- 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  
The cross-section for the H+H<sub>2</sub>O abstraction reaction: experiment and theory  
*Phys. Rev. Lett.*, **90**, 093201 (2003). Clave: A
- 99.- J. F. Castillo, M. A. Collins, F. J. Aoiz, L. Bañares  
Quasi-classical trajectory study of the dynamics of the H+N<sub>2</sub>O reaction on a new potential energy surface  
*J. Chem. Phys.*, **118**, 7303 (2003). Clave: A
- 100.- S. A. Vázquez, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Santamaría, E. Fernández-Núñez, A. Fernández-Ramos  
Quasi-classical trajectory study of H<sub>2</sub> elimination in the photodissociation of difluoroethylenes at 193 nm  
*J. Chem. Phys.*, **118**, 6941 (2003). Clave: A
- 101.- J. Barr, I. Torres, L. Bañares, J. E. Verdasco, F. J. Aoiz  
Near UV photodissociation of CD<sub>3</sub>SCD<sub>3</sub>: CD<sub>3</sub> fragment (*v*,*J*) vector correlation  
*Chem. Phys. Lett.*, **373**, 550 (2003). Clave: A
- 102.- L. Bañares, F. J. Aoiz, S. A. Vázquez, T.-S. Ho, H. Rabitz  
Quasi-classical trajectory calculations on a fast analytic potential energy surface for the C(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub> reaction  
*Chem. Phys. Lett.*, **374**, 243 (2003). Clave: A
- 103.- T.-S. Ho, H. Rabitz, F. J. Aoiz, L. Bañares, S. A. Vázquez, L. B. Harding  
Implementation of a fast analytic ground state potential energy surface for the N(<sup>2</sup>D)+H<sub>2</sub> reaction  
*J. Chem. Phys.*, **119**, 3063 (2003). Clave: A
- 104.- E. Fernández-Núñez, A. Fernández-Ramos, S. A. Vázquez, F. J. Aoiz, L. Bañares  
A direct classical trajectory study of HCl elimination from the 193 nm photodissociation of vinyl chloride  
*J. Phys. Chem. A*, **107**, 7611 (2003). Clave: A
- 105.- E. Fernández-Núñez, A. Fernández-Ramos, M.N.D.S. Cordeiro, S. A. Vázquez, F. J. Aoiz, L. Bañares  
A direct classical trajectory study of the acetone photodissociation on the triplet surface  
*J. Chem. Phys.*, **119**, 10618 (2003). Clave: A
- 106.- A. E. Pomerantz, F. Ausfelder, R. N. Zare, S. C. Althorpe, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo  
Disagreement between theory and experiment in the simplest chemical reaction: collision energy dependent rotational distributions for H+D<sub>2</sub>→HD(*v*'=3,*j*')+D  
*J. Chem. Phys.*, **120**, 3244 (2004). Clave: A
- 107.- F. Ausfelder, A. E. Pomerantz, R. N. Zare, S. C. Althorpe, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo



- Collision energy dependence of the HD( $v'=2$ ) product rotational distribution of the H+D<sub>2</sub> reaction in the range 1.30-1.89 eV  
*J. Chem. Phys.*, **120**, 3255 (2004). Clave: A
- 108.- L. Bañares, F. J. Aoiz, P. Honvault, J.-M. Launay  
The dynamics of the S(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub> insertion reaction. A combined quantum mechanical and quasi-classical trajectory study.  
*J. Phys. Chem.*, **108**, 1616 (2004). Clave: A
- 109.- E. Fernández-Núñez, S. A. Vázquez, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo  
Further investigation of the HCl elimination in the photodissociation of vinyl chloride at 193 nm. A direct MP2/6-31G(d,p) trajectory study.  
*Chem. Phys. Lett.*, **386**, 225 (2004). Clave: A
- 110.- G. A. Amaral, I. Torres, G. A. Pino, F. J. Aoiz, L. Bañares  
*Photodissociation dynamics of dimethyl sulfoxide-d<sub>6</sub> at 210 nm. Experimental evidence for a prompt anisotropic CD<sub>3</sub> channel*  
*Chem. Phys. Lett.*, **386**, 419 (2004). Clave: A
- 111.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. A. Collins  
*The H+N<sub>2</sub>O→OH+N<sub>2</sub> reaction dynamics on an interpolated QCISD potential energy surface. A quasi-classical trajectory study*  
*J. Phys. Chem. A*, **108**, 6611 (2004). Clave: A
- 112.- I. Torres, J. Barr, J. E. Verdasco, L. Bañares, F. J. Aoiz  
*Near UV photodissociation of dimethyl sulphide: A direct mechanism on the second absorption band*  
*Chem. Phys. Lett.*, **394**, 307 (2004). Clave: A
- 113.- J. González-Vázquez, E. Fernández-Núñez, S. A. Vázquez, J. Santamaría, L. Bañares  
*RRKM and direct MP2/6-31G(d,p) quasiclassical trajectory study of H<sub>2</sub> elimination from vinyl chloride at 193 nm*  
*Chem. Phys. Lett.*, **396**, 442 (2004). Clave: A
- 114.- J. Barr, I. Torres, J. E. Verdasco, L. Bañares, F. J. Aoiz, B. Martínez-Haya  
*Photodissociation dynamics of dimethyl sulfide following excitation within the first absorption band*  
*J. Phys. Chem. A*, **108**, 7936 (2004). Clave: A
- 115.- G. A. Pino, I. Torres, G. A. Amaral, F. J. Aoiz, L. Bañares  
*UV photodissociation dynamics of CD<sub>3</sub>SOCD<sub>3</sub>: photofragment translational and internal energy distribution*  
*J. Phys. Chem. A*, **108**, 8048 (2004). Clave: A
- 116.- L. González, L. Bañares  
*Control cuántico con láseres de femtosegundo: Hacia una nueva Química*  
*Anales de Química*, **100**, 5 (2004). Clave: A
- 117.- N. Balucani, G. Capozza, L. Cartechini, A. Bergeat, R. Bobbenkamp, P. Casavecchia, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, B. Bussery-Honvault, J.-M. Launay  
*Dynamics of the insertion reaction C(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub>: A comparison of crossed molecular beam experiments with quasiclassical trajectory and quantum mechanical scattering calculations*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **6**, 4957 (2004). Clave: A
- 118.- M. Brouard, S. Marinakis, L. Rubio Lago, F. Quadrini, D. Solaiman, C. Vallance, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo  
*Cross-sections for the H+H<sub>2</sub>O and H+D<sub>2</sub>O abstraction reactions*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **6**, 4991 (2004). Clave: A

- 119.- A. E. Pomerantz, F. Ausfelder, R. N. Zare, J. C. Juanes-Marcos, S. C. Althorpe, V. Sáez Rábanos, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo  
*Rovibrational product state distribution for inelastic H+D<sub>2</sub> collisions*  
*J. Chem. Phys.*, **121**, 6587 (2004). Clave: A
- 120.- F. J. Aoiz, L. Bañares, M. P. de Miranda  
*Stereodynamics of simple reactions: How does the direction of the initial rotation control the reactivity*  
*Abstracts of papers of the American Chemical Society*, 227: U271-U271 175-PHYS Part 2 (2004). Clave: A
- 121.- L. Bañares, J. F. Castillo, P. Honvault, J.-M. Launay  
*Quantum mechanical and quasi-classical trajectory reaction probabilities and cross sections for the S(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub>,D<sub>2</sub>,HD insertion reactions*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **7**, 627 (2005). Clave: A
- 122.- N. Balucani, P. Casavecchia, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, V. J. Herrero  
*Dynamics of O(<sup>1</sup>D)+D<sub>2</sub> reaction: a comparison between crossed molecular beam experiments and quasiclassical trajectory calculations on the lowest three potential energy surfaces*  
*Mol. Phys.*, **103**, 1703 (2005). Clave: A
- 123.- N. Balucani, G. Capozza, E. Segoloni, A. Russo, R. Bobbenkamp, P. Casavecchia, T. González-Lezana, E. J. Rackham, L. Bañares, F. J. Aoiz  
*Dynamics of the insertion reaction C(<sup>1</sup>D)+D<sub>2</sub>: a comparison of crossed molecular beam experiments with quasiclassical trajectory and accurate statistical calculations*  
*J. Chem. Phys.*, **122**, 234309 (2005). Clave: A
- 124.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero  
*The H+H<sub>2</sub> Reactive System. Progress in the Study of the Dynamics of the Simplest Reaction*  
*Int. Rev. Phys. Chem.*, **24**, 119 (2005). Clave: CL
- 125.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, E. Martínez-Nuñez, A. Fernández-Ramos, S. Vázquez  
*Quasiclassical trajectory study of the F+CH<sub>4</sub> reaction dynamics on a dual-level interpolated potential energy surface*  
*J. Phys. Chem. A*, **109**, 8459 (2005). Clave: A
- 126.- 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 and J. E. Verdasco  
*Low temperature rotational relaxation of CO in self-collisions and in collisions with Ne and He*  
*J. Phys. Chem. A*, **109**, 9402 (2005). Clave: A
- 127.- L. Bañares, F. J. Aoiz, T. González-Lezana, I. Tanarro, V. J. Herrero  
*Influence of rotation and isotope effects on the dynamics of the N(<sup>2</sup>D)+H<sub>2</sub> reactive system and of its deuterated variants*  
*J. Chem. Phys.*, **123**, 224301 (2005). Clave: A
- 128.- A. E. Pomerantz, F. Ausfelder, R. N. Zare, J. C. Juanes-Marcos, S. C. Althorpe, V. S. Rábanos, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo  
*Quantum state distributions for reactive and inelastic H+D<sub>2</sub> collisions*  
*Abstracts of papers of the American Chemical Society*, 229: U747-U747 295-PHYS Part 2 (2005). Clave: A
- 129.- N. Balucani, P. Casavecchia, L. Bañares, F. J. Aoiz, T. González-Lezana, P. Honvault, J.-M. Launay  
*Experimental and theoretical differential cross sections for the reaction N(<sup>2</sup>D)+H<sub>2</sub>*  
*J. Phys. Chem. A*, **110**, 817 (2006). Clave: A
- 130.- L. Bañares, F. J. Aoiz, V. J. Herrero  
*Latest findings on the dynamics of the simplest chemical reaction*  
*Physica Scripta, Comments on Atomic and Molecular Physics*, **76**, C6 (2006). Clave: A
- 131.- R. de Nalda, C. Horn, M. Krug, F. Ausfelder, M. Wollenhaupt, L. Bañares, T. Baumert

- Pulse shaping of spatially aligned rotational wavepackets of N<sub>2</sub> and O<sub>2</sub>*  
Capítulo en *Femtochemistry VII: Fundamental Ultrafast Processes in Chemistry, Physics, and Biology*; Castleman, A. W., Jr., Kimble, M. L., Eds.; p. 510; Elsevier: Amsterdam, 2006. Clave: CL
- 132.- R. de Nalda, J. G. Izquierdo, D. Irimia, M.H.M. Janssen, L. Bañares  
*Ultrafast photofragmentation dynamics of gas phase CH<sub>2</sub>BrCl*  
Capítulo en *Femtochemistry VII: Fundamental Ultrafast Processes in Chemistry, Physics, and Biology*; Castleman, A. W., Jr., Kimble, M. L., Eds.; p. 49; Elsevier: Amsterdam, 2006. Clave: CL
- 133.- C. Horn, M. Wollenhaupt, M. Krug, T. Baumert, R. de Nalda, L. Bañares  
*Adaptive control of molecular alignment*  
*Phys. Rev. A, Rapid Communications*, **73**, 031401(R) (2006). Clave: A
- 134.- P. Honvault, B. Busseron-Honvault, J.-M. Launay, F. J. Aoiz, L. Bañares  
*Quantum mechanical and quasiclassical trajectory scattering calculations for the C(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub> reaction on the second excited <sup>1</sup>A'' potential energy surface*  
*J. Chem. Phys.*, **124**, 154314 (2006). Clave: A
- 135.- J. G. Izquierdo, G. A. Amaral, F. Ausfelder, F. J. Aoiz, L. Bañares  
*Velocity-map imaging study of the photodissociation of CH<sub>3</sub>SH at 205 nm. Internal energy distribution of the SH fragment*  
*ChemPhysChem*, **7**, 1682 (2006). Clave: A
- 136.- T. González-Lezana, O. Roncero, P. Honvault, J.-M. Launay, N. Bulut, F. J. Aoiz, L. Bañares  
*A detailed quantum mechanical and quasiclassical trajectory study on the dynamics of the H<sup>+</sup>+H<sub>2</sub>→H<sub>2</sub>+H<sup>+</sup> exchange reaction*  
*J. Chem. Phys.*, **125**, 094314 (2006). Clave: A
- 137.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero  
*Dynamics of insertion reactions of H<sub>2</sub> molecules with excited atoms*  
*J. Phys. Chem. A, Feature Article*, **110**, 12546 (2006). Clave: A
- 138.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares  
*Quasiclassical trajectory study of the Cl+CH<sub>4</sub> reaction dynamics on a QCISD interpolated potential energy surface*  
*J. Chem. Phys.*, **125**, 124316 (2006). Clave: A
- 139.- R. de Nalda, J. G. Izquierdo, J. Durá, L. Bañares  
*Femtosecond multichannel photodissociation dynamics of CH<sub>3</sub>I from the A band by velocity map imaging*  
*J. Chem. Phys.*, **126**, 021101 (2007). Clave: A
- 140.- G. A. Amaral, F. Ausfelder, J. G. Izquierdo, L. Rubio-Lago, L. Bañares  
*Imaging the photodissociation of CH<sub>3</sub>SH in the first and second absorption bands. The CH<sub>3</sub>(X<sup>2</sup>A<sub>1</sub>)+SH(X<sup>2</sup>II) channel*  
*J. Chem. Phys.*, **126**, 024301 (2007). Clave: A
- 141.- J. F. Castillo, N. Bulut, L. Bañares, F. Gogtas  
*Wave packet and quasiclassical trajectory calculations for the N(<sup>2</sup>D)+H<sub>2</sub> reaction and its isotopic variants*  
*Chem. Phys.*, **332**, 119 (2007). Clave: A
- 142.- S. Y. Lin, L. Bañares, H. Guo  
*Differential and integral cross sections of the N(<sup>2</sup>D)+H<sub>2</sub>→NH+H from exact quantum and quasi-classical trajectory studies*  
*J. Phys. Chem. A.*, **111**, 2376 (2007). Clave: A
- 143.- R. de Nalda, C. Horn, M. Wollenhaupt, M. Krug, L. Bañares, T. Baumert  
*Pulse shaping control of alignment dynamics in N<sub>2</sub>*  
*J. Raman Spect.*, **38**, 543 (2007). Clave: A

- 144.- S. Gaspard, M. Oujja, R. de Nalda, C. Abrusci, F. Catalina, L. Bañares, M. Castillejo  
*Submicron foaming in gelatine by nanosecond and femtosecond pulsed laser irradiation*  
*App. Surf. Sci.*, **253**, 6420 (2007). Clave: A
- 145.- J. G. Izquierdo, J. Durá, R. de Nalda, G. A. Amaral, F. Ausfelder, L. Bañares  
*Ultrafast photodissociation dynamics by velocity map imaging*  
*Abstracts of papers of the American Chemical Society*, 232 en prensa (2006). Clave: CL
- 146.- L. Rubio-Lago, G. A. Amaral, A. Arregui, J. G. Izquierdo, F. Wang, D. Zouris, T. N. Kitsopoulos, L. Bañares  
*Slice imaging of the photodissociation of acetaldehyde at 248 nm. Evidence of a roaming mechanism*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **9**, 6123 (2007). Clave: A
- 147.- S. Gaspard, M. Oujja, R. de Nalda, C. Abrusci, F. Catalina, L. Bañares, S. Lazare, M. Castillejo  
*Nanofoaming in the surface of biopolymers by femtosecond pulsed laser irradiation*  
*App. Surf. Sci.*, **254**, 1179 (2007). Clave: A
- 148.- R. de Nalda, L. Bañares  
*Los láseres en las ciencias de la vida*  
*Revista Española de Física*, **21**, 36 (2007). Clave: A
- 149.- N. Bulut, J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares  
*Time dependent real wave packet and quasiclassical trajectory studies of the  $H^+ + LiH$  reaction*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **10**, 821 (2008). Clave: A
- 150.- E. Carmona-Novillo, T. González-Lezana, O. Roncero, P. Honvault, J.-M. Launay, N. Bulut, F. J. Aoiz, L. Bañares, A. Trottier, E. Wrede  
*On the dynamics of the  $H^+ + D_2 \rightarrow HD + D^+$  reaction: A comparison between theory and experiment*  
*J. Chem. Phys.*, **128**, 014304 (2008). Clave: A
- 151.- I.-R. Lee, L. Bañares, A. H. Zewail  
*Direct observation of the primary isomerization dynamics of stilbene anion radical*  
*J. Am. Chem. Soc.*, **130**, 6708 (2008). Clave: A
- 152.- J. Durá, R. de Nalda, J. Álvarez, J. G. Izquierdo, G. A. Amaral, L. Bañares  
*Femtosecond transition state imaging of the A-band  $CH_3I$  photodissociation*  
*ChemPhysChem*, **9**, 1245 (2008). Clave: A
- 153.- A. R. Hortal, P. Hurtado, B. Martínez-Haya, A. Arregui, L. Bañares  
*Solvent-free MALDI investigation of the cationization of polyethers with alkali metals*  
*J. Phys. Chem. B*, **112**, 8530 (2008). Clave: A
- 154.- R. de Nalda, J. Durá, A. García-Vela, J. G. Izquierdo, J. González-Vázquez, L. Bañares  
*A detailed experimental and theoretical study of the femtosecond A-band photodissociation of  $CH_3I$*   
*J. Chem. Phys.*, **128**, 244309 (2008). Clave: A
- 155.- A. R. Hortal, P. Hurtado, B. Martínez-Haya, A. Arregui, L. Bañares  
*Poly(ethylene glycol) cationization with alkali metals in matrix-assisted laser desorption ionization investigated with the solvent-free method*  
*App. Phys. A*, **92**, 859 (2008). Clave: A
- 156.- S. Gaspard, M. Oujja, R. de Nalda, M. Castillejo, L. Bañares, S. Lazare, R. Bonneau  
*Nanofoaming dynamics in biopolymers by femtosecond pulsed laser irradiation*  
*App. Phys. A*, **93**, 208 (2008). Clave: A
- 157.- M. Sanz, M. Walczak, R. de Nalda, M. Oujja, J. F. Marco, J. Rodríguez, J. G. Izquierdo, L. Bañares, M. Castillejo
-

- Femtosecond pulsed laser deposition of nanostructured TiO<sub>2</sub> films*  
*App. Surf. Sci.*, **255**, 5206 (2009). Clave: A
- 158.- J. Álvarez, M. López, R. de Nalda, M. Martín, A. Arregui, L. Bañares  
*Generation of clusters from CdS laser ablation: the role of wavelength and fluence*  
*App. Phys. A*, **95**, 681 (2009). Clave: A
- 159.- V. Goncharov, N. Herath, A. Arregui, L. Bañares, A. G. Suits  
*Masked velocity map imaging: A one-laser-beam Doppler-free spectroscopic technique*  
*J. Phys. Chem. A*, **113**, 3840 (2009). Clave: A
- 160.- N. Bulut, A. Zanchet, P. Honvault, B. Busserly-Honvault, L. Bañares  
*Time dependent real wave packet and quasiclassical trajectory study of the C(<sup>3</sup>P)+OH(X<sup>2</sup>II) → CO(X<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup>)+H reaction at the state-to-state level*  
*J. Chem. Phys.*, **130**, 194303 (2009). Clave: A
- 161.- A. García-Vela, L. Bañares  
*Wave packet study of the CD<sub>3</sub>I photodissociation dynamics in the A-band*  
*Chem. Phys. Lett.*, **477**, 271 (2009). Clave: A
- 162.- J. Durá, R. de Nalda, G. A. Amaral, L. Bañares  
*Imaging transient species in the femtosecond A-band photodissociation of CH<sub>3</sub>I*  
*J. Chem. Phys.*, **131**, 134311 (2009). Clave: A
- 163.- L. Rubio-Lago, A. García-Vela, A. Arregui, G. A. Amaral, L. Bañares  
*Photodissociation of CH<sub>3</sub>I in the red-edge of the A-band: comparison between slice imaging experiments and multisurface wave packet calculations*  
*J. Chem. Phys.*, **131**, 174309 (2009). Clave: A
- 164.- V. López, G. Román Pérez, A. Arregui, E. Mateo, L. Bañares, J. A. Martín-Gago, J. M. Soler, J. Gómez-Herrero, F. Zamora  
*Azafullerene-like nanosized clusters*  
*ACS Nano*, **3**, 3352 (2009). Clave: A
- 165.- N. Bulut, J. F. Castillo, L. Bañares, F. J. Aoiz  
*Quantum mechanical wave packet and quasiclassical trajectory calculations for the Li+H<sub>2</sub> reaction*  
*J. Phys. Chem. A*, **113**, 14657 (2009). Clave: A
- 166.- N. Balucani, P. Casavecchia, F. J. Aoiz, L. Bañares, J.-M. Launay, B. Busserly-Honvault, P. Honvault  
*The dynamics of the C(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub> reaction: a comparison of crossed molecular beam experiments with quantum mechanical and quasiclassical trajectory calculations on the first two singlet (<sup>1</sup>A' and <sup>1</sup>A'') potential energy surfaces*  
*Mol. Phys.*, **108**, 373 (2010). Clave: A
- 167.- O. Martínez-Matos, J. A. Rodrigo, M. P. Hernández-Garay, J. G. Izquierdo, R. Weigand, M. L. Calvo, P. Cheben, P. Vaveliuk, L. Bañares  
*Generation of femtosecond paraxial beams with arbitrary spatial distribution*  
*Opt. Lett.*, **35**, 652 (2010). Clave: A
- 168.- M. Sanz, R. de Nalda, J. F. Marco, J. G. Izquierdo, L. Bañares, M. Castillejo  
*Femtosecond pulsed laser deposition of nanostructured CdS films*  
*J. Phys. Chem. C*, **114**, 4864 (2010). Clave: A
- 169.- R. Montero, A. Peralta-Conde, A. Longarte, F. Castaño, M. E. Corrales, R. de Nalda, L. Bañares  
*Femtosecond time-resolved photophysics and photodissociation dynamics of 1-iodonaphthalene*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **12**, 7988 (2010). Clave: A
- 170.- G. Gitzinger, M. E. Corrales, V. Lorient, G. A. Amaral, R. de Nalda, L. Bañares

- A femtosecond velocity map imaging study on B band predissociation in CH<sub>3</sub>I. I. The band origin*  
*J. Chem. Phys.*, **132**, 234313 (2010). Clave: A
- 171.- G. A. Amaral, A. Arregui, L. Rubio-Lago, J. D. Rodríguez, L. Bañares  
*Imaging the radical channel in acetaldehyde photodissociation: competing mechanisms at energies close to the triplet exit barrier*  
*J. Chem. Phys.*, **133**, 064303 (2010). Clave: A
- 172.- F. Gámez, A. Plaza, E. Guillén, J. A. Anta, B. Martínez-Haya, S. Pérez, M. Sanz, M. Castillejo, J. G. Izquierdo, L. Bañares  
*Nanoparticle TiO<sub>2</sub> films prepared by pulsed laser deposition: laser desorption and cationization of model adsorbates*  
*J. Phys. Chem. C*, **114**, 17409 (2010). Clave: A
- 173.- L. Rubio-Lago, G. A. Amaral, A. N. Oldani, J. D. Rodríguez, M. G. González, G. A. Pino, L. Bañares  
*Photodissociation of pyrrole-ammonia clusters by velocity map imaging: mechanism for the H-atom transfer reaction*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **13**, 1082 (2011). Clave: A
- 174.- M. P. Hernández-Garay, O. Martínez-Matos, J. G. Izquierdo, M. L. Calvo, P. Vaveliuk, P. Cheben, L. Bañares  
*Femtosecond spectral pulse shaping with holographic gratings recorded in photopolymerizable glasses*  
*Opt. Exp.*, **19**, 1516 (2011). Clave: A
- 175.- A. García-Vela, L. Bañares  
*Wave packet calculations on the effect of femtosecond pulse width in the time-resolved photodissociation of CH<sub>3</sub>I in the A band*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **13**, 2228 (2011). Clave: A
- 176.- M. Jorfi, P. Honvault, B. Bussery-Honvault, L. Bañares, N. Bulut  
*Influence of rovibrational and isotope effects on the dynamics of the C(<sup>3</sup>P)+OD(X<sup>2</sup>P) → CO(X<sup>1</sup>S<sup>+</sup>)+D reaction*  
*Mol. Phys.*, **109**, 543 (2011). Clave: A
- 177.- L. Rubio-Lago, J. D. Rodríguez, A. García-Vela, M. G. González, G. A. Amaral, L. Bañares  
*A slice imaging and multisurface wave packet study of the photodissociation of CH<sub>3</sub>I at 304 nm*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **13**, 8186 (2011). Clave: A
- 178.- R. de Nalda, J. Durá, J. González-Vázquez, V. Lorient, L. Bañares  
*Primary step in the ultrafast photodissociation of the methyl iodide dimer*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **13**, 13295 (2011). Clave: A
- 179.- M. G. González, J. D. Rodríguez, L. Rubio-Lago, L. Bañares  
*First observation of ground state I(<sup>2</sup>P<sub>3/2</sub>) atoms from the CH<sub>3</sub>I photodissociation in the B-band*  
*J. Chem. Phys., Communication*, **135**, 021102 (2011). Clave: A
- 180.- M. G. González, J. D. Rodríguez, L. Rubio-Lago, A. García-Vela, L. Bañares  
*Slice imaging and wave packet study of the photodissociation of CH<sub>3</sub>I in the blue edge of the A-band: Evidence of reverse <sup>3</sup>Q<sub>0</sub>←<sup>1</sup>Q<sub>1</sub> nonadiabatic dynamics*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **13**, 16404 (2011). Clave: A
- 181.- A. García-Vela, R. de Nalda, J. Durá, J. González-Vázquez, L. Bañares  
*A 4D wave packet study of the CH<sub>3</sub>I photodissociation in the A-band. Comparison with femtosecond velocity map imaging experiments*  
*J. Chem. Phys.*, **135**, 154306 (2011). Clave: A
- 182.- V. Lorient, O. Mendoza-Yero, G. Mínguez-Vega, L. Bañares, R. de Nalda  
*Experimental demonstration of the quasi-direct space-to-time pulse shaping principle*  
*IEEE Phot. Tech. Lett.*, **24**, 273 (2012). Clave: A

- 183.- E. Aslan, N. Bulut, J. F. Castillo, L. Bañares, O. Roncero, F. J. Aoiz  
*Accurate time dependent wave packet study of the  $Li+H_2^+$  reaction and its isotopic variants*  
*J. Phys. Chem. A*, **116**, 132 (2012). Clave: A
- 184.- G. Gitzinger, M. E. Corrales, V. Lorient, R. de Nalda, L. Bañares  
*A femtosecond velocity map imaging study on B band predissociation in  $CH_3I$ . II. The  $2_0^1$  and  $3_0^1$  vibronic levels*  
*J. Chem. Phys.*, **135**, 074303 (2012). Clave: A
- 185.- L. Bañares, J. Santamaría  
*Introduction to the Special Section on "Femto10. The Madrid Conference on Femtochemistry"*  
*J. Phys. Chem. A*, **116**, 2599 (2012). Clave: A
- 186.- M. E. Corrales, G. Gitzinger, J. González-Vázquez, V. Lorient, R. de Nalda, L. Bañares  
*A velocity map imaging and theoretical study of the Coulomb explosion of  $CH_3I$  under intense femtosecond IR pulses*  
*J. Phys. Chem. A*, **116**, 2669 (2012). Clave: A
- 187.- L. Rubio-Lago, G. A. Amaral, A. Arregui, J. González-Vázquez, L. Bañares  
*Imaging the molecular channel in acetaldehyde photodissociation: Roaming and Transition State mechanisms*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **14**, 6067 (2012). Clave: A
- 188.- J. D. Rodríguez, M. G. González, L. Rubio-Lago, L. Bañares  
*Photodissociation of pyrrole-ammonia clusters below 218 nm. Quenching of statistical pathways under clustering conditions*  
*J. Chem. Phys.*, **137**, 094305 (2012). Clave: A
- 189.- S. Gómez-Carrasco, N. Bulut, L. Bañares, O. Roncero  
*Accurate wave packet calculations on nonadiabatic effects for the  $O(^3P)+HF(^1\Sigma^+_g)$  reaction under hyperthermal conditions*  
*J. Chem. Phys.*, **137**, 114309 (2012). Clave: A
- 190.- E. Aslan, N. Bulut, J. F. Castillo, L. Bañares, F. J. Aoiz, O. Roncero  
*Accurate time-dependent wave packet study of the  $H^+LiH$  reaction at early universe conditions*  
*The Astrophysical Journal*, 759:31 (2012). Clave: A
- 191.- O. Mendoza-Yero, V. Lorient, J. Pérez-Vizcaíno, G. Mínguez-Vega, J. Lancis, R. de Nalda, L. Bañares  
*Programmable quasi-direct space-to-time pulse shaper with active wavefront correction*  
*Opt. Exp.*, **37**, 5067 (2012). Clave: A
- 192.- G. Balerdi, M. E. Corrales, G. Gitzinger, J. González-Vázquez, I. R. Solá, V. Lorient, R. de Nalda, L. Bañares  
*Dynamic Stark shift of the  $^3R_1$  Rydberg state of  $CH_3I$*   
*Proceedings XVIII International Conference on Ultrafast Phenomena UP2012*  
*EPJ Web of Conferences*, **41**, 02035 (2013). Clave: A
- 193.- M. E. Corrales, G. Balerdi, V. Lorient, R. de Nalda, L. Bañares  
*Strong field control of predissociation dynamics*  
*Faraday Discuss.*, **163**, 447 (2013). Clave: A
- 194.- D. Martínez-Martín, R. Longuinhos, J. G. Izquierdo, A. Marele, S. Alexandre, M. Jaafar, J. M. Gómez-Rodríguez, L. Bañares, J. M. Soler, J. Gomez-Herrero  
*The atmospheric contaminants of graphitic surfaces*  
*Carbon*, **61**, 33 (2013). Clave: A
- 195.- J. D. Rodríguez, M. G. González, L. Rubio-Lago, L. Bañares, P. Samartzis, T. N. Kitsopoulos  
*Stereodynamics of the photodissociation of nitromethane at 193 nm: Unravelling the dissociation mechanism*  
*J. Phys. Chem. A*, **117**, 8175 (2013). Clave: A

- 196.- A. García-Vela, L. Bañares  
*Wave packet study of the methyl iodide photodissociation dynamics in the 266-333 nm wavelength range*  
*Eur. Phys. J. D*, **67**, 265 (2013). Clave: A
- 197.- R. de Nalda, L. Bañares, Editores  
*Ultrafast Phenomena in Molecular Sciences. Femtosecond Physics and Chemistry*  
Series: Springer Series in Chemical Physics, Vol. 107  
2014, XVI, 346 p. 122 illus., 50 illus. in color  
ISBN 978-3-319-02050-1  
Springer International Publishing Switzerland 2014. Clave: L
- 198.- R. de Nalda, L. Rubio-Lago, V. Loriot, L. Bañares  
*Femtosecond Photodissociation Dynamics by Velocity Map Imaging. The Methyl Iodide case*  
Capítulo en *Ultrafast Phenomena in Molecular Sciences*; R. de Nalda, L. Bañares, Eds.; p. 61-96; Springer Series in Chemical Physics, Vol. 107, ISBN 978-3-319-02050-1, Springer International Publishing Switzerland 2014.  
Clave: CL
- 199.- J. D. Rodríguez, M. G. González, L. Rubio-Lago, L. Bañares  
*A velocity map imaging study of the photodissociation of the  $\tilde{A}$  state of ammonia*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **16**, 406 (2014). Clave: A
- 200.- J. D. Rodríguez, M. G. González, L. Rubio-Lago, L. Bañares  
*Direct evidence of hydrogen-atom tunneling dynamics in the excited state hydrogen transfer (ESHT) reaction of phenol-ammonia clusters*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **16**, 3757 (2014). Clave: A
- 201.- G. Gitzinger, V. Loriot, L. Bañares, R. de Nalda  
*Pulse shaping control of  $CH_3I$  multiphoton ionization at 540 nm*  
*J. Modern Opt.*, **61**, 864 (2014). Clave: A
- 202.- M. E. Corrales, V. Loriot, G. Balerdi, J. González-Vázquez, R. de Nalda, L. Bañares, A. H. Zewail  
*Structural dynamics effects on the ultrafast chemical bond cleavage of a photodissociation reaction*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **16**, 8812 (2014). Clave: A
- 203.- S. Gómez-Carrasco, L. González-Sánchez, N. Bulut, O. Roncero, J. F. Castillo, L. Bañares, J. F. Castillo  
*State-to-state quantum wave packet dynamics of the  $LiH+H$  reaction on two *ab initio* potential energy surfaces*  
*The Astrophysical Journal*, **784**, 55 (2014). Clave: A
- 204.- V. Loriot, O. Mendoza-Yero, J. Pérez-Vizcaino, G. Mínguez-Vega, R. de Nalda, L. Bañares, J. Lancis Sáez  
*Fresnel phase retrieval method using an annular lens array on an SLM*  
*App. Phys. B*, **117**, 67 (2014). Clave: A
- 205.- J. C. Cancilla, P. Díaz-Rodríguez, J. G. Izquierdo, L. Bañares, J. S. Torrecilla  
*Artificial neural networks applied to fluorescence studies for accurate determination of N-butylpyridinium chloride concentration in aqueous solution*  
*Sensors and Actuators b-chemical*, **198**, 173 (2014). Clave: A
- 206.- M. E. Corrales, J. González-Vázquez, G. Balerdi, I. R. Solá, R. de Nalda, L. Bañares  
*Control of ultrafast molecular photodissociation by laser field induced potentials*  
*Nature Chem.*, **6**, 785 (2014). Clave: A
- 207.- O. Martínez-Matos, M. P. Hernández-Garay, J. G. Izquierdo, P. Vaveliuk, L. Bañares, M. L. Calvo  
*Femtosecond laser induced damage characterization of transmission volume phase gratings*  
*App. Phys. Lett.*, **105**, 041905 (2014). Clave: A
- 208.- O. Peña-Rodríguez, J. G. Izquierdo, A. Rivera, G. Balabanian, J. M. Perlado, L. Bañares  
*Embedded silver nanoparticles fabricated by femtosecond pulsed laser deposition*  
*Opt. Mater. Express*, **4**, 1943 (2014). Clave: A



- 209.- M. G. González, J. D. Rodríguez, L. Rubio-Lago, L. Bañares  
*Imaging the stereodynamics of methyl iodide photodissociation in the second absorption band: fragment polarization and the interplay between direct and pre dissociation*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **16**, 26330 (2014). Clave: A
- 210.- L. Alcaraz, J. Isasi, A. Caballero, J. G. Izquierdo, L. Bañares  
 *$Y_{0.9}Nd_{0.1}V_{1-x}Cr_xO_4$  ( $x=0, 0.1, 0.2$  and  $0.5$ ) nanopowders synthesized by a sol-gel process. Relationship between morphological characteristics and optical properties*  
*J. Luminescence*, **161**, 110 (2015). Clave: A
- 211.- I. R. Solá, J. González-Vázquez, R. de Nalda, L. Bañares  
*Perspective: Strong field laser control of photochemistry*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **17**, 13183 (2015). Clave: A
- 212.- O. M. Kirkby, M. Sala, G. Balerdi, R. de Nalda, L. Bañares, S. Guérin, N. Kaltsoyannis, H. Fielding  
*Comparing the electronic relaxation dynamics of aniline and *d*-aniline following excitation at 272-238 nm*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **17**, 16270 (2015). Clave: A
- 213.- S. Marggi-Poullain, M. G. González, P. Samartzis, T. N. Kitsopoulos, L. Rubio-Lago, L. Bañares  
*New insights in the photodissociation of methyl iodide at 193 nm: Stereodynamics and product branching ratios*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **17**, 29958 (2015). Clave: A
- 214.- 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  
*Femtosecond laser-controlled tip-to-tip assembly and welding of gold nanorods*  
*Nano Lett.*, **15**, 8282 (2015). Clave: A
- 215.- N. Bulut, J. F. Castillo, P. G. Jambrina, J. Klos, O. Roncero, F. J. Aoiz, L. Bañares  
*Accurate wave packet calculations for the  $O^+ + H_2 \rightarrow OH^+ + H$  ion-molecule reaction*  
*J. Phys. Chem. A*, **119**, 11951 (2015). Clave: A
- 216.- G. Balerdi, J. Woodhouse, A. Zanchet, R. de Nalda, M. L. Senent, A. García-Vela, L. Bañares  
*Femtosecond predissociation dynamics of the methyl radical from the  $3p_z$  Rydberg state*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **18**, 110 (2016). Clave: A
- 217.- I. López-Quintas, V. Lorient, D. Ávila, J. G. Izquierdo, E. Rebollar, L. Bañares, M. Castillejo, R. de Nalda, M. Martín  
*Ablation dynamics of Co/ZnS targets under double pulse femtosecond laser irradiation*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **18**, 3522 (2016). Clave: A
- 218.- S. Marggi Poullain, D. V. Chicharro, A. Zanchet, M. G. González, L. Rubio-Lago, M. L. Senent, A. García-Vela, L. Bañares  
*Imaging the photodissociation of the methyl radical from the  $3s$  and  $3p_z$  Rydberg states*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **18**, 17054 (2016).
- 219.- R. Ahijado-Guzmán, G. González-Rubio, J. G. Izquierdo, L. Bañares, I. López-Montero, A. Calzado-Martín, M. Calleja, G. Tardajos and A. Guerrero-Martínez  
*Intracellular tip-to-tip assembly of gold nanorods for enhanced plasmonic photothermal therapy*  
*ACS Omega*, **1**, 388 (2016).
- 220.- M. E. Corrales, P. Shternin, L. Rubio-Lago, R. de Nalda, O. Vasyutinskii, L. Bañares  
*Femtosecond time-resolved photofragment angular momentum alignment in electronic predissociation dynamics*  
*J. Phys. Chem. Lett.*, **7**, 4458 (2016).
- 221.- S. Marggi Poullain, D. V. Chicharro, L. Rubio-Lago, A. García-Vela, L. Bañares  
*A velocity-map imaging study of methyl non-resonant multiphoton ionization from the photodissociation of  $CH_3I$  in the A-band*  
*Phil. Trans. R. Soc. A*, en prensa (2016).

- 222.- A. Zanchet, L. Bañares, M. L. Senent, A. García-Vela  
*An ab initio study of the ground and excited electronic states of the methyl radical*  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, en prensa (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: California Institute of Technology  
Localidad: Pasadena                      País EE.UU.                      Fecha: Septiembre 1990                      Duración (semanas): 104  
Tema: Dinámica de reacciones con láseres de pico y femtosegundo  
Clave: P

---

Centro: Instituto de Física. Universidad de Würzburg  
Localidad: Würzburg                      País Alemania                      Fecha: Septiembre 1995                      Duración (semanas): 54  
Tema: Dinámica de reacciones con láseres de femtosegundo  
Clave: P

---

Centro: California Institute of Technology  
Localidad: Pasadena                      País EE.UU.                      Fecha: Julio-Agosto 2007                      Duración (semanas): 8  
Tema: Femtoquímica  
Clave: I (Visiting Professor)

---

Centro: California Institute of Technology  
Localidad: Pasadena                      País EE.UU.                      Fecha: Julio-Agosto 2016                      Duración (semanas): 8  
Tema: Femtoquímica  
Clave: I (Visiting Professor)

---

---

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

## Contribuciones a Congresos

---

Autores: J. Alonso, L. Bañares, A. González Ureña

Título: On the collision energy dependence of the reaction cross-section. Variational Transition State of the  $A(K,Na,Cl)+CH_3X(X=I,Br)\rightarrow AX+CH_3$  systems

Tipo de participación: Poster

Congreso: 30th International Congress of Pure and Applied Chemistry

Publicación:

Lugar celebración: Manchester, Gran Bretaña

Fecha: 1985

---

- 2.- L. Bañares, A. Aguilar-Navarro, A. González Ureña  
*Molecular beam determination of the reaction cross-section for the  $Cs+ICH_3\rightarrow CsI+CH_3$  system from 0.1 up to 1.1 eV of collision energy*  
*XIIIth Symposium on Molecular Beams*  
Perugia, Italia. Junio 1989  
Clave: poster
- 3.- A. González Ureña, L. Bañares  
*Introduction to reaction dynamics: Vectorial properties*  
*4th Europhysics summer school on chemical dynamics. Molecular dynamics with lasers*  
Murcia, España. Septiembre 1989  
Clave: conferencia invitada
- 4.- L. Bañares, A. Aguilar-Navarro, A. González Ureña  
*Reacciones Químicas con Haces Moleculares*  
*XXII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. II Congreso Nacional del G.E.F.A.M.*  
Palma de Mallorca, España. Octubre 1989  
Clave: comunicación oral
- 5.- A. González Ureña, E. Verdasco, L. Bañares, M. Menéndez  
*Dinámica de las reacciones químicas por haces moleculares*  
*Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales*  
Madrid, España. 18 de Abril de 1990  
Clave: comunicación oral.
- 6.- L. Bañares, A. González Ureña  
*Chemiionization studies under crossed-beam conditions*  
*XIth International Symposium on Gas Kinetics*  
Assisi, Italia. Septiembre 1990  
Clave: comunicación oral
- 7.- L. Bañares, J. G. Muga, A. González Ureña  
*Collision dynamics of alkali atoms with organic molecules. Absolute determination of the reaction cross-section*  
*XIth International Symposium on Gas Kinetics*  
Assisi, Italia. Septiembre 1990  
Clave: poster
- 8.- L. Bañares, M. G. Velarde, A. González Ureña  
*Laser induced chemiionization of the  $Na(3^2P_{1/2,3/2})+I_2\rightarrow Na^++I_2^-$  system*  
*Ist International Exhibition and Congress on Laser and Electrooptics*  
Madrid, España. Septiembre 1990  
Clave: comunicación oral

- 9.- L. Bañares, A. González Ureña  
*Microchannel plate detector for chemiionization processes*  
*Ist International Exhibition and Congress on Laser and Electrooptics*  
 Madrid, España. Septiembre 1990  
 Clave: poster
- 10.- L. Bañares, A. González Ureña  
*Transferencia de carga por excitación láser en cruce de haces moleculares: dinámica del estado de transición*  
*Na\*...I<sub>2</sub>*  
 III Congreso Nacional de Física Atómica y Molecular  
 Toledo, España. Octubre 1990  
 Clave: poster
- 11.- L. Bañares, S. Skowronek, C. Perdiguero, A. González Ureña  
*Laser-induced charge transfer under crossed-beam conditions*  
*XIIIrd International Symposium on Molecular Beams*  
 El Escorial, Madrid, España. 2-7 de Junio de 1991  
 Clave: poster
- 12.- L. Bañares, A. González Ureña  
*Attacking atom effects in the M (M=Na, K, Rb, Cs)+CH<sub>3</sub>I→MI+CH<sub>3</sub> Collision Dynamics*  
*XIIIrd International Symposium on Molecular Beams*  
 El Escorial, Madrid, España. 2-7 de Junio de 1991  
 Clave: poster
- 13.- L. Bañares, A. González Ureña  
*A simple microchannel plate ion detector for crossed-beam chemiionization studies*  
*XIIIrd International Symposium on Molecular Beams*  
 El Escorial, Madrid, España. , 2-7 de Junio de 1991  
 Clave: poster
- 14.- A. González Ureña, E. Verdasco, L. Bañares, M. Menéndez, S. Skowronek, J. Castaño, C. Perdiguero, M. Garay  
*Reactive collisions with electronically excited atoms*  
*IVth European Conference on Atomic and Molecular Physics*  
 Riga, Letonia. 6-10 de Abril de 1992  
 Clave: *comunicación oral*
- 15.- S. Skowronek, L. Bañares, A. González Ureña  
*High resolution laser-beam spectroscopy using a continuous tunable narrow-band dye laser*  
*International Workshop on Laser Beam Characterization*  
 Madrid, España. Junio de 1993  
 Clave: *comunicación oral*
- 16.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, K. Stark, H.-J. Werner  
*Classical dynamics of the F+H<sub>2</sub>→HF+H reaction and its isotopic variants on recent semi-empirical and ab initio potential energy surfaces. A direct comparison with experimental results*  
*Gordon Conference on Atomic and Molecular Interactions*  
 New London, New Hampshire, U.S.A. 3-8 de Julio de 1994  
 Clave: poster
- 17.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, K. Stark, H.-J. Werner  
*The F+H<sub>2</sub>→HF+H reaction dynamics from quasi-classical trajectory calculations on a ab initio potential energy surface. A comparison with experimental results*  
*10th European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC)*  
 Salamanca, España. Agosto 1994  
 Clave: poster
- 18.- F. J. Aoiz, L. Bañares, M. J. D'Mello, V.J. Herrero, O. Puentedura, V. Sáez Rábanos. R.E. Wyatt

- Quasi-classical trajectory and quantum mechanical study of the  $H+D_2 \rightarrow HD+D$  reaction. Comparison with laser-molecular beam experiments*  
10th European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC)  
Salamanca, España. Agosto 1994  
Clave: poster
- 19.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos  
*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*  
*Stereodynamics and Active Control in Chemical Reactions*  
12-15 Diciembre 1994, Orsay-Gif sur Yvette, Francia  
Clave: poster
- 20.- F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Alagia, N. Balucani, P. Casavecchia, E. H. van Kleef, G.G. Volpi  
*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*  
*Stereodynamics and Active Control in Chemical Reactions*  
Orsay-Gif sur Yvette, Francia. 12-15 Diciembre 1994  
Clave: poster
- 21.- F. J. Aoiz, L. Bañares  
*Effect of the vibrational excitation on the  $Cl+HD \rightarrow HCl(DCl)+D(H)$  reaction*  
*8th European Workshop on Molecular Spectroscopy and Photon induced Dynamics*  
Oxford, Gran Bretaña. 3-7 Septiembre 1995  
Clave: poster
- 22.- T. Díez-Rojo, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Menéndez, P. Quintana, J. E. Verdasco, V. J. Herrero, I. Tanarro, V. Sáez Rábanos  
*Espectroscopía de ionización multifotónica resonante (REMPI). Puesta a punto y primeros resultados*  
*XV Reunión Nacional de Espectroscopía*  
Oviedo. España. 15-20 Septiembre 1996  
Clave: comunicación oral
- 23.- L. Bañares, T. Baumert, M. Bergt, B. Kiefer, G. Gerber  
*Femtosecond multiphoton dissociation dynamics of metal carbonyls*  
*7th International Conference on Multiphoton Processes (ICOMP VII)*  
Garmish-Partenkirchen, Alemania. 30 Septiembre-4 Octubre 1996  
Clave: poster
- 24.- A. Alexander, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Brouard, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, J. P. Simons  
*Two and three vector correlations in the dynamics of some elementary reactions*  
*Stereodynamics of Chemical Reactions*  
Bielefeld, Alemania. 1-5 Diciembre 1996  
Clave: poster
- 25.- 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  
*Dynamics of the simplest chlorine atom reaction: an experimental and theoretical study*  
*Stereodynamics of Chemical Reactions*  
Bielefeld, Alemania. 1-5 Diciembre 1996  
Clave: poster
- 26.- L. Bañares, T. Baumert, M. Bergt, B. Kiefer, G. Gerber  
*Femtosekundendynamik der Photodissoziation von Metallcarbonylen*  
*Deutsche Physikalische Gesellschaft. Frühjahrstagung*  
Mainz, Alemania. 3-6 Marzo 1997  
Clave: poster



- 27.- L. Bañares, T. Baumert, M. Bergt, B. Kiefer, G. Gerber  
*Femtosekundendynamik der Photodissoziation von Organometallen*  
*Deutsche Physikalische Gesellschaft. Frühjahrstagung*  
 Mainz, Alemania. 3-6 Marzo 1997  
 Clave: poster
- 28.- A. J. Alexander, F. J. Aoiz, L. Bañares, D. A. Blunt, M. Brouard, Y. Fujimura, J. P. Simons  
*O(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub>@OH(v',N')+H: The anatomy of a reaction*  
*9th European Workshop on Molecular Spectroscopy and Photon induced dynamics*  
 Toulouse, Francia, 7-11 Noviembre 1997  
 Clave: poster
- 29.- F. J. Aoiz, L. Bañares  
*Classical and quantal dynamics of elementary reactions*  
*III Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics*  
 Mira, Portugal, 4-7 Mayo 1998  
 Clave: conferencia invitada
- 30.- F. J. Aoiz, L. Bañares  
*Classical and quantal dynamics of elementary reactions*  
*Workshop on Computational Chemistry*  
 Miraflores, Madrid, España, 18-20 Junio 1998  
 Clave: conferencia invitada
- 31.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, E. Verdasco  
*A quasi-classical trajectory study of the O+H<sub>2</sub>/D<sub>2</sub> reactions: cross sections and rate constants*  
*15th International Symposium on Gas Kinetics*  
 Bilbao, España, 6-12 Septiembre 1998  
 Clave: conferencia invitada
- 32.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero  
*The assessment of the H<sub>3</sub> ab initio potential energy surfaces. State resolved differential cross sections versus thermal rate constants*  
*15th International Symposium on Gas Kinetics*  
 Bilbao, España, 6-12 Septiembre 1998  
 Clave: poster
- 33.- B. Niederjohann, K. Seekamp-Rahn, E. Wrede, L. Schnieder, L. Bañares, F. J. Aoiz, M. J. D'Mello, V.J. Herrero  
*Assessment of the H<sub>3</sub> potential energy surfaces: experimental and quantum mechanical results for the H+D<sub>2</sub>@HD+D reaction at low collision energies*  
*12th European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC XII)*  
 Bristol, Inglaterra. 6-11 Septiembre 1998  
 Clave: poster
- 34.- E. Wrede, L. Schnieder, K. H. Welge, F. J. Aoiz, L. Bañares, B. Martínez-Haya, J. F. Castillo, V.J. Herrero  
*The Hydrogen exchange reaction at high energies: experimental and theoretical cross sections and the influence of the geometric phase effect*  
*12th European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC XII)*  
 Bristol, Inglaterra. 6-11 Septiembre 1998  
 Clave: poster
- 35.- F. J. Aoiz, L. Bañares, T. Díez-Rojo, V.J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro, J. E. Verdasco  
*Espectroscopía de ionización multifotónica resonante (REMPI) de radicales y moléculas*  
*XVI Reunión Nacional de Espectroscopía*  
 Sevilla, 20-25 Septiembre 1998  
 Clave: comunicación oral

- 36.- 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  
*Relajación molecular en expansiones supersónicas de nitrógeno*  
*XVI Reunión Nacional de Espectroscopía*  
Sevilla, 20-25 Septiembre 1998  
Clave: poster
- 37.- F. J. Aoiz, L. Bañares, T. Díez-Rojo, V.J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro, E. Verdasco  
*Low temperature rotational relaxation of N<sub>2</sub> and N<sub>2</sub>-He mixtures in free jets studied by resonance enhanced multiphoton ionization*  
*XVIII Symposium on Molecular Beams*  
Ameland, Holanda. 30 Mayo-4 Junio 1999  
Clave: poster
- 38.- F. J. Aoiz, L. Bañares, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro, E. Verdasco, I. Zapater  
*Photodissociation of dimethyl sulfide at 220-230 nm studied by 2+1 resonance enhanced multiphoton ionization of the CH<sub>3</sub> radical in a molecular beam*  
*XVIII Symposium on Molecular Beams*  
Ameland, Holanda. 30 Mayo-4 Junio 1999  
Clave: poster
- 39.- 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  
*The reaction Cl+H<sub>2</sub>: A crossed molecular beam, quasiclassical trajectory and quantum mechanical scattering study*  
*XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)*  
Asis, Italia. 20-25 Junio 1999  
Clave: poster
- 40.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo  
*Spin-orbit effects in quantum mechanical rate constant calculations for the F+H<sub>2</sub>→HF+H reaction*  
*XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)*  
Asis, Italia. 20-25 Junio 1999  
Clave: presentación oral
- 41.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, V. J. Herrero  
*The dynamics of the O(<sup>1</sup>D)+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*  
*XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)*  
Asis, Italia. 20-25 Junio 1999  
Clave: poster
- 42.- 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  
*The assessment of the H<sub>3</sub> ab initio potential energy surfaces. State-resolved differential cross sections versus thermal rate constants*  
*XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)*  
Asis, Italia. 20-25 Junio 1999  
Clave: poster
- 43.- F. J. Aoiz, L. Bañares, T. Díez-Rojo, V.J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro, E. Verdasco  
*Low temperature rotational relaxation of N<sub>2</sub> and N<sub>2</sub>-He,Ne,Ar mixtures in free jets studied by resonance enhanced multiphoton ionization*  
*XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)*  
Asis, Italia. 20-25 Junio 1999  
Clave: poster

- 44.- F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Menéndez  
*Quasi-classical trajectory study of the Cl+H<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>, HD reactions: cross sections and rate constants*  
*XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)*  
 Asis, Italia. 20-25 Junio 1999  
 Clave: *poster*
- 45.- 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  
*The hydrogen exchange reaction: experimental and theoretical cross sections and the influence of the geometric phase effect*  
*XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)*  
 Asis, Italia. 20-25 Junio 1999  
 Clave: *presentación oral*
- 46.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo  
*Study of spin-orbit effects in the F+H<sub>2</sub> reaction from quantum mechanical rate constant calculations*  
*5th Workshop on Quantum Reactive Scattering*  
 Perugia, Italia. 25-27 Junio 1999  
 Clave: *presentación oral*
- 47.- B. Martínez-Haya, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, J. M. Launay  
*QM and QCT studies of state-to-state differential cross sections for the F+D<sub>2</sub> reaction*  
*5th Workshop on Quantum Reactive Scattering*  
 Perugia, Italia. 25-27 Junio 1999  
 Clave: *poster*
- 48.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, B. Martínez-Haya, M. P. de Miranda, V. Sáez Rábanos  
*Quantal and classical treatments of the stereodynamics of elementary reactions. the state-resolved k-k' vector correlation*  
*Stereochemistry and Control in Molecular Reaction Dynamics. Faraday Discussion. 113*  
 Leeds, Reino Unido. 5-7 Julio 1999  
 Clave: *poster*
- 49.- F. J. Aoiz, L. Bañares, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, E. Verdasco, I. Zapater  
*Photodissociation of dimethyl sulfide at 220-230 nm studied by 2+1 resonance enhanced multiphoton ionization of the CH<sub>3</sub> radical in a molecular beam*  
*J. P. Simons. A celebratory meeting of dynamics and spectroscopy*  
 Oxford, Reino Unido. 13-14 Septiembre 1999  
 Clave: *poster*
- 50.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, C. Vallance, W. Denzer, M. Brouard, P. Honvault, J. M. Launay  
*Quantum mechanical, quasiclassical trajectory and experimental studies of the O(<sup>1</sup>D)+D<sub>2</sub>→OH(v'=4,j')+H reaction*  
*DYNAM 2000. La dynamique chimique à l'aube du nouveau millénaire*  
 Arcachon, Francia. 31 Mayo-3 Junio 2000  
 Clave: *poster*
- 51.- F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Brouard, J. F. Castillo, V. J. Herrero, P. Honvault, J. M. Launay  
*A quasi-classical trajectory surface hopping and quantum mechanical study of the dynamics of the O(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub>, HD reactions on new ab initio potential energy surfaces. A comparison with experimental results*  
*16<sup>th</sup> International Symposium on Gas Kinetics*  
 Cambridge, Reino Unido. 23-27 Julio 2000  
 Clave: *presentación oral*
- 52.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, M. Menéndez, V. Sáez Rábanos, I. Tanarro, E. Verdasco  
*Quasiclassical trajectory study of the Cl+H<sub>2</sub> and H+HCl reactions and their isotopic variants on a new ab initio potential energy surface.*  
*16<sup>th</sup> International Symposium on Gas Kinetics*  
 Cambridge, Reino Unido. 23-27 Julio 2000

Clave: poster

- 53.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro, E. Verdasco  
*Low temperature rotational relaxation of N<sub>2</sub> and of mixtures of N<sub>2</sub> with He and Ne in free jets studied by resonance enhanced multiphoton ionization*  
*16<sup>th</sup> International Symposium on Gas Kinetics*  
Cambridge, Reino Unido. 23-27 Julio 2000  
Clave: poster
- 54.- 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  
*Fotodisociación del CH<sub>3</sub>SCH<sub>3</sub> en la primera banda de absorción*  
*XVII Reunión Nacional de Espectroscopía*  
León, España. 24-29 Septiembre 2000  
Clave: comunicación oral
- 55.- F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro, J. E. Verdasco  
*Estudio por fotoionización resonante (REMPI) de la relajación rotacional del N<sub>2</sub> por colisiones con gases nobles a baja temperatura*  
*XVII Reunión Nacional de Espectroscopía*  
León, España. 24-29 Septiembre 2000  
Clave: poster
- 56.- 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  
*Dynamics of the Cl+H<sub>2</sub>/D<sub>2</sub> reaction: A comparison of crossed molecular beam experiments with quasiclassical trajectory and quantum mechanical calculations on a new ab initio potential energy surface*  
*MOLEC 2000. European Conference on Dynamics of Molecular Collisions*  
Jerusalem, Israel. 17-22 Septiembre 2000  
Clave: poster
- 57.- I. R. Solá, B. Y. Chang, V. S. Malinovsky, L. Bañares, J. Santamaría  
*Transferring wavefunctions between electronic states by shaping light-induced potentials*  
*First General Meeting of the ULTRA Programme. European Science Foundation*  
Coimbra, Portugal. 22-24 Octubre 2000  
Clave: poster
- 58.- 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  
*A quasi-classical trajectory and quantum mechanical study of the stereodynamics of the O(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub>, HD reactions on new ab initio potential energy surfaces. Theoretical predictions and comparison with experimental results*  
*Stereodynamics of chemical reactions*  
El Escorial, España. 1-5 Diciembre 2000  
Clave: poster
- 59.- 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  
*Dynamics of the Cl+H<sub>2</sub>/D<sub>2</sub> reaction: A comparison of crossed molecular beam experiments with quasiclassical trajectory and quantum mechanical calculations on a new ab initio potential energy surface*  
*Stereodynamics of chemical reactions*  
El Escorial, España. 1-5 Diciembre 2000  
Clave: presentación oral
- 60.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo  
*Classical and quantum dynamical study of the dynamics of elementary reactions*  
*2001 Pasadena Workshop on Quantum Reaction Dynamics*  
Pasadena, EE.UU. 10-13 Enero 2001  
Clave: presentación oral

- 61.- 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  
*The Cl+H<sub>2</sub>/D<sub>2</sub> reaction dynamics: a combined theoretical and experimental study*  
2001 Pasadena Workshop on Quantum Reaction Dynamics  
Pasadena, EE.UU. 10-13 Enero 2001  
Clave: poster
- 62.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, D. Sokolovski  
*The H+D<sub>2</sub> quantum reaction dynamics in the collision energy range 0.5-2.2 eV. A search for dynamical resonances*  
2001 Pasadena Workshop on Quantum Reaction Dynamics  
Pasadena, EE.UU. 10-13 Enero 2001  
Clave: poster
- 63.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Santamaría  
*Quasi-classical trajectory study of the H+H<sub>2</sub>O and H+D<sub>2</sub>O reactions*  
2001 Pasadena Workshop on Quantum Reaction Dynamics  
Pasadena, EE.UU. 10-13 Enero 2001  
Clave: poster
- 64.- F. J. Aoiz, L. Bañares, B. Martínez-Haya, P. Quintana, E. Verdasco  
*The photodissociation of CH<sub>3</sub>SCH<sub>3</sub> and CD<sub>3</sub>SCD<sub>3</sub> in the first absorption band studied by velocity map ion imaging and REMPI*  
Gordon Research Conference on Molecular Energy Transfer  
Ventura, E.E.U.U. 14-19 Enero 2001  
Clave: poster
- 65.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Santamaría  
*The dynamics and stereodynamics of the H+H<sub>2</sub>O and H+D<sub>2</sub>O reactions studied by quasi-classical trajectory calculations*  
Gordon Research Conference on Molecular Energy Transfer  
Ventura, E.E.U.U. 14-19 Enero 2001  
Clave: poster
- 66.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Santamaría  
*A quasi-classical trajectory study of the H+N<sub>2</sub>O reaction*  
Gordon Research Conference on Molecular Energy Transfer  
Ventura, E.E.U.U. 14-19 Enero 2001  
Clave: poster
- 67.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, D. Sokolovski, F. Fernández-Alonso, B. D. Bean, R. N. Zare  
*Observation of scattering resonances in the H+D<sub>2</sub> reaction: a new spectroscopy of the transition state region*  
Vth Femtochemistry Confererence  
Toledo, España 2-6 Septiembre 2001  
Clave: poster
- 68.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, V. J. Herrero, P. Honvault, J.-M. Launay, B. Martínez-Haya  
*The dynamics of the O(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub> reaction: Theoretical studies and comparison with experimental results*  
26<sup>th</sup> International Symposium on Free Radicals  
Asís, ItaliaEspaña 2-7 Septiembre 2001  
Clave: poster
- 69.- F. J. Aoiz, L. Bañares, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, E. Verdasco  
*The photodissociation of dimethyl sulfide from the first absorption band*  
26<sup>th</sup> International Symposium on Free Radicals  
Asís, ItaliaEspaña 2-7 Septiembre 2001  
Clave: poster

- 70.- N. Balucani, L. Cartechini, G. Capozza, E. Segoloni, P. Casavecchia, G. G. Volpi, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, D. Skouteris, G. Capecchi, H.-J. Werner  
*Crossed beam and quantum mechanical studies of prototype abstraction reactions: Cl(<sup>2</sup>P<sub>3/2,1/2)+H<sub>2</sub></sub>*  
*26<sup>th</sup> International Symposium on Free Radicals*  
 Asís, ItaliaEspaña 2-7 Septiembre 2001  
 Clave: *poster*
- 71.- N. Balucani, L. Cartechini, G. Capozza, E. Segoloni, P. Casavecchia, G. G. Volpi, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, D. Skouteris, G. Capecchi, H.-J. Werner  
*Crossed beam and quantum mechanical studies of prototype abstraction reactions: Cl(<sup>2</sup>P<sub>3/2,1/2)+H<sub>2</sub></sub>*  
*26<sup>th</sup> International Symposium on Free Radicals*  
 Asís, Italia 2-7 Septiembre 2001  
 Clave: *poster*
- 72.- F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, J.-M. Launay  
*Reaction dynamics of insertion reactions: quasiclassical trajectory and quantum mechanical study of the O(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub>, N(<sup>2</sup>D)+H<sub>2</sub> and C(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub> reactions*  
*5<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics*  
 Lisboa, Portugal 23-26 Marzo 2002  
 Clave: *presentación oral*
- 73.- J. Barr, I. Torres, P. Quintana, F. J. Aoiz, L. Bañares, E. Verdasco, B. Martínez-Haya  
*Recoil energy, rovibrational population, and alignment of CD<sub>3</sub> fragments following the near ultraviolet photodissociation of dimethyl sulfide-d<sub>6</sub>*  
*5<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics*  
 Lisboa, Portugal 23-26 Marzo 2002  
 Clave: *poster*
- 74.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares  
*A quasiclassical trajectory study of the H+H<sub>2</sub>O and H+D<sub>2</sub>O reactions*  
*5<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics*  
 Lisboa, Portugal 23-26 Marzo 2002  
 Clave: *poster*
- 75.- P. Honvault, J.-M. Launay, F. J. Aoiz, L. Bañares  
*Quantum-mechanical and quasi-classical trajectory studies of the insertion reaction S(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub>@SH+H*  
*MOLEC 2002. European Conference on Dynamics of Molecular Collisions*  
 Estambul, Turquía. 1-5 Septiembre 2002  
 Clave: *poster*
- 76.- G. Capozza, N. Balucani, E. Segoloni, R. Bobbenkamp, A. Russo, P. Casavecchia, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. 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(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub>(D<sub>2</sub>)*  
*MOLEC 2002. European Conference on Dynamics of Molecular Collisions*  
 Estambul, Turquía. 1-5 Septiembre 2002  
 Clave: *poster*
- 77.- G. Capozza, N. Balucani, E. Segoloni, P. Casavecchia, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, J.-M. Launay  
*Quantum effects in the differential cross sections for the insertion reaction N(<sup>2</sup>D)+H<sub>2</sub>*  
*MOLEC 2002. European Conference on Dynamics of Molecular Collisions*  
 Estambul, Turquía. 1-5 Septiembre 2002  
 Clave: *poster*
- 78.- G. Capozza, N. Balucani, E. Segoloni, L. Cartechini, P. Casavecchia, G. G. Volpi, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, J.-M. Launay  
*Quantum effects in the differential cross sections for the insertion reaction N(<sup>2</sup>D)+H<sub>2</sub>*  
*Stereodynamics of Chemical Reactions*

- Schoorl, Holanda. 1-6 Diciembre 2002  
Clave: *poster*
- 79.- 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(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub>(D<sub>2</sub>)*  
*Stereodynamics of Chemical Reactions*  
Schoorl, Holanda. 1-6 Diciembre 2002  
Clave: *poster*
- 80.- F. J. Aoiz, L. Bañares, E. Verdasco, B. Martínez-Haya, V. Sáez Rábanos, M. P. de Miranda  
*Stereodynamics of elementary reactions and inelastic processes: H+D<sub>2</sub> and Ar+NO*  
*Stereodynamics of Chemical Reactions*  
Schoorl, Holanda. 1-6 Diciembre 2002  
Clave: *conferencia invitada*
- 81.- L. Bañares, J. G. Izquierdo, R. Izquierdo-Hornillos, M. Menéndez, G. Pino, E. Verdasco  
*Analysis of PAHs and stimulant drugs by laser multiphoton ionization with time-of-flight mass spectrometry and gas chromatography*  
*Tulip Summer School on Modern Developments in Spectroscopy*  
Noordwijk, Holanda. 11-14 Mayo 2003  
Clave: *poster*
- 82.- L. Bañares  
*Time-resolved dynamics of insertion reactions. A quasi-classical trajectory study and comparison with quantum mechanical and experimental results*  
*XX International Symposium on Molecular Beams*  
Lisboa, Portugal. 8-13 Junio 2003  
Clave: *conferencia invitada*
- 83.- G. Capozza, N. Balucani, E. Segoloni, R. Bobbenkamp, A. Russo, L. Cartechini, 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 an ab initio potential energy surface for the C(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub> and N(<sup>2</sup>D)+H<sub>2</sub>*  
*XX International Symposium on Molecular Beams*  
Lisboa, Portugal. 8-13 Junio 2003  
Clave: *poster*
- 84.- G. Amaral, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, G. Pino, I. Torres  
*The photodissociation of CD<sub>3</sub>SOCD<sub>3</sub> at 220 nm: internal and translational energy distributions of the CD<sub>3</sub> fragment*  
*XVIII International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET)*  
San Lorenzo de El Escorial, España. 15-20 Junio 2003  
Clave: *poster*
- 85.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, I. Torres, E. Verdasco  
*Rotational alignment of the CD<sub>3</sub> fragment following the near UV photodissociation of CD<sub>3</sub>SCD<sub>3</sub>*  
*XVIII International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET)*  
San Lorenzo de El Escorial, España. 15-20 Junio 2003  
Clave: *poster*
- 86.- F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Menéndez, K. A. Peterson, E. Verdasco  
*A quasiclassical trajectory study of the dynamics of the O(<sup>1</sup>D)+HBr@OH(OBr)+Br(H) reaction on an ab initio potential energy surface*  
*XVIII International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET)*  
San Lorenzo de El Escorial, España. 15-20 Junio 2003  
Clave: *poster*

- 87.- L. Bañares, F. J. Aoiz  
*A quasiclassical trajectory time-resolved study of the dynamics of insertion reactions.*  
*XVIII International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET)*  
San Lorenzo de El Escorial, España. 15-20 Junio 2003  
Clave: *poster*
- 88.- G. Capozza, N. Balucani, E. Segoloni, R. Bobbenkamp, A. Russo, L. Cartechini, 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 the C(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub> and N(<sup>2</sup>D)+H<sub>2</sub>*  
*XVIII International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET)*  
San Lorenzo de El Escorial, España. 15-20 Junio 2003  
Clave: *poster*
- 89.- 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+N<sub>2</sub>O reaction.*  
*XVIII International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET)*  
San Lorenzo de El Escorial, España. 15-20 Junio 2003  
Clave: *poster*
- 90.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. A. Collins  
*Quasi-classical trajectory study of the dynamics of the H+H<sub>2</sub>O and H+D<sub>2</sub>O reactions on an ab initio potential energy surface.*  
*XVIII International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET)*  
San Lorenzo de El Escorial, España. 15-20 Junio 2003  
Clave: *poster*
- 91.- P. Honvault, J.-M. Launay, F. J. Aoiz, L. Bañares  
*Quantum-Mechanical and Quasi-classical studies of the S(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub>/HD insertion reactions.*  
*XVIII International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET)*  
San Lorenzo de El Escorial, España. 15-20 Junio 2003  
Clave: *poster*
- 92.- E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, S. A. Vázquez, F. J. Aoiz, L. Bañares, M.N.D.S. Cordeiro  
*A direct trajectory study of the acetone photodissociation on the triplet surface.*  
*XVIII International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET)*  
San Lorenzo de El Escorial, España. 15-20 Junio 2003  
Clave: *comunicación oral*
- 93.- S. A. Vázquez, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo  
*A direct classical trajectory study of the HCl elimination from the 193 nm photodissociation of vinyl chloride.*  
*XVIII International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET)*  
San Lorenzo de El Escorial, España. 15-20 Junio 2003  
Clave: *poster*
- 94.- E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, S. A. Vázquez, F. J. Aoiz, L. Bañares, M.N.D.S. Cordeiro  
*A direct trajectory study of the acetone photodissociation on the triplet surface.*  
*International Complutense Seminar on Quantum Reactive Scattering (VII QRS)*  
San Lorenzo de El Escorial, España. 20-23 Junio 2003  
Clave: *poster*
- 95.- F. J. Aoiz, L. Bañares  
*Time-resolved dynamics of insertion reactions. Quasiclassical trajectory study and comparison with quantum mechanical and experimental results*  
*XXIX Reunión Bial de la Real Sociedad Española de Física. 6<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2003*  
Madrid, España. 7-11 Julio 2003  
Clave: *poster*



- 96.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, I. Torres, E. Verdasco  
*Near UV photodissociation of CD<sub>3</sub>SCD<sub>3</sub>: CD<sub>3</sub> fragment (v,J) vector correlations*  
*XXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. 6<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2003*  
Madrid, España. 7-11 Julio 2003  
Clave: poster
- 97.- G. Amaral, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, G. Pino, I. Torres  
*Photodissociation of CD<sub>3</sub>SOCD<sub>3</sub> at 220 nm: internal and translational energy distribution of the CD<sub>3</sub> fragment*  
*XXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. 6<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2003*  
Madrid, España. 7-11 Julio 2003  
Clave: poster
- 98.- L. Bañares, J. G. Izquierdo, R. Izquierdo-Hornillos, M. Menéndez, G. Pino, E. Verdasco  
*Analysis of PAHs and synthetic hormones by laser multiphoton ionization with time-of-flight mass spectrometry and gas chromatography*  
*XXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. 6<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2003*  
Madrid, España. 7-11 Julio 2003  
Clave: poster
- 99.- E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, S. A. Vázquez, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Santamaría-Antonio  
*Quasi-classical trajectory study of H<sub>2</sub> elimination in the photodissociation of difluoroethylenes at 193 nm*  
*XXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. 6<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2003*  
Madrid, España. 7-11 Julio 2003  
Clave: poster
- 100.- 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+N<sub>2</sub>O reaction*  
*XXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. 6<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2003*  
Madrid, España. 7-11 Julio 2003  
Clave: poster
- 101.- R. De Nalda, J. G. Izquierdo, L. Bañares, D. Irimia, M. H. M. Janssen  
*Ultrafast photofragmentation dynamics of CH<sub>2</sub>BrCl studied by femtosecond velocity map imaging*  
*Conference of ESF Femtochemistry and Femtobiology*  
Pécs, Hungría. 25-28 Marzo 2004  
Clave: poster
- 102.- F. J. Aoiz, L. Bañares, M. P. Miranda  
*Stereodynamics of simple reactions: How does the direction of the initial rotation control the reactivity*  
*227<sup>th</sup> American Chemical Society National Meeting*  
Anaheim, EE.UU. 28 Marzo-1 Abril 2004  
Clave: conferencia invitada
- 103.- L. Bañares  
*Recent progress on reaction dynamics of elementary abstraction and insertion reactions*  
*8<sup>th</sup> European Conference on Atomic and Molecular Physics (ECAMP 8)*  
Rennes, Francia, 6-10 Julio 2004  
Clave: conferencia invitada
- 104.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, I. Torres, G. A. Pino, G. A. Amaral  
*Photodissociation dynamics of polyatomic molecules containing sulfur: An experimental study*  
*27<sup>th</sup> International Symposium on Free Radicals*

- Taipei, Taiwan. 25-30 Julio 2004  
Clave: *conferencia invitada*
- 105.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, S. Vázquez, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos  
*Quasiclassical trajectory studies of the F+CH<sub>4</sub> reaction using an ab initio potential energy surface constructed by interpolation*  
*27<sup>th</sup> International Symposium on Free Radicals*  
Taipei, Taiwan. 25-30 Julio 2004  
Clave: *poster*
- 106.- 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(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub> and N(<sup>2</sup>D)+H<sub>2</sub>*  
*27<sup>th</sup> International Symposium on Free Radicals*  
Taipei, Taiwan. 25-30 Julio 2004  
Clave: *poster*
- 107.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares  
*Quasiclassical trajectory studies of the Cl+CH<sub>4</sub> reaction using an ab initio potential energy surface constructed by interpolation*  
*27<sup>th</sup> International Symposium on Free Radicals*  
Taipei, Taiwan. 25-30 Julio 2004  
Clave: *poster*
- 108.- L. Bañares  
*What is and what is not understood about the dynamics of the H+H<sub>2</sub> reaction*  
*XV International Conference on the Dynamics of Molecular Systems (MOLEC XV)*  
Nunspeet, Holanda, 5-10 Septiembre 2004  
Clave: *conferencia invitada*
- 109.- D. Irimia, R. De Nalda, J. G. Izquierdo, L. Bañares, M. H. M. Janssen  
*Femtosecond imaging of electrons and ions in time resolved photodynamics*  
*XV International Conference on the Dynamics of Molecular Systems (MOLEC XV)*  
Nunspeet, Holanda, 5-10 Septiembre 2004  
Clave: *poster*
- 110.- L. Bañares  
*Femtosecond velocity mapping of molecular multichannel photofragmentation dynamics*  
*PICNIC EU Research Training Network, October Meeting*  
París, Francia, 4-5 Octubre 2004  
Clave: *conferencia invitada*
- 111.- R. De Nalda, J. G. Izquierdo, L. Bañares  
*Femtosecond photofragmentation dynamics of gas phase CH<sub>2</sub>BrCl*  
*7<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2005*  
Lisboa, Portugal, 21-23 Marzo 2005  
Clave: *poster*
- 112.- J. G. Izquierdo, G. Pino, M. Menéndez, R. Izquierdo-Hornillos, J. E. Verdasco, L. Bañares  
*A novel gas chromatographic technique with laser multiphoton ionization and time-of-flight mass spectrometry*  
*7<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2005*  
Lisboa, Portugal, 21-23 Marzo 2005  
Clave: *comunicación oral*
- 113.- 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

- Dynamics of prototype insertion reactions: Crossed beam experiments versus quantum and quasiclassical trajectory scattering calculations on ab initio potential energy surfaces for C(<sup>1</sup>D)+H<sub>2</sub> and N(<sup>2</sup>D)+H<sub>2</sub>*  
*XXI International Symposium on Molecular Beams*  
Creta, Grecia. 15-20 Mayo 2005  
Clave: poster
- 114.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, S. Vázquez  
*The F+CH<sub>4</sub>→HF+CH<sub>3</sub> reaction dynamics on a dual-level interpolated potential energy surface. A quasiclassical trajectory study*  
*XXI International Symposium on Molecular Beams*  
Creta, Grecia. 15-20 Mayo 2005  
Clave: poster
- 115.- A. E. Pomerantz, F. Ausfelder, R. N. Zare, J. C. Juanes-Marcos, S. C. Althorpe, V. Sáez Rábanos, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo  
*Quantum state distributions for reactive and inelastic H+D<sub>4</sub> collisions*  
*XXI International Symposium on Molecular Beams*  
Creta, Grecia. 15-20 Mayo 2005  
Clave: poster
- 116.- R. De Nalda, J. G. Izquierdo, L. Bañares  
*Ultrafast photofragmentation dynamics of gas phase polyatomic molecules*  
*VII Congreso de Fotoquímica*  
Logroño, España, 22-24 Junio 2005  
Clave: conferencia oral
- 117.- J. G. Izquierdo, G. Pino, M. Menéndez, R. Izquierdo-Hornillos, J. E. Verdasco, L. Bañares  
*Performance of a gas chromatographic technique with laser multiphoton ionization and time-of-flight mass spectrometry*  
*VII Congreso de Fotoquímica*  
Logroño, España, 22-24 Junio 2005  
Clave: poster
- 118.- L. Bañares  
*Recent progress on the dynamics of simple insertion reactions*  
*VIII<sup>th</sup> Workshop on Quantum Reactive Scattering*  
Santa Cruz, California, EE.UU., 15-19 Julio 2005  
Clave: conferencia invitada
- 119.- F. J. Aoiz, J. F. Castillo, L. Bañares  
*Quasiclassical studies of the dynamics of 4 and 6 atom reactions on ab initio potential energy surfaces*  
*VIII<sup>th</sup> Workshop on Quantum Reactive Scattering*  
Santa Cruz, California, EE.UU., 15-19 Julio 2005  
Clave: conferencia invitada
- 120.- F. J. Aoiz, L. Bañares, T. González-Lezana, V. J. Herrero, I. Tanarro  
*Influence of rotation and isotope effect on the dynamics of the N(<sup>2</sup>D)+H<sub>2</sub> reactive system*  
*VIII<sup>th</sup> Workshop on Quantum Reactive Scattering*  
Santa Cruz, California, EE.UU., 15-19 Julio 2005  
Clave: poster
- 121.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, S. Vázquez, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos  
*The F+CH<sub>4</sub>(CD<sub>4</sub>) reaction dynamics using an ab initio potential energy surface constructed by interpolation*  
*VIII<sup>th</sup> Workshop on Quantum Reactive Scattering*  
Santa Cruz, California, EE.UU., 15-19 Julio 2005  
Clave: poster
- 122.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares

- Quasiclassical trajectory studies of the Cl+CH<sub>4</sub> reaction using an ab initio potential energy surface constructed by interpolation*  
*VIII<sup>th</sup> Workshop on Quantum Reactive Scattering*  
Santa Cruz, California, EE.UU., 15-19 Julio 2005  
Clave: *poster*
- 123.- R. de Nalda, F. Ausfelder, L. Bañares, C. Horn, M. Krug, M. Wollenhaupt, T. Baumert  
*Pulse shaping control of spatially aligned rotational wavepackets of N<sub>2</sub> and O<sub>2</sub>*  
*Femtochemistry VII*  
Washington, EE.UU., 17-22 Julio 2005  
Clave: *poster*
- 124.- R. de Nalda, J. G. Izquierdo, L. Bañares, D. Irimia, M. H. M. Janssen  
*Ultrafast photofragmentation dynamics of gas phase polyatomic molecules*  
*Femtochemistry VII*  
Washington, EE.UU., 17-22 Julio 2005  
Clave: *poster*
- 125.- C. Horn, M. Krug, M. Wollenhaupt, T. Baumert, R. de Nalda, F. Ausfelder, L. Bañares  
*Pulse shaping control of spatially aligned rotational wavepackets of N<sub>2</sub> and O<sub>2</sub>*  
*Laser Control and Molecular Switches. The Brijuni Conference*  
Brijuni, Croacia, 28 Agosto-2 Septiembre 2005  
Clave: *conferencia invitada*
- 126.- L. Bañares  
*Femtosecond velocity mapping of molecular multichannel photofragmentation*  
*LASERLAB Europe User Meeting*  
Amsterdam, Holanda, 30 Septiembre 2005  
Clave: *conferencia invitada*
- 127.- 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  
*Rotational relaxation at low temperature in free jets CO/Ne, and CO/He studied with Resonance-Enhanced Multiphoton Ionization (REMPI) Spectroscopy*  
*19th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy*  
Salamanca, España, 11-16 Septiembre 2005.  
Clave: *poster*
- 128.- L. Bañares  
*Velocity map imaging experiments on ultrafast photodissociation dynamics*  
*4th International Meeting on Photodynamics*  
La Habana, Cuba, 6-10 Febrero 2006  
Clave: *conferencia invitada*
- 129.- C. Horn, M. Krug, M. Wollenhaupt, T. Baumert, R. de Nalda, F. Ausfelder, L. Bañares  
*Pulse shaping control of spatially aligned rotational wavepackets of N<sub>2</sub> and O<sub>2</sub>*  
*Deutsche Physikalische Gesellschaft. AMOP-Frühjahrstagung*  
Frankfurt am Main, Alemania, 13-17 Marzo 2006  
Clave: *comunicación oral*
- 130.- R. de Nalda, L. Bañares, C. Horn, M. Krug, M. Wollenhaupt, T. Baumert  
*Adaptive control of aligned rotational wavepackets of N<sub>2</sub>*  
*European Conference on Nonlinear Spectroscopy (ECONOS)*  
Smolenice, República Checa, 9-11 Abril 2006  
Clave: *conferencia invitada*

- 131.- J. Durá, J. G. Izquierdo, R. de Nalda, L. Bañares  
*Velocity map imaging experiments on ultrafast photodissociation dynamics*  
*Tulip Summer School. Modern Developments in Spectroscopy*  
Noordwijk, Holanda, 26-29 Abril 2006  
Clave: *poster*
- 132.- J. Durá, R. de Nalda, L. Bañares  
*Lifetime measurements of dioxoborane derivatives molecular probes by fluorescence up conversion*  
*Summer School on Ultrafast Reaction Dynamics and applications. European Science Foundation. DYNA*  
*programme*  
Vilamoura, Portugal, 1-4 Junio 2006  
Clave: *poster*
- 133.- F. J. Aoiz, J. F. Castillo, L. Bañares  
*The dynamics of 4 and 6 atom reactions on interpolated ab initio potential energy surfaces*  
*ESPA2006. Electronic Structure: Principles and Applications*  
Santiago de Compostela, España, 18-21 Julio 2006  
Clave: *conferencia invitada*
- 134.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares  
*Quasiclassical trajectory studies of the Cl+CH<sub>4</sub> reaction using an ab initio potential energy surface constructed by interpolation*  
*ESPA2006. Electronic Structure: Principles and Applications*  
Santiago de Compostela, España, 18-21 Julio 2006  
Clave: *poster*
- 135.- J. F. Castillo, N. Bulut, L. Bañares  
*Quantum wave packet studies of the N(<sup>2</sup>D)+H<sub>2</sub> reaction*  
*ESPA2006. Electronic Structure: Principles and Applications*  
Santiago de Compostela, España, 18-21 Julio 2006  
Clave: *poster*
- 136.- F. Ausfelder, J. G. Izquierdo, G. A. Amaral, F. J. Aoiz, L. Bañares  
*Photodissociation of mercaptan, new insights into an old story*  
*19<sup>th</sup> International Symposium on Gas Kinetics*  
Orleans, Francia, 22-27 Julio 2006  
Clave: *poster*
- 137.- J. G. Izquierdo, G. A. Amaral, F. Ausfelder, L. Rubio, F. J. Aoiz, L. Bañares  
*Velocity map imaging study of the photodissociation of CH<sub>3</sub>SH*  
*IBER2006- 8<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics*  
Aranjuez, España, 31 Agosto-4 Septiembre 2006  
Clave: *poster*
- 138.- A. Arregui, L. Bañares  
*Matrix assisted laser desorption ionization (MALDI) of low molecular weight polymers*  
*IBER2006- 8<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics*  
Aranjuez, España, 31 Agosto-4 Septiembre 2006  
Clave: *poster*
- 139.- J. G. Izquierdo, R. de Nalda, J. Durá, L. Bañares  
*Femtosecond clocking of CH<sub>3</sub>I photodissociation by velocity map imaging*  
*IBER2006- 8<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics*  
Aranjuez, España, 31 Agosto-4 Septiembre 2006  
Clave: *presentación oral*
- 140.- S. Gaspard, M. Oujja, R. de Nalda, C. Abrusci, F. Catalina, L. Bañares, M. Castillejo  
*Submicro foaming in gelatine by nanosecond and femtosecond pulsed laser irradiation*

5<sup>th</sup> International Conference on Photo-Excited Processes and Applications  
Charlottesville, Virginia, EE.UU., 3-7 Septiembre 2006  
Clave: *presentación oral*

- 141.- J. G. Izquierdo, J. Durá, R. de Nalda, G. A. Amaral, F. Ausfelder, L. Bañares  
*Ultrafast photodissociation dynamics by velocity map imaging*  
232<sup>nd</sup> American Chemical Society National Meeting  
San Francisco, EE.UU., 10-14 Septiembre 2006.  
Clave: *contribución oral*
- 142.- L. Bañares  
*Ultrafast photodissociation dynamics by velocity map imaging*  
5<sup>th</sup> meeting of COST working group D26/0002/02  
Madrid, España, 27-28 Octubre 2006  
Clave: *conferencia invitada*
- 143.- R. de Nalda, J. G. Izquierdo, J. Durá, L. Bañares  
*A femtosecond imaging stopwatch for the bond breakage of a polyatomic molecule*  
ECAMP9 – 9<sup>th</sup> European Conference on Atoms, Molecules and Photons  
Creta, Grecia, 6-11 Mayo 2007  
Clave: *presentación oral*
- 144.- L. Bañares  
*Photodissociation dynamics using velocity map imaging and ultrafast lasers*  
COMET XX – 20<sup>th</sup> European Conference on Molecular Energy Transfer  
Arcachon, Francia, 3-7 Junio 2007  
Clave: *conferencia invitada*
- 145.- G. A. Amaral, L. Rubio-Lago, A. Arregui, J. G. Izquierdo, F. Wang, D. Zouris, T. N. Kitsopoulos, L. Bañares  
*Slice imaging study of the roaming atom mechanism in acetaldehyde photodissociation at 248 nm*  
COMET XX – 20<sup>th</sup> European Conference on Molecular Energy Transfer  
Arcachon, Francia, 3-7 Junio 2007  
Clave: *presentación oral*
- 146.- S. Gaspard, M. Oujja, R. de Nalda, C. Abrusci, F. Catalina, L. Bañares, S. Lazare, M. Castillejo  
*Nanofoaming in biopolymers by femtosecond pulsed laser irradiation*  
E-MRS 2007 Spring Meeting  
Estrasburgo, Francia, 28 Mayo-1 Junio 2007  
Clave: *conferencia invitada*
- 147.- L. Bañares  
*Dynamics of ion-molecule reactions by adiabatic quantum and quasiclassical trajectory calculations: the H<sub>3</sub><sup>+</sup> and LiH<sub>2</sub><sup>+</sup> systems*  
IX Workshop on Quantum Reactive Scattering  
Cambridge, Reino Unido, 18-21 Julio 2007  
Clave: *conferencia invitada*
- 148.- N. Bulut, J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares  
*Reaction dynamics and kinetics of the LiH+H<sup>+</sup> reaction by time-dependent real wave packet and quasiclassical trajectory calculations*  
IX Workshop on Quantum Reactive Scattering  
Cambridge, Reino Unido, 18-21 Julio 2007  
Clave: *poster*

---

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

- 149.- E. Carmona Novillo, T. González-Lezana, O. Roncero, P. Honvault, J. M. Launay, N. Bulut, F. J. Aoiz, L. Bañares, A. Trottier, E. Wrede  
*The  $H^+D_2(v=0, j=0)$  reaction: a comparison between theory and experiment*  
*IX Workshop on Quantum Reactive Scattering*  
Cambridge, Reino Unido, 18-21 Julio 2007  
Clave: *poster*
- 150.- J. Durá, J. G. Izquierdo, L. Bañares, J. Álvarez, R. de Nalda  
*Femtosecond transition state imaging of A band  $CH_3I$  photodissociation*  
*Femtochemistry and Femtobiology 9*  
Oxford, Reino Unido, 22-26 Julio 2007  
Clave: *poster*
- 151.- N. Bulut, J. F. Castillo, L. Bañares  
*Quasiclassical trajectory and time-dependent wave packet calculations on the  $Li+H_2^+$  reaction dynamics*  
*24<sup>th</sup> International Physics Congress*  
Malatya, Turquía, 28-31 Agosto 2007  
Clave: *presentación oral*
- 152.- S. Gaspard, M. Oujja, R. de Nalda, M. Castillejo, C. Abrusci, F. Catalina, L. Bañares, C. Domingo, R. Bonneau, S. Lazare  
*Nanofoaming dynamics in biopolymers by femtosecond laser irradiation*  
*9<sup>th</sup> International Conference on Laser Ablation (COLA 2007)*  
Tenerife, España, 24-28 Septiembre 2007  
Clave: *poster*
- 153.- A. R. Hortal, P. Hurtado, B. Martínez-Haya, A. Arregui, L. Bañares  
*Polyethyleneglycol cationization in matrix assisted laser desorption ionization effects of salt properties and sample preparation method*  
*9<sup>th</sup> International Conference on Laser Ablation (COLA 2007)*  
Tenerife, España, 24-28 Septiembre 2007  
Clave: *poster*
- 154.- M. López-Arias, J. Álvarez, R. de Nalda, M. Martín, A. Arregui, L. Bañares  
*Generation of CdS clusters using laser ablation: effects of wavelength and fluence*  
*9<sup>th</sup> International Conference on Laser Ablation (COLA 2007)*  
Tenerife, España, 24-28 Septiembre 2007  
Clave: *poster*
- 155.- L. Bañares  
*Photodissociation dynamics by femtosecond ion imaging*  
*4th LASERLAB User Meeting*  
Madrid, España, 28-29 Noviembre 2007  
Clave: *conferencia invitada*
- 156.- M. Sanz, M. Walczak, R. de Nalda, M. Oujja, J. Rodriguez, J. G. Izquierdo, L. Bañares, M. Castillejo  
*Femtosecond pulsed laser deposition of nanostructured  $TiO_2$  films*  
*E-MRS 2008 Spring Meeting. Symposium B*  
Estrasburgo, Francia, 28 Mayo-1 Junio 2008  
Clave: *contribución oral*
- 157.- L. Bañares  
*Introduction to Session on Photodissociation Dynamics*  
*(Discussion Leader)*  
*Gordon Research Conference on Atomic and Molecular Interactions*  
New London, EE. UU., 5-11 Julio 2008  
Clave: *presentación invitada*

- 158.- J. Durá, R. de Nalda, A. García-Vela, J. G. Izquierdo, G. A. Amaral, L. Bañares  
*Unraveling the photodissociation dynamics of CH<sub>3</sub>I photodissociation by femtosecond imaging*  
Gordon Research Conference on Atomic and Molecular Interactions  
New London, EE. UU., 5-11 Julio 2008  
Clave: *poster*
- 159.- L. Bañares  
*Non-adiabaticity in photodissociation dynamics from nanosecond and femtosecond imaging experiments*  
NSF/PIRE Workshop. Theoretical and Computational Chemistry. Potential Energy Surfaces, Collisions with Surfaces, and Electronic Non-Adiabatic Reactions  
Viena, Austria, 18-19 Agosto 2008  
Clave: *conferencia invitada*
- 160.- N. Bulut, J. F. Castillo, L. Bañares, F. J. Aoiz  
*Flux analysis of the Li+H<sub>2</sub><sup>+</sup> reaction for calculating reactive integral cross sections and rate constants with a real wave packet and quasiclassical trajectory methods*  
25<sup>th</sup> International Physical Congress. Turkish Physical Society  
Bodrum, Turquía, 25-29 Agosto 2008  
Clave: *poster*
- 161.- J. Durá, R. de Nalda, J. G. Izquierdo, A. García-Vela, G. A. Amaral, L. Bañares  
*Unravelling the real-time photodissociation dynamics of CH<sub>3</sub>I by femtosecond ion imaging*  
9<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics- IBER2008  
Capuchos, Portugal, 7-9 Septiembre 2008  
Clave: *presentación oral*
- 162.- M. Sanz, M. Walczak, R. de Nalda, J. Rodríguez, J. G. Izquierdo, L. Bañares, J. F. Marco, M. Castillejo  
*Properties of TiO<sub>2</sub> nanostructures deposited by femtosecond laser*  
9<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics- IBER2008  
Capuchos, Portugal, 7-9 Septiembre 2008  
Clave: *poster*
- 163.- L. Bañares  
*Unravelling the real-time photodissociation dynamics of CH<sub>3</sub>I by femtosecond ion imaging*  
1<sup>st</sup> meeting of the COST Action CM0702. Chemistry with Ultrashort Pulse and Free-Electron Lasers: Looking for Control Strategies Through "Exact" Computations  
Burdeos, Francia, 16-17 Octubre 2008  
Clave: *conferencia invitada*
- 164.- R. de Nalda, J. Durá, J. G. Izquierdo, G. A. Amaral, L. Bañares  
*Imaging real time bond breaking in molecules and clusters*  
Ultrafast dynamic imaging of matter II (UDIM09)  
Ischia, Italia, 30 Abril-3 Mayo 2009  
Clave: *presentación oral*
- 165.- G. Gitzinger, M. E. Corrales, J. Durá, G. A. Amaral, R. de Nalda, L. Bañares  
*Femtosecond studies of the photodissociation of CH<sub>3</sub>I via the B band*  
Ultrafast dynamic imaging of matter II (UDIM09)  
Ischia, Italia, 30 Abril-3 Mayo 2009  
Clave: *poster*
- 166.- L. Bañares  
*Unraveling the photodissociation dynamics of molecules and clusters by ultrafast lasers and ion imaging techniques*  
XVI Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica  
Salta, Argentina, 18-21 Mayo 2009  
Clave: *conferencia plenaria*



- 167.- L. Bañares  
*Imaging photodissociation dynamics in molecules and clusters*  
*XXIII International Symposium on Molecular Beams*  
Dalian, China, 1-5 Junio 2009  
Clave: *conferencia invitada*
- 168.- A. García-Vela, L. Bañares  
*Wave packet calculations of the CH<sub>3</sub>I multisurface photodissociation dynamics in the A-band*  
*X International Workshop on Quantum Reactive Scattering*  
Dalian, China, 6-10 Junio 2009  
Clave: *conferencia invitada*
- 169.- N. Bulut, J. F. Castillo, L. Bañares, F. J. Aoiz  
*Reaction dynamics and kinetics of the ground and first excited state surface of the LiH<sub>2</sub><sup>+</sup> system*  
*X International Workshop on Quantum Reactive Scattering*  
Dalian, China, 6-10 Junio 2009  
Clave: *poster*
- 170.- N. Bulut, A. Zanchet, P. Honvault, B. Bussery-Honvault, L. Bañares  
*Time dependent wave packet and quasiclassical trajectory study of C(<sup>3</sup>P)+OH(X<sup>2</sup>P)@ CO(X<sup>1</sup>S<sup>+</sup>)+H(<sup>2</sup>S) reaction at the state to state level*  
*X International Workshop on Quantum Reactive Scattering*  
Dalian, China, 6-10 Junio 2009  
Clave: *poster*
- 171.- L. Bañares  
*Imaging the femtochemistry of molecules and clusters*  
*10<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2009)*  
Santiago de Compostela, España, 12-15 Julio 2009  
Clave: *conferencia invitada*
- 172.- J. F. Castillo, B. Martínez-Haya, F. J. Aoiz, L. Bañares  
*Ab initio potential energy surface and a quasiclassical trajectory study of the Cl+O<sub>3</sub> reaction*  
*10<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2009)*  
Santiago de Compostela, España, 12-15 Julio 2009  
Clave: *presentación oral*
- 173.- A. Arregui, L. Rubio-Lago, G. A. Amaral, L. Bañares  
*Roaming dynamics: formaldehyde, acetaldehyde and acetone*  
*10<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2009)*  
Santiago de Compostela, España, 12-15 Julio 2009  
Clave: *presentación oral*
- 174.- A. Arregui, L. Rubio-Lago, G. A. Amaral, L. Bañares  
*The radical channel in acetaldehyde photodissociation: sudden change in mechanism from 315 nm to 330 nm*  
*10<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2009)*  
Santiago de Compostela, España, 12-15 Julio 2009  
Clave: *poster*
- 175.- J. Rodríguez, L. Rubio-Lago, A. García-Vela, A. Arregui, G. A. Amaral, L. Bañares  
*Slice imaging of the photodissociation of CH<sub>3</sub>I in the A band: comparison between experiment and multisurface wave packet calculations*  
*10<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2009)*  
Santiago de Compostela, España, 12-15 Julio 2009  
Clave: *poster*
- 176.- M. E. Corrales, G. Gitzinger, J. Durá, G. A. Amaral, R. de Nalda, L. Bañares  
*Femtosecond studies of the photodissociation of CH<sub>3</sub>I via the B band*

- 10<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2009)  
Santiago de Compostela, España, 12-15 Julio 2009  
Clave: poster
- 177.- M. Sanz, J. G. Izquierdo, L. Bañares, M. Castillejo  
*Generation of CdS nanostructures by femtosecond pulsed laser deposition*  
10<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2009)  
Santiago de Compostela, España, 12-15 Julio 2009  
Clave: poster
- 178.- J. G. Izquierdo, M. P. Hernández-Garay, O. Martínez-Matos, J. A. Rodrigo, R. Weigand, M. L. Calvo, L. Bañares, P. Cheben  
*Optical study of holographic gratings in a photopolymerizable glass with femtosecond laser pulses*  
10<sup>th</sup> Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2009)  
Santiago de Compostela, España, 12-15 Julio 2009  
Clave: poster
- 179.- J. Durá, R. de Nalda, J. G. Izquierdo, G. A. Amaral, L. Bañares  
*Imaging the femtochemistry of CH<sub>3</sub>I*  
18<sup>th</sup> International Laser Physics Workshop (LPHYS09)  
Barcelona, España, 13-17 Julio 2009  
Clave: conferencia invitada
- 180.- J. Durá, R. de Nalda, J. G. Izquierdo, G. A. Amaral, L. Bañares  
*Imaging the femtosecond photochemistry of CH<sub>3</sub>I*  
XXIV International Conference in Photochemistry (ICP2009)  
Toledo, España, 19-24 Julio 2009  
Clave: conferencia invitada
- 181.- M. Sanz, M. Walczak, M. Oujja, R. de Nalda, J. G. Izquierdo, L. Bañares, M. Castillejo  
*Generation of TiO<sub>2</sub> nanostructures by pulsed laser deposition*  
XXIV International Conference in Photochemistry (ICP2009)  
Toledo, España, 19-24 Julio 2009  
Clave: poster
- 182.- G. A. Amaral, M. E. Corrales, J. Durá, G. Gitzinger, R. de Nalda, L. Bañares  
*Femtosecond studies of the photodissociation of CH<sub>3</sub>I via the B band*  
30<sup>th</sup> International Symposium on Free Radicals  
Savonlinna, Finlandia, 25-30 Julio 2009  
Clave: poster
- 183.- G. A. Amaral, A. Arregui, L. Rubio-Lago, L. Bañares  
*The radical channel in acetaldehyde photodissociation: sudden change in mechanism from 315 nm to 330 nm*  
30<sup>th</sup> International Symposium on Free Radicals  
Savonlinna, Finlandia, 25-30 Julio 2009  
Clave: poster
- 184.- L. Bañares  
*Real time bond breaking in molecules and clusters by femtosecond imaging*  
*Femtochemistry, Femtobiology and Femtophysics. Frontiers in Ultrafast Science and Technology (Femto9)*  
Pekin, China, 7-13 Agosto 2009  
Clave: conferencia invitada
- 185.- G. A. Amaral, A. Arregui, L. Rubio-Lago, L. Bañares  
*The radical channel in acetaldehyde photodissociation: sudden change in mechanism from 315 nm to 330 nm*  
238<sup>th</sup> American Chemical Society Meeting  
Washington D.C., EE. UU., 16-20 Agosto 2009  
Clave: poster

- 186.- M. P. Hernández-Garay, J. G. Izquierdo, O. Martínez-Matos, J. A. Rodrigo, R. Weigand, M. L. Calvo, L. Bañares, P. Cheben  
*Redes holográficas en vidrios fotopolimerizables aplicadas a la manipulación de haces láser pulsados ultracortos*  
*IX Reunión Nacional de Óptica*  
Ourense, España, 14-17 Septiembre 2009  
Clave: poster
- 187.- J. G. Izquierdo, M. P. Hernandez-Garay, O. Martinez-Matos, J. A. Rodrigo, R. Weigand, M. L. Calvo, L. Bañares, P. Cheben  
*Characterization of Holographic Gratings Implemented in a Photopolymerizable Glass with Femtosecond Laser Pulses*  
*IX Congreso Nacional de Fotoquímica*  
Leioa, España, 21-23 Septiembre 2009  
Clave: poster
- 188.- M. Sanz, J. G. Izquierdo, L. Bañares, M. Castillejo  
*Femtosecond Pulsed Laser Deposition of CdS Nanostructures*  
*IX Congreso Nacional de Fotoquímica*  
Leioa, España, 21-23 Septiembre 2009  
Clave: poster
- 189.- M. P. Hernandez-Garay, J. G. Izquierdo, O. Martinez-Matos, M. L. Calvo, R. Weigand, J. A. Rodrigo, L. Bañares, P. Cheben  
*Complex Field Analysis of Femtosecond Laser Pulses Diffracted by Volume Holographic Gratings*  
*Emerging Trends & Novel Materials in Photonics*  
Delphi, Grecia, 7-9 Octubre 2009  
Clave: contribución oral
- 190.- M. Sanz, J. G. Izquierdo, L. Bañares, M. Castillejo  
*Femtosecond Pulsed Laser Deposition of CdS Nanostructured*  
*10<sup>th</sup> International Conference on Laser Ablation (COLA2009)*  
Singapur, 22-27 Noviembre 2009  
Clave: poster
- 191.- L. Bañares  
*Imaging the femtochemistry of molecules and clusters*  
*6<sup>th</sup> International Meeting on Photodynamics*  
La Habana, Cuba, 1-5 Febrero 2010  
Clave: conferencia invitada
- 192.- L. Bañares  
*Multisurface dynamics in the photodissociation of CH<sub>3</sub>I by nanosecond and femtosecond ion imaging and wave packets calculations*  
*2010 Mesilla Chemistry Workshop "Electronic Nonadiabatic Dynamics"*  
Mesilla, NM, EE. UU., 7-10 Febrero 2010  
Clave: conferencia invitada
- 193.- L. Bañares  
*Imaging the femtochemistry of molecules and clusters*  
*Cairo University International Conference in Chemistry (Chem.06)*  
El Cairo, Egipto, 1-4 Marzo 2010  
Clave: conferencia plenaria
- 194.- L. Rubio-Lago, J. Rodríguez, M. González, G. A. Amaral, L. Bañares  
*Study of the photodissociation dynamics of pyrrole ammonia clusters by velocity map imaging*  
*10<sup>th</sup> European Conference on Atoms, Molecules and Photons. ECAMP10*  
Salamanca, España, 4-9 Julio 2010

Clave: poster

- 195.- G. A. Amaral, A. Arregui, L. Rubio-Lago, J. Rodríguez, L. Bañares  
*The molecular channel in the photodissociation of acetaldehyde: the importance of the roaming mechanism*  
10<sup>th</sup> European Conference on Atoms, Molecules and Photons. ECAMP10  
Salamanca, España, 4-9 Julio 2010  
Clave: poster
- 196.- J. Rodríguez-Díaz, A. Arregui, L. Rubio-Lago, G. A. Amaral, L. Bañares  
*The radical channel in acetaldehyde photodissociation: simultaneous pathways on S<sub>0</sub> and T<sub>1</sub> states*  
10<sup>th</sup> European Conference on Atoms, Molecules and Photons. ECAMP10  
Salamanca, España, 4-9 Julio 2010  
Clave: poster
- 197.- M. González, L. Rubio-Lago, J. Rodríguez, A. García-Vela, A. Arregui, G. A. Amaral, L. Bañares  
*The photodissociation of CH<sub>3</sub>I in the edges of the A-band: comparison between slice imaging experiments and multisurface wave packet calculations*  
10<sup>th</sup> European Conference on Atoms, Molecules and Photons. ECAMP10  
Salamanca, España, 4-9 Julio 2010  
Clave: poster
- 198.- J. Durá, R. de Nalda, A. García-Vela, L. Bañares  
*Femtosecond velocity map imaging experiments and wave packet calculations of CH<sub>3</sub>I photodissociation in the A-band*  
10<sup>th</sup> European Conference on Atoms, Molecules and Photons. ECAMP10  
Salamanca, España, 4-9 Julio 2010  
Clave: poster
- 199.- G. Gitzinger, M. E. Corrales, V. Lorient, G. A. Amaral, R. de Nalda, L. Bañares  
*Femtosecond studies on electronic predissociation of CH<sub>3</sub>I via the B-band*  
10<sup>th</sup> European Conference on Atoms, Molecules and Photons. ECAMP10  
Salamanca, España, 4-9 Julio 2010  
Clave: poster
- 200.- M. E. Corrales, G. Gitzinger, F. Hummel, R. de Nalda, L. Bañares  
*Femtosecond photodissociation dynamics of alkyl iodides in the A-band*  
10<sup>th</sup> European Conference on Atoms, Molecules and Photons. ECAMP10  
Salamanca, España, 4-9 Julio 2010  
Clave: poster
- 201.- V. Lorient, O. Mendoza-Yero, G. Mínguez-Vega, E. Tajahuerce, L. Bañares, R. de Nalda,  
*Sub-probe-pulse-duration characterization of quasi-direct space-to-time shaped laser pulses*  
10<sup>th</sup> European Conference on Atoms, Molecules and Photons. ECAMP10  
Salamanca, España, 4-9 Julio 2010  
Clave: poster
- 202.- M. P. Hernández-Garay, O. Martínez-Matos, J. G. Izquierdo, M. L. Calvo, P. Vaveliuk, J. A. Rodrigo, P. Cheben, L. Bañares  
*Femtosecond laser pulses manipulation with holographic gratings implemented in a photopolymerizable glass*  
10<sup>th</sup> European Conference on Atoms, Molecules and Photons. ECAMP10  
Salamanca, España, 4-9 Julio 2010  
Clave: poster
- 203.- L. Bañares  
*Light in femtoseconds: the making of molecular movies with ultrashort lasers*  
European Optics Society Annual Meeting 2010. EOSAM 2010  
París, Francia, 26-29 Octubre 2010  
Clave: conferencia invitada

- 204.- V. Lorient, O. Mendoza-Yero, G. Mínguez-Vega, E. Tajahuerce, L. Bañares, R. de Nalda,  
*Spatiotemporal characterization of the waveforms generated by the quasi-direct space-to-time pulse shaper*  
*European Optics Society Annual Meeting 2010. EOSAM 2010*  
París, Francia, 26-29 Octubre 2010  
Clave: *poster*
- 205.- J. D. Rodríguez, L. Rubio-Lago, G. A. Amaral, A. N. Oldani, M. G. González, G. A. Pino and L. Bañares  
*Photodissociation of pyrrole-ammonia clusters by velocity map imaging: mechanism for the H-atom transfer reaction*  
*III Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular. J2IFAM 2011*  
Santiago de Compostela, España, 3-4 Febrero 2011  
Clave: *presentación oral*
- 206.- M. González, L. Rubio-Lago, J. D. Rodríguez, A. García-Vela, G. A. Amaral, L. Bañares  
*The photodissociation of CH<sub>3</sub>I in the blue edge of the A-band*  
*III Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular. J2IFAM 2011*  
Santiago de Compostela, España, 3-4 Febrero 2011  
Clave: *presentación oral*
- 207.- M. E. Corrales, G. Gitzinger, V. Lorient, R. de Nalda, L. Bañares  
*A femtosecond velocity map imaging study on B-band predissociation in CH<sub>3</sub>I*  
*III Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular. J2IFAM 2011*  
Santiago de Compostela, España, 3-4 Febrero 2011  
Clave: *presentación oral*
- 208.- V. Lorient, O. Mendoza-Yero, G. Mínguez-Vega, L. Bañares and R. de Nalda  
*Post-pulse molecular alignment optimized by quasi-direct-space-to-time pulse shaping*  
*III Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular. J2IFAM 2011*  
Santiago de Compostela, España, 3-4 Febrero 2011  
Clave: *presentación oral*
- 209.- L. Bañares  
*Ion imaging-mass spectrometry: a powerful tool for reaction dynamics studies*  
*V Reunión de la Sociedad Española de Espectrometría de Masas. V RSEEM*  
Málaga, España, 11-14 April 2011  
Clave: *conferencia invitada*
- 210.- L. Bañares  
*Imaging in femtoseconds: the making of molecular movies with ultrashort lasers and ion imaging techniques*  
*Advances in Applied Physics and Material Sciences Congress. APMAS2011*  
Antalya, Turkey, 12-15 May 2011  
Clave: *conferencia invitada*
- 211.- L. Rubio-Lago, G. A. Amaral, A. N. Oldani, J. D. Rodríguez, M. G. González, G. A. Pino, L. Bañares  
*Photodissociation of pyrrole-ammonia clusters by velocity map imaging: mechanism for the H-atom transfer reaction*  
*XXIVth International Symposium on Molecular Beams. ISMB XXIV*  
Burdeos, Francia, 23-26 Mayo 2011  
Clave: *presentación oral*
- 212.- L. Rubio-Lago, J. González-Vázquez, G. A. Amaral, A. Arregui, J. D. Rodríguez, M. G. González, L. Bañares  
*Imaging the molecular channel in acetaldehyde photodissociation: Roaming and TS mechanisms*  
*XXIVth International Symposium on Molecular Beams. ISMB XXIV*  
Burdeos, Francia, 23-26 Mayo 2011  
Clave: *poster*
- 213.- J. G. Izquierdo, M. P. Hernández-Garay, V. Lorient, O. Martínez-Matos, J. A. Rodrigo, M. L. Calvo, P. Vaveliuk, L.

- Bañares, P. Cheben  
*Spatial and temporal manipulation of femtosecond laser pulses with holographic gratings*  
11<sup>th</sup> Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics. IBER2011  
Coimbra, Portugal, 19-22 Junio 2011  
Clave: poster
- 214.- R. Weigand, L. Bañares, H. Crespo  
*Generation of deep ultraviolet femtosecond pulses by highly non-degenerate four-wave mixing in a thin slide of LiF*  
11<sup>th</sup> Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics. IBER2011  
Coimbra, Portugal, 19-22 Junio 2011  
Clave: poster
- 215.- G. Gitzinger, M. E. Corrales, V. Lorient, R. de Nalda, L. Bañares  
*Full study of the predissociation of CH<sub>3</sub>I in the B-band by time resolved velocity map imaging*  
11<sup>th</sup> Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics. IBER2011  
Coimbra, Portugal, 19-22 Junio 2011  
Clave: poster
- 216.- A. García-Vela, R. de Nalda, J. Durá, J. González-Vázquez, L. Bañares  
*A 4D wave packet study of the CH<sub>3</sub>I photodissociation in the A band. Comparison with femtosecond velocity map imaging experiments*  
11<sup>th</sup> Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics. IBER2011  
Coimbra, Portugal, 19-22 Junio 2011  
Clave: poster
- 217.- M. E. Corrales, G. Gitzinger, V. Lorient, R. de Nalda, L. Bañares, A. H. Zewail  
*Radical effects on the femtodynamics of several alkyl iodides*  
11<sup>th</sup> Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics. IBER2011  
Coimbra, Portugal, 19-22 Junio 2011  
Clave: poster
- 218.- A. García-Vela, R. de Nalda, J. Durá, J. González-Vázquez, L. Bañares  
*A 4D wave packet study of the CH<sub>3</sub>I photodissociation in the A band. Comparison with femtosecond velocity map imaging experiments*  
FEMTO10. The Madrid Conference on Femtochemistry  
Madrid, España, 10-15 Julio 2011  
Clave: poster
- 219.- G. Gitzinger, M. E. Corrales, V. Lorient, R. de Nalda, L. Bañares  
*Predissociation of CH<sub>3</sub>I via the B-band: dependence of the characteristics of the dissociation on the excitation wavelength*  
FEMTO10. The Madrid Conference on Femtochemistry  
Madrid, España, 10-15 Julio 2011  
Clave: poster
- 220.- J. González-Vázquez, A. García-Vela, R. de Nalda, L. Bañares  
*Predissociation in methyl iodide. An efficient test for MRCI/CASSCF methodology including non-adiabatic coupling*  
FEMTO10. The Madrid Conference on Femtochemistry  
Madrid, España, 10-15 Julio 2011  
Clave: poster
- 221.- L. Rubio-Lago, G. Gitzinger, M. E. Corrales, V. Lorient, J. González-Vázquez, A. García-Vela, P. S. Shternin, O. S. Vasutinskii, R. de Nalda, L. Bañares  
*Time-resolved alignment effects in CH<sub>3</sub>I predissociation*  
FEMTO10. The Madrid Conference on Femtochemistry  
Madrid, España, 10-15 Julio 2011  
Clave: poster

- 222.- V. Lorient, M. E. Corrales, G. Gitzinger, R. de Nalda, L. Bañares  
*Femtosecond clocking of photodissociation reactions by universal fragment non-resonant multiphoton ionization in velocity map imaging experiments*  
FEMTO10. The Madrid Conference on Femtochemistry  
Madrid, España, 10-15 Julio 2011  
Clave: poster
- 223.- A. García-Vela, L. Bañares  
*Wave packet calculations on the effect of the femtosecond pulse width in the time-resolved photodissociation of CH<sub>3</sub>I in the A band*  
FEMTO10. The Madrid Conference on Femtochemistry  
Madrid, España, 10-15 Julio 2011  
Clave: poster
- 224.- V. Lorient, L. Bañares, R. de Nalda  
*Control of post-pulse molecular alignment by shaped ultrashort laser pulses*  
FEMTO10. The Madrid Conference on Femtochemistry  
Madrid, España, 10-15 Julio 2011  
Clave: poster
- 225.- M. E. Corrales, G. Gitzinger, V. Lorient, R. de Nalda, L. Bañares, A. H. Zewail  
*Radical effects on the femtodynamics of several alkyl iodides*  
FEMTO10. The Madrid Conference on Femtochemistry  
Madrid, España, 10-15 Julio 2011  
Clave: poster
- 226.- M. E. Corrales, G. Gitzinger, J. González-Vázquez, V. Lorient, R. de Nalda, L. Bañares  
*A velocity map imaging and theoretical study of the femtosecond Coulomb explosion of CH<sub>3</sub>I*  
FEMTO10. The Madrid Conference on Femtochemistry  
Madrid, España, 10-15 Julio 2011  
Clave: poster
- 227.- J. G. Izquierdo, M. P. Hernández-Garay, O. Martínez-Matos, M. L. Calvo, P. Vaveliuk, P. Cheben, L. Bañares  
*Femtosecond laser pulses diffracted by photopolymerizable glass holographic gratings: a characterization*  
FEMTO10. The Madrid Conference on Femtochemistry  
Madrid, España, 10-15 Julio 2011  
Clave: poster
- 228.- J. G. Izquierdo, O. Martínez-Matos, J. A. Rodrigo, M. P. Hernández-Garay, R. Weigand, M. L. Calvo, P. Cheben, P. Vaveliuk, L. Bañares  
*Femtosecond paraxial beams generation with arbitrary spatial distribution*  
FEMTO10. The Madrid Conference on Femtochemistry  
Madrid, España, 10-15 Julio 2011  
Clave: poster
- 229.- V. Lorient, R. de Nalda, O. Mendoza-Yero, G. Mínguez-Vega, L. Bañares  
*Cross-correlation with spatial resolution of a quasi-direct space-to-time (QDST) pulse shaper in the far field*  
Proceedings Information Optics (WIO), 2011 10<sup>th</sup> Euro-American Workshop  
IEEE Digital Library, p. 1-3 (2011)  
DOI: 10.1109/WIO.2011.5981471
- 230.- M. Sanz, M. E. López-Arias, R. de Nalda, B. Martínez-Haya, J. G. Izquierdo, L. Bañares, M. Castillejo  
*Femtosecond Pulsed Laser Deposition of Wide Bandgap Semiconductors: Wavelength effects and applications in mass spectrometric analysis*  
11th International Conference on Laser Ablation. COLA2011  
Playa del Carmen, México, 13-19 Noviembre 2011  
Clave: poster

- 231.- L. Bañares  
*The UV photodissociation dynamics of CH<sub>3</sub>I: new insights into an old story*  
4<sup>th</sup> Annual Meeting of the COST Action CUSPFEL  
Cluj-Napoca, Rumanía, 21-23 Marzo 2012  
Clave: conferencia invitada
- 232.- L. Bañares  
*Radiación en la escala de femtosegundos: haciendo películas moleculares con pulsos láser ultracortos*  
Simposio Internacional "La Química de nuestro tiempo". Fundación Ramón Areces.  
Madrid, 7-8 Junio 2012  
Clave: conferencia invitada
- 233.- M. E. Corrales, G. Balerdi, V. Lorient, L. Bañares, R. de Nalda  
*Towards control of predissociation dynamics by strong ultrashort laser pulses*  
*Ultrafast Phenomena 2012*  
Lausanne, Suiza, 9-13 Julio 2012  
Clave: poster
- 234.- L. Rubio-Lago, J. D. Rodríguez, M. G. González, L. Bañares  
*Stereodynamics to disentangle photodissociation mechanisms: The nitromethane and methy iodide cases*  
*XIV Stereodynamics Conference*  
París, Francia, 22-26 Octubre 2012  
Clave: conferencia invitada
- 235.- L. Bañares  
*Strong field control of photodissociation dynamics*  
*2013 Mesilla Chemistry Workshop: Dynamics for chemical reaction pathways. Role of non-statistical effects*  
Mesilla (Las Cruces, Nuevo Mexico), EE.UU., 9-12 Febrero 2013  
Clave: conferencia invitada
- 236.- M. E. Corrales, G. Balerdi, V. Lorient, R. de Nalda, L. Bañares  
*Strong field control of predissociation dynamics*  
*Faraday Discussion 163. Photon-initiated quantum molecular dynamics*  
Nottingham, Reino Unido, 15-17 Abril 2013  
Clave: conferencia invitada
- 237.- M. E. Corrales, G. Balerdi, V. Lorient, R. de Nalda, L. Bañares  
*Strong laser field control of photodissociation dynamics*  
*XXV International Symposium on Molecular Beams. ISMB 2013*  
Praga, República Checa, 9-14 Junio 2013  
Clave: conferencia invitada
- 238.- L. Bañares  
*Overview on Reaction Dynamics*  
*FEMTO11: The Copenhagen Conference on Femtochemistry*  
Copenague, Dinamarca, 8-12 Julio 2013  
Clave: conferencia invitada
- 239.- G. Balerdi, M. E. Corrales, V. Lorient, R. de Nalda, L. Bañares  
*Strong field control of CH<sub>3</sub>I photodissociation dynamics*  
*XII Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics. IBER 2013*  
Sevilla, España, 9-11 Septiembre 2013  
Clave: contribución oral
- 240.- O. Peña-Rodríguez, J. G. Izquierdo, A. Rivera, J. M. Perlado, L. Bañares  
*Tailoring the optical properties of plasmonic nanoparticles by means of swift heavy ions*  
*XII Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics. IBER 2013*  
Sevilla, España, 9-11 Septiembre 2013



Clave: *poster*

- 241.- J. D. Rodríguez, M. G. González, L. Rubio-Lago, L. Bañares  
*Photodissociation dynamics of NH<sub>3</sub> and (NH<sub>3</sub>)<sub>n</sub> clusters by velocity map imaging*  
*XII Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics. IBER 2013*  
Sevilla, España, 9-11 Septiembre 2013  
Clave: *poster*
- 242.- M. G. González, J. D. Rodríguez, L. Rubio-Lago, L. Bañares  
*Stereodynamics of the photodissociation of nitromethane at 193 nm: Unravelling the dissociation mechanism*  
*XII Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics. IBER 2013*  
Sevilla, España, 9-11 Septiembre 2013  
Clave: *poster*
- 243.- M. E. Corrales, V. Lorient, G. Balerdi, J. González-Vázquez, R. de Nalda, L. Bañares, A. H. Zewail  
*New insights into the structural dynamics control of chemical reactivity*  
*XII Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics. IBER 2013*  
Sevilla, España, 9-11 Septiembre 2013  
Clave: *poster*
- 244.- O. Mendoza-Yero, V. Lorient, J. Pérez-Vizcaíno, G. Mínguez-Vega, R. de Nalda, L. Bañares and J. Lancis  
*Programmable focal point pulse shaper*  
*European Congress and Exhibition on Advance Materials and Processes. EUROMAT2013*  
Sevilla, España, 8-13 Septiembre 2013  
Clave: *poster*
- 245.- M. E. Corrales, G. Balerdi, V. Lorient, R. de Nalda, L. Bañares  
*Strong laser field strategies to control photodissociation dynamics*  
*Frontiers in Optics 2013/Laser Science XXIX. OSA's 97<sup>th</sup> Annual Meeting and APS/DLS 29<sup>th</sup> Annual Meeting*  
Orlando, EE. UU., 6-10 October 2013  
Clave: *conferencia invitada*
- 246.- I. López-Quintas, V. Lorient, D. Ávila-Brandé, J. G. Izquierdo, L. Bañares, M. Castillejo, R. de Nalda, M. Martín  
*Influence of the laser-target interaction dynamics on the characteristics of Co/Zn/S nanostructures obtained by two-pulse femtosecond laser ablation and deposition*  
*12<sup>th</sup> International Conference on Laser Ablation (COLA 2013)*  
Ischia, Italia, 6-11 October 2013  
Clave: *comunicación oral*
- 247.- G. Balerdi, J. Woodhouse, R. de Nalda, L. Bañares  
*Predissociation dynamics of the CH<sub>3</sub> radical: vibrational state dependence of the 3p<sub>z</sub> Rydberg state lifetime*  
*VI Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular. J2IFAM 2014*  
Bilbao, España, 22-24 Enero 2014  
Clave: *presentación oral*
- 248.- M. G. González, J. D. Rodríguez, L. Rubio-Lago, L. Bañares  
*Imaging the stereodynamics of methyl iodide photodissociation in the second absorption band: fragment polarization and the interplay between direct and pre dissociation*  
*XXV Stereodynamics Conference*  
San Petersburgo, Rusia, 18-22 Agosto 2014  
Clave: *conferencia invitada*
- 249.- L. Bañares  
*Femtosecond laser pulsed deposition for the fabrication of nanostructured materials with technological applications*  
*1<sup>st</sup> International Conference of Nanoscience and Nanotechnology for the Next Generation - NanoNG14*  
Elazig, Turquía, 20-22 Agosto 2014  
Clave: *conferencia plenaria*

- 250.- L. Bañares  
*Strong-Laser-field control of ultrafast photochemistry*  
*8<sup>th</sup> International Meeting on Photodynamics and Related Aspects*  
 Oaxaca, México, 26-31 Octubre 2014  
 Clave: *conferencia invitada*
- 251.- L. Bañares  
*Strong-Laser-field control of ultrafast photochemistry*  
*Anharmonicity in medium-size molecules and clusters. AMOC2015*  
 Madrid, España, 26-30 Abril 2015  
 Clave: *conferencia invitada*
- 252.- J. Woodhouse, G. Balerdi, R. de Nalda, A. Zanchet, M. L. Senent, A. García Vela, L. Bañares  
*Predissociation dynamics of the methyl radical from the 3p<sub>z</sub> Rydberg state*  
*Anharmonicity in medium-size molecules and clusters. AMOC2015*  
 Madrid, España, 26-30 Abril 2015  
 Clave: *poster*
- 253.- M. Oujja, J. G. Izquierdo, L. Bañares, M. Castillejo, R. de Nalda  
*Low-order harmonic generation in fs-ablation plasmas of metals*  
*European Materials Research Society, E-MRS 2015 Spring Meeting*  
 Lille, Francia, 11-15 Mayo 2015  
 Clave: *comunicación oral*
- 254.- M. E. Corrales, J. González-Vázquez, G. Balerdi, I. R. Solá, R. de Nalda, L. Bañares  
*Ultrafast molecular photodissociation in laser-induced potentials*  
*XXVI International Symposium on Molecular Beams. ISMB2015*  
 Segovia, España, 28 Junio-3 Julio 2015  
 Clave: *poster*
- 255.- G. Balerdi, J. Woodhouse, R. de Nalda, M. L. Senent, A. García Vela, L. Bañares  
*Imaging the predissociation dynamics of the 3p<sub>z</sub> Rydberg state of the methyl radical*  
*XXVI International Symposium on Molecular Beams. ISMB2015*  
 Segovia, España, 28 Junio-3 Julio 2015  
 Clave: *poster*
- 256.- S. Marggi Poullain, M. G. González, L. Rubio-Lago, L. Bañares, P. Samartzis, T. N. Kitsopoulos  
*New insights in the photodissociation of methyl iodide at 193 nm: Stereodynamics and product branching ratios*  
*XXVI International Symposium on Molecular Beams. ISMB2015*  
 Segovia, España, 28 Junio-3 Julio 2015  
 Clave: *poster*
- 257.- M. E. Corrales, J. González-Vázquez, G. Balerdi, I. R. Solá, R. de Nalda, L. Bañares  
*Control of ultrafast molecular photodissociation in laser-induced potentials*  
*FEMTO12. The Hamburg conference on Femtochemistry*  
 Hamburgo, Alemania, 12-17 Julio 2015  
 Clave: *poster*
- 258.- M. E. Corrales, J. González-Vázquez, G. Balerdi, I. R. Solá, R. de Nalda, L. Bañares  
*Control of ultrafast molecular photodissociation in laser-induced potentials*  
*XXIX International conference on photonic, electronic and atomic collisions (ICPEAC2015)*  
 Toledo, España, 22-28 Julio 2015  
 Clave: *conferencia invitada*
- 259.- R. de Nalda, G. Balerdi, J. Woodhouse, M. L. Senent, A. García-Vela, L. Bañares  
*Imaging the predissociation dynamics of the methyl radical from the 3p<sub>z</sub> Rydberg state*  
*XXIX International conference on photonic, electronic and atomic collisions (ICPEAC2015)*  
 Toledo, España, 22-28 Julio 2015

Clave: poster

- 260.- M. E. Corrales, J. González-Vázquez, G. Balerdi, I. R. Solá, R. de Nalda, L. Bañares  
*Control of ultrafast molecular photodissociation in laser-induced potentials*  
*XIII Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2015)*  
Aveiro, Portugal, 6-9 Septiembre 2015  
Clave: conferencia invitada
- 261.- I. López-Quintas, E. Rebollar, D. Avila-Brandé, V. Lorient, J. G. Izquierdo, L. Bañares, M. Castillejo, R. de Nalda, M. Martín  
*Double pulse femtosecond laser ablation of Co/ZnS*  
*XIII Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2015)*  
Aveiro, Portugal, 6-9 Septiembre 2015  
Clave: poster
- 262.- M. Oujja, J. G. Izquierdo, L. Bañares, M. Castillejo, R. de Nalda  
*Third harmonic generation in fs-ablation plasmas of metals*  
*XIII Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2015)*  
Aveiro, Portugal, 6-9 Septiembre 2015  
Clave: poster
- 263.- G. Balerdi, J. Woodhouse, R. de Nalda, M. L. Senent, A. Zanchet, A. García Vela, L. Bañares  
*Predissociation dynamics of the methyl radical measured in real time with velocity map ion imaging*  
*XIII Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2015)*  
Aveiro, Portugal, 6-9 Septiembre 2015  
Clave: poster
- 264.- M. E. Corrales, J. González-Vázquez, G. Balerdi, I. R. Solá, R. de Nalda, L. Bañares  
*Control of ultrafast molecular photodissociation in laser-induced potentials*  
*3<sup>rd</sup> General Meeting XLIC (COST)*  
Debrecen, Hungría, 1-4 Noviembre 2015  
Clave: conferencia invitada
- 265.- M. E. Corrales, J. González-Vázquez, G. Balerdi, I. R. Solá, R. de Nalda, L. Bañares  
*Controlling bond breaking with intense laser fields*  
*1<sup>st</sup> Ultrafast Science and Technology Spain (USTS2015)*  
Madrid, España, 24-25 Noviembre 2015  
Clave: poster
- 266.- M. E. Corrales, G. Gitzinger, J. González-Vázquez, V. Lorient, R. de Nalda, L. Bañares  
*A velocity map imaging and theoretical study of the femtosecond Coulomb explosion of CH<sub>3</sub>I*  
*1<sup>st</sup> Ultrafast Science and Technology Spain (USTS2015)*  
Madrid, España, 24-25 Noviembre 2015  
Clave: presentación oral
- 267.- A. Zanchet, R. de Nalda, M. L. Senent, A. García-Vela, L. Bañares  
*Theoretical study of the photodissociation of the methyl radical*  
*1<sup>st</sup> Ultrafast Science and Technology Spain (USTS2015)*  
Madrid, España, 24-25 Noviembre 2015  
Clave: poster
- 268.- I. López-Quintas, E. Rebollar, D. Avila-Brandé, J. G. Izquierdo, L. Bañares, M. Castillejo, R. de Nalda, M. Martín  
*Deposition of Co/Zn/S nanoparticles via two-pulse femtosecond laser ablation*  
*1<sup>st</sup> Ultrafast Science and Technology Spain (USTS2015)*  
Madrid, España, 24-25 Noviembre 2015  
Clave: poster
- 269.- M. Oujja, M. Sanz, R. de Nalda, J. F. Marco, J. G. Izquierdo, L. Bañares, M. Castillejo

- Growth and characterization of semiconductor nanostructures by femtosecond laser ablation*  
 1<sup>st</sup> Ultrafast Science and Technology Spain (USTS2015)  
 Madrid, España, 24-25 Noviembre 2015  
 Clave: poster
- 270.- I. López-Quintas, V. Loriot, J. G. Izquierdo, E. Rebollar, L. Bañares, M. Castillejo, R. de Nalda, M. Martín  
*Ablation dynamics of Co/ZnS targets under two-pulse femtosecond laser irradiation*  
 1<sup>st</sup> Ultrafast Science and Technology Spain (USTS2015)  
 Madrid, España, 24-25 Noviembre 2015  
 Clave: poster
- 271.- L. Bañares  
*Imaging the photodissociation dynamics of the methyl radical from the 3s and 3p<sub>z</sub> Rydberg states*  
 CECAM. Theoretical and Computational Studies of Non-equilibrium and Non-statistical Dynamics in Gas Phase, Condense Phase and Interfacial Reactions  
 París, Francia, 11-13 Abril 2016  
 Clave: conferencia invitada
- 272.- L. Bañares  
*Imaging the photodissociation dynamics of the methyl radical from the 3s and 3p<sub>z</sub> Rydberg states*  
 9<sup>th</sup> International Meeting on Photodynamics and Related Aspects  
 Mendoza, Argentina, 9-13 Mayo 2016  
 Clave: conferencia invitada
- 273.- O. S. Vasyutinskii, P. S. Shternin, M. E. Corrales, L. Rubio-Lago, R. De Nalda, L. Bañares  
*Femtosecond time-resolved photofragment angular distributions: experiment and theory*  
 9<sup>th</sup> International Meeting on Photodynamics and Related Aspects  
 Mendoza, Argentina, 9-13 Mayo 2016  
 Clave: conferencia invitada
- 274.- L. Bañares  
*A velocity map and slice imaging study of the photodissociation of the methyl radical from the 3s and 3p<sub>z</sub> Rydberg states*  
 Advanced Particle Imaging Techniques: 1986-2016 and beyond  
 Telluride, EE. UU., 8-12 Agosto 2016  
 Clave: conferencia invitada
- 275.- L. Bañares  
*Imaging the photodissociation dynamics of the methyl radical from the 3p<sub>z</sub> Rydberg state*  
 V<sup>th</sup> Spanish-Portuguese Conference on Photochemistry  
 Toledo, España, 8-10 Septiembre 2016  
 Clave: conferencia invitada
- 276.- G. Balerdi, R. de Nalda, L. Bañares  
*Dynamic Stark control of ammonia photodissociation with strong femtosecond laser pulses*  
 XXI European Conference on the Dynamics of Molecular Systems. MOLEC2016  
 Toledo, España, 11-16 Septiembre 2016  
 Clave: poster
- 277.- D. V. Chicharro, S. Marggi Poullain, L. Rubio-Labo, A. García-Vela, L. Bañares  
*A velocity-map imaging study of the non-resonant multiphoton ionization detection of methyl photofragments from the photodissociation of CH<sub>3</sub>I in the A-band*  
 XXI European Conference on the Dynamics of Molecular Systems. MOLEC2016  
 Toledo, España, 11-16 Septiembre 2016  
 Clave: poster
- 278.- D. V. Chicharro, S. Marggi Poullain, E. Navarro, L. Rubio-Labo, L. Bañares  
*A velocity map imaging study of the CH<sub>2</sub>BrI photodissociation dynamics in the first and second absorption bands*

XXI European Conference on the Dynamics of Molecular Systems. MOLEC2016

Toledo, España, 11-16 Septiembre 2016

Clave: *poster*

- 279.- M. Murillo, S. Marggi Poullain, G. Barlerdi, L. Bañares  
*Femtosecond velocity-map imaging study of the photodissociation dynamics of CH<sub>2</sub>ClI and CH<sub>2</sub>BrI in the first absorption band*  
XXI European Conference on the Dynamics of Molecular Systems. MOLEC2016  
Toledo, España, 11-16 Septiembre 2016  
Clave: *poster*
- 280.- A. Bouallagui, A. Zanchet, N. Jaidane, O. Yazidi, M. L. Senent, L. Bañares, A. García-Vela  
*Ab initio study on the photodissociation of CH<sub>3</sub>O and CH<sub>3</sub>S radicals: The effect of spin-orbit coupling*  
XXI European Conference on the Dynamics of Molecular Systems. MOLEC2016  
Toledo, España, 11-16 Septiembre 2016  
Clave: *poster*
- 281.- A. Bouallagui, A. Zanchet, N. Jaidane, M. L. Senent, L. Bañares, A. García-Vela  
*Theoretical study of the photodissociation of the ethyl radical from the 3s and 3p Rydberg states*  
XXI European Conference on the Dynamics of Molecular Systems. MOLEC2016  
Toledo, España, 11-16 Septiembre 2016  
Clave: *poster*
- 282.- J. G. Izquierdo, O. Peña-Rodríguez, P. Díaz-Núñez, A. Rivera, G. Balabanian, J. Olivares, J. M. Perlado, L. Bañares  
*Multilayer embedded silver nanoparticles generated by femtosecond pulsed laser deposition*  
XXI European Conference on the Dynamics of Molecular Systems. MOLEC2016  
Toledo, España, 11-16 Septiembre 2016  
Clave: *poster*
- 283.- J. G. Izquierdo, P. Díaz-Núñez, M. A. Arenas, A. Conde, J. J. de Damborenea, L. Bañares  
*Surface morphology modifications of titanium alloy (Ti-6AL-4V) induced by femtosecond laser pulses*  
XXI European Conference on the Dynamics of Molecular Systems. MOLEC2016  
Toledo, España, 11-16 Septiembre 2016  
Clave: *poster*
- 284.- M. E. Corrales, R. de Nalda, L. Bañares  
*Strong laser field control of photodissociation stereodynamics*  
*Stereodynamics 2016*  
Taipei, Taiwan, 6-11 Noviembre 2016  
Clave: *conferencia plenaria*
- 285.- O. S. Vasyutinskii, P. S. Shternin, M. E. Corrales, L. Rubio-Lago, R. de Nalda, L. Bañares  
*Time-resolved vector correlations in molecular photolysis: predissociation and direct dissociation channels*  
*Stereodynamics 2016*  
Taipei, Taiwan, 6-11 Noviembre 2016  
Clave: *conferencia invitada*

## Tesis Doctorales dirigidas

---

Título: Fotodisociación molecular con pulsos láser de nanosegundos y femtosegundos y cartografía de velocidades con imágenes de iones

Doctorando: Jesús González Izquierdo  
Universidad: Complutense de Madrid  
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas  
Fecha: 19 de diciembre de 2007. Sobresaliente Cum Laude

---

Título: Fotodisociación en tiempo real de moléculas y agregados con pulsos láser de femtosegundos y técnicas de imágenes de iones

Doctorando: Judith Durá Díez  
Universidad: Complutense de Madrid  
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas  
Fecha: 28 de enero de 2010. Sobresaliente Cum Laude

---

Título: Fotodisociación molecular por tomografía de velocidades con imágenes de iones

Doctorando: Andrés Arregui Velázquez  
Universidad: Complutense de Madrid  
Facultad / Escuela: Química  
Fecha: 20 de octubre de 2011. Sobresaliente Cum Laude

---

Título: Dinámica de predisociación y control de la fotoionización de yoduro de metilo con pulsos láser de femtosegundos

Doctorando: Grégory Gitzinger  
Universidad: Complutense de Madrid  
Facultad / Escuela: Química  
Fecha: 7 de marzo de 2013. Sobresaliente Cum Laude

---

Título: Efectos estructurales y control láser de dinámicas moleculares ultrarrápidas

Doctorando: María Eugenia Corrales Castellanos  
Universidad: Complutense de Madrid  
Facultad / Escuela: Química  
Fecha: 22 enero 2016. Sobresaliente Cum Laude

---

---

**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: Comité Organizador

Entidad de la que depende: Universidad Complutense de Madrid

Tema: 1st International Exhibition and Congress on Laser and Electrooptics

Fecha: 17-19/09/1990

---

Título del Comité: Comité Científico

Entidad de la que depende: Real Sociedad Española de Física

Tema: Bienal del Centenario de las Reales Sociedades Españolas de Física y Química

Fecha: 7-11/07/2003

---

Título del Comité: Comité Científico

Entidad de la que depende: Universidad de Barcelona

Tema: Second European School on Computational Chemistry, Reaction and Molecular Dynamics

Fecha: 23-28/06/2003

---

Título del Comité: Comité Científico Internacional

Entidad de la que depende: International Symposium on Molecular Beams

Tema: International Symposium on Molecular Beams

Fecha: desde 1/2004

---

Título del Comité: Comité Científico Internacional

Entidad de la que depende: Femtochemistry Conference

Tema: Femtochemistry Conference

Fecha: desde 7/2011

---

---

**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: Femtoquímica y Fentobiología

Tipo de actividad: Curso de Verano UCM (Director)

Ambito: Internacional

Fecha: Julio 2000

---

Título: European Conference on Molecular Energy Transfer XVIII (COMET XVIII).

Tipo de actividad: Congreso Científico Internacinal (Chair)

Ambito: Internacional

Fecha: 15-20/06/2003

---

Título: 7<sup>th</sup> Workshop on Quantum Reactive Scattering

Tipo de actividad: Congreso Científico Internacinal (Chair)

Ambito: Internacional

Fecha: 20-23/06/2003

---

Título: Los láseres en el siglo XXI

Tipo de actividad: Curso de Verano UCM (Director)

Ambito: Internacional

Fecha: 30 Junio- 4Julio 2008

---

Título: Femto10. The Madrid Conference on Femtochemistry

Tipo de actividad: Congreso Científico Internacional (Chair)

Ambito: Internacional

Fecha: 10 Julio- 15 Julio 2011

---

Título: XXVI International Symposium on Molecular Beams. ISMB2015

Tipo de actividad: Congreso Científico Internacional (Chair)

Ambito: Internacional

Fecha: 28 Junio- 3 Julio 2015

---

**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: Sistema Láser de Femtosegundo

Tipo de actividad: Responsable del sistema láser de femtosegundo  
Fecha: 2002

---

Título: Ampliación de sistema láser de femtosegundo

Tipo de actividad: Responsable del sistema láser de femtosegundo  
Fecha: 2004

---

Título: Adquisición de un sistema láser de nanosegundos de estado sólido

Tipo de actividad: Responsable del sistema láser  
Fecha: 2007

---

Título: Renovación de un equipo de fluorescencia resuelta en tiempos en la escala de femtosegundos

Tipo de actividad: Responsable del equipo de fluorescencia resuelta en tiempos  
Fecha: 2013

---

---

**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

---

### Otros trabajos de Investigación dirigidos

#### Trabajo de Fin de Grado

- *Estudio de la dinámica de fotodisociación de yoduro de alilo ( $C_3H_5I$ ) en la zona azul y roja de la primera banda de absorción con tomografía de velocidades con imágenes de iones*. Presentado por Eduardo Navarro Manteca (17 Julio 2014). Calificación: Sobresaliente.
- *Estudio de la predisociación electrónica del radical metilo desde los estados Rydberg  $3p_z$  y  $4p_z$* . Presentado por Bernardo Mestres Maza (15 Septiembre 2015). Calificación: Notable (7,3).
- *Dinámica de fotodisociación del disulfuro de dimetilo ( $CH_3S_2CH_3$ ) a distintas longitudes de onda en el UV mediante tomografía de imágenes de iones*. Presentado por Francisco Javier Abellán García (15 Septiembre 2015). Calificación: Notable (8,2).
- *Dinámica de fotodisociación de yoduro de etilo por tomografía de velocidades con ionización multifotónica no resonante*. Presentado por Cristina Ordás González (28 Septiembre 2016). Calificación: Notable (8,5).

#### Tesis de Licenciatura

- *Cálculo por trayectorias cuasiclásicas de funciones de excitación y constantes cinéticas para la reacción  $D+H_2 \rightarrow HD+H$  en tres superficies de energía potencial ab initio*. Presentada por la licenciada Trinidad Díez Rojo (14 Julio 1995). Calificación: Sobresaliente.

#### Asignatura "Proyecto" (Licenciado en Química, UCM, Plan 1999)

- *Detección de hormonas sintéticas mediante ionización láser multifotónica*. Presentado por Jesús González Izquierdo (7 Junio 2002). Calificación: Matrícula de Honor.
- *Ionización por desorción láser (LDI y MALDI) con espectrometría de masas por tiempo de vuelo. Aplicación a la detección de diversos materiales*. Presentado por Javier Rodríguez Díaz (9 Junio 2008). Calificación: Sobresaliente.
- *Fotodisociación del yoduro de metilo en la banda B de absorción*. Presentado por Pablo Clemente Tablada (Septiembre 2011). Calificación: Aprobado.

#### Trabajos de Investigación para Diploma de Estudios Avanzados (DEA)

- *Análisis de hidrocarburos poliaromáticos y drogas estimulantes por cromatografía de gases con ionización láser multifotónica y espectrometría de masas por tiempo de vuelo (GC-MPI-TOFMS). Cálculos DFT de Potenciales de Ionización*. Presentado por Jesús González Izquierdo (30 Junio 2004). Calificación: Apto.
- *Transferencia intermolecular de energía en expansiones supersónicas de monóxido de carbono diluido en hidrógeno molecular*. Presentado por Judith Durá Díez (Mayo 2005). Calificación: Apto.
- *Ionización por desorción láser asistida por matriz (MALDI). Aplicación a la detección de polímeros de bajo peso molecular y de azafulerenos*. Presentado por Andrés Arregui Velazquez (26 Junio 2007). Calificación: Apto.
- *Fotoionización y fotofragmentación ultrarrápidas con pulsos láser de femtosegundos e imágenes de fotoelectrones*. Presentado por Grégory Gitzinger (1 Julio 2010). Calificación: Apto.
- *Explosión coulombiana en  $CH_3I$  con pulsos láser de femtosegundos e imágenes de iones*. Presentado por María Eugenia Corrales Castellanos (1 Julio 2010). Calificación: Apto.
- *Fotodisociación de yoduro de metilo con técnicas de imagen de alta resolución*. Presentado por Javier Rodríguez Díaz (1 Julio 2010). Calificación: Apto.

#### Trabajos de Investigación Fin de Máster

- *Estudio de la fotodisociación del  $CH_3I$  en la zona azul de la banda A con tomografía de imágenes de iones*. Máster Interuniversitario Láseres y Aplicaciones en Química (Quimiláser). Universidad Pablo de Olavide y Universidad Complutense de Madrid. Presentado por Marta González González (29 Noviembre 2010). Calificación: Apto. Tutores: Luis Rubio Lago y Luis Bañares Morcillo.
- *Fotodisociación en tiempo real de yoduro de tertbutilo y iodobenceno con pulsos láser de femtosegundos y técnicas de imágenes de iones*. Máster Interuniversitario Láseres y Aplicaciones en Química (Quimiláser). Universidad Pablo de Olavide y Universidad Complutense de Madrid. Presentado por Garikoitz Balerdi Villanueva (21 Julio 2011). Calificación: Apto. Tutor: Luis Bañares Morcillo.
- *Study of the photodissociation of molecules and clusters with ultrafast laser and imaging techniques and ab initio quantum chemistry calculations*. Máster Erasmus Mundus Advanced Spectroscopy in Chemistry. Universidad Complutense

de Madrid. Presentado por Dimitri Blanck (23 Julio 2012). Calificación: Apto. Tutores: Pedro Gómez Calzada y Luis Bañares Morcillo.

• *Predissociation dynamics of the methyl radical: Vibrational dependence of the 3p<sub>z</sub> Rydberg state lifetimes*. Máster en Química. Universidad de Durham (Reino Unido). Programa Erasmus con la Universidad Complutense de Madrid. Presentado por Joanne Woodhouse (Junio 2014). Calificación: Apto. Tutor: Luis Bañares Morcillo.

• *Estereodinámica de la reacción de fotodisociación del yoduro de metilo en la primera banda de absorción*. Máster en Ciencia y Tecnología Químicas. Universidad Complutense de Madrid. Presentado por David Chicharro Vacas (Julio 2015). Calificación: Apto. Tutor: Luis Bañares Morcillo.

• *Dinámica de fotodisociación en tiempo real de halometanos: CH<sub>2</sub>ICI y CH<sub>2</sub>Brl*. Máster en Ciencia y Tecnología Químicas. Universidad Complutense de Madrid. Presentado por Marta Murillo Sánchez (Junio 2016). Calificación: 9.2. Tutor: Luis Bañares Morcillo.

• *Dinámica de fotodisociación de bromoyodometano (CH<sub>2</sub>Brl) con técnicas de imágenes de iones*. Máster en Ciencia y Tecnología Químicas. Universidad Complutense de Madrid. Presentado por Eduardo Navarro Manteca (Septiembre 2016). Calificación: 8.5. Tutor: Luis Bañares Morcillo.

### Publicaciones de divulgación científica

- 1.- L. Bañares, A. Douhal  
*Una 'cámara' para fotografiar moléculas*  
El País, 20 de Octubre de 1999
- 2.- L. Bañares  
*Femtoquímica: la observación directa de los estados de transición de las reacciones químicas*  
Revista Española de Física, **13**, 6 (1999).
- 3.- L. Bañares  
*Química en femtosegundos: una ventana temporal para entender las reacciones químicas*  
Capítulo en *I Encuentro Lens-UCM sobre Tecnología Láser*, págs. 17-39, Ministero Affari Esteri, Direzione Generale per la Promozione e Cooperazione Culturale. Ambasciata d'Italia, Madrid, 2002.
- 4.- L. Bañares, L. González  
*Química bajo control*  
El País, 7 de Enero de 2004, pág. 30.
- 5.- L. González, L. Bañares  
*Control cuántico con láseres de femtosegundo: Hacia una nueva Química*  
Anales de Química, **100**, 5 (2004).
- 6.- R. de Nalda, L. Bañares  
*Los láseres en las ciencias de la vida*  
Revista Española de Física, **21**, 36 (2007).

### Cursos, Seminarios y Conferencias impartidos

- 1.- *Lugar:* Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Madrid  
*Título:* Dinámica de las reacciones químicas por haces moleculares  
*Fecha:* 18 de Abril de 1990  
*Clave:* Conferencia
- 2.- *Lugar:* IV Encuentro de Dinámica Molecular. Facultad de Química, Universidad de Salamanca, Salamanca  
*Título:* Química en femtosegundos: el estado de transición observado en tiempo real  
*Fecha:* 22 de Marzo de 1993  
*Clave:* Conferencia
- 3.- *Lugar:* Ciclo de Conferencias en Física Atómica y Molecular. C.S.I.C., Madrid  
*Título:* Dinámica en tiempo real de la transferencia de protón intramolecular  
*Fecha:* 16 de Abril de 1993  
*Clave:* Conferencia
- 4.- *Lugar:* Departamento de Química, Universidad Autónoma de Madrid  
*Título:* Química en femtosegundos: observando el estado de transición en tiempo real  
*Fecha:* 23 de Abril de 1993  
*Clave:* Conferencia
- 5.- *Lugar:* Physikalisches Institut. Universität Würzburg. Alemania  
*Título:* Femtosecond experiments on organometallic compounds

- Fecha:* 6 de Diciembre de 1995  
*Clave:* Seminario
- 6.- *Lugar:* Fakultät Chemie. Universität Würzburg. Alemania  
*Título:* Femtosecond experiments on Fe(CO)<sub>5</sub>  
*Fecha:* 26 de Julio de 1996  
*Clave:* Conferencia
- 7.- *Lugar:* Physikalisches Institut. Universität Würzburg. Alemania  
*Título:* Femtosecond experiments on metal carbonyls and organometallic compounds  
*Fecha:* 14 de Octubre de 1996  
*Clave:* Seminario
- 8.- *Lugar:* Departamento de Química Física I. UCM. Madrid  
*Título:* Cálculos clásicos y mecanocuánticos de dinámica molecular de reacciones químicas elementales  
*Fecha:* 27 de Enero de 1999  
*Clave:* Seminario
- 9.- *Lugar:* Els Juliols de la UB. Universitat de Barcelona.  
*Título:* Procesos Ultrarrápidos en Química y Biología  
*Fecha:* 6 de Julio de 1999  
*Clave:* Curso de Verano
- 10.- *Lugar:* Seminari de Recerca. Facultat de Química. Universitat de Barcelona.  
*Título:* Dinámica molecular de reacciones químicas elementales en fase gas: teoría y experimento  
*Fecha:* 6 de Julio de 1999  
*Clave:* Conferencia
- 11.- *Lugar:* Humboldt-Kolloquium in Spanien. La Coruña.  
*Título:* Femtosecond Chemistry, a temporal window to understand chemical reactions  
*Fecha:* 17-19 Septiembre de 1999  
*Clave:* Seminario
- 12.- *Lugar:* Facultad de Ciencias Químicas. UCM. Madrid  
*Título:* El Premio Nobel de Química 1999: Femtoquímica y Femtobiología  
*Fecha:* 12 Noviembre de 1999  
*Clave:* Conferencia
- 13.- *Lugar:* Cursos de Verano de El Escorial. Femtoquímica y Femtobiología.  
*Título:* Ultrafast photoisomerization and proton transfer processes in the gase phase  
*Fecha:* 28 de Julio de 2000  
*Clave:* Curso de Verano
- 14.- *Lugar:* Universidad de Alcalá de Henares. Madrid  
*Título:* Femtoquímica: la química en vivo  
*Fecha:* 21 de Noviembre de 2000  
*Clave:* Conferencia
- 15.- *Lugar:* I Encuentro LENS-UCM sobre Tecnología Láser. Universidad Complutense. Madrid  
*Título:* Chemistry in femtoseconds: a temporal window to understand chemical reactions  
*Fecha:* Marzo 2001  
*Clave:* Conferencia
- 16.- *Lugar:* IFEMA. Parque Ferial Juan Carlos I. Madrid  
Formadrid. Escuela de Verano de la Comunidad de Madrid 2001  
Cursos de formación y actualización del profesorado: Física cuántica y partículas elementales  
*Título:* Interacción materia radiación  
*Fecha:* 14 de agosto de 2001  
*Clave:* Curso de Verano
- 17.- *Lugar:* Department of Chemistry. Vrije Universiteit Amsterdam  
*Título:* UV photodissociation dynamics of sulfur containing molecules  
*Fecha:* 22 de diciembre de 2003  
*Clave:* Conferencia
- 18.- *Lugar:* Departamento de Ciencias Experimentales. Universidad Pablo de Olavide (Sevilla)  
*Título:* Química bajo control: Pulsos láser de femtosegundo para manipular las reacciones químicas

- Fecha:* 18 de marzo de 2004  
*Clave:* Seminario
- 19.- *Lugar:* Centro de Astrobiología (INTA-CSIC), Madrid  
*Título:* Dinámica de fotodisociación de moléculas de interés atmosférico: sulfuro y sulfóxido de dimetilo  
*Fecha:* 11 de mayo de 2004  
*Clave:* Conferencia
- 20.- *Lugar:* Instituto de Matemáticas y Física Fundamental, CSIC, Madrid  
*Título:* Dinámica resuelta en tiempos de reacciones de inserción  
*Fecha:* 7 de junio de 2004  
*Clave:* Seminario
- 21.- *Lugar:* Facultad de Ciencias, Universidad de Valladolid  
*Título:* Femtoquímica y control de las reacciones químicas  
*Fecha:* 21 de enero de 2005  
*Clave:* Conferencia
- 22.- *Lugar:* California Institute of Technology, Pasadena, EE.UU.  
*Título:* Photodissociation dynamics using velocity map imaging and ultrafast lasers  
*Fecha:* 6 de julio de 2007  
*Clave:* Seminario
- 23.- *Lugar:* California Institute of Technology, Pasadena, EE.UU.  
*Título:* Adaptive control of rotational alignment in N<sub>2</sub>  
*Fecha:* 31 de agosto de 2007  
*Clave:* Seminario
- 24.- *Lugar:* Universidad de Buenos Aires, Argentina  
*Título:* Dinámica de fotodisociación molecular con pulsos láser de nano- y femtosegundos y técnicas de imágenes de iones  
*Fecha:* 15 de septiembre de 2008  
*Clave:* Conferencia
- 25.- *Lugar:* Universidad Nacional de Córdoba, Argentina  
*Título:* Dinámica de fotodisociación molecular con pulsos láser de nano- y femtosegundos y técnicas de imágenes de iones  
*Fecha:* 16 de septiembre de 2008  
*Clave:* Conferencia
- 26.- *Lugar:* Department of Chemistry, Vrije Universiteit Amsterdam  
*Título:* Molecular movies of photodissociating molecules by imaging techniques  
*Fecha:* 30 de septiembre de 2010  
*Clave:* Conferencia
- 27.- *Lugar:* Departamento de Ciencia de Materiales, ETSI de Caminos, Canales y Puertos, Universidad Politécnica de Madrid  
*Título:* El láser de femtosegundos cómo herramienta para la modificación de materiales: desde moléculas en fase gaseosa hasta sólidos  
*Fecha:* 5 de marzo de 2012  
*Clave:* Conferencia
- 28.- *Lugar:* Instituto de Física Fundamental, CSIC, Madrid  
*Título:* The UV photodissociation dynamics of CH<sub>3</sub>I: new insights into an old story  
*Fecha:* 17 de abril de 2012  
*Clave:* Conferencia
- 29.- *Lugar:* Sincrotrón Soleil, París, Francia  
*Título:* Photodissociation of acetaldehyde: competition between radical and molecular channels and the role of the roaming mechanism  
*Fecha:* 13 de diciembre de 2012  
*Clave:* Conferencia
- 30.- *Lugar:* Cursos de Verano de El Escorial, Laser ablation spectroscopy and chemometric methods: multidisciplinary analysis (forensic, archaeology, food industry and healthcare)  
*Título:* Pulsos láser de femtosegundos para caracterizar y modificar materiales: desde moléculas a sólidos  
*Fecha:* 15 de julio de 2013  
*Clave:* Curso de Verano
- 31.- *Lugar:* Instituto de Fusión Nuclear, Universidad Politécnica de Madrid, España  
*Título:* Pulsos láser de femtosegundos para caracterizar y modificar materiales: desde moléculas a sólidos

- Fecha:* 15 de octubre de 2013  
*Clave:* Conferencia
- 32.- *Lugar:* Facultat de Física. Universitat de València. España  
*Título:* Femtoscopia. Una herramienta laser para observar y manipular procesos moleculares  
*Fecha:* 31 de octubre de 2013  
*Clave:* Conferencia
- 33.- *Lugar:* Max Born Institut. Berlín. Alemania  
*Título:* Strong field control of photochemistry  
*Fecha:* 24 de septiembre de 2014  
*Clave:* Conferencia
- 34.- *Lugar:* Departamento de Química Física I. Universidad Complutense de Madrid  
*Título:* Manipulando reacciones químicas con luz láser ultracorta ultraintensa  
*Fecha:* 21 de noviembre de 2014  
*Clave:* Conferencia
- 35.- *Lugar:* International School on Light Sciences and Technologies. Universidad Internacional Menéndez Pelayo. Palacio de la Magdalena. Santander  
*Título:* Dynamic monitoring of the chemical bond using ultrafast lasers  
*Fecha:* 22 de junio de 2016  
*Clave:* Conferencia

#### **Miembro del *Editorial Board* de Revistas Internacionales**

- *Associate Editor* de la Revista *Physical Chemistry Chemical Physics* de la *Royal Society of Chemistry* (desde 1 Enero 2015)

#### **Miembro de Comites Organizadores y Comites Científicos (por orden cronológico)**

- Secretario del Curso de Verano *Láseres y Reacciones Químicas*, organizado por la Universidad Complutense de Madrid. San Lorenzo de El Escorial (Madrid) (21 a 25 de Agosto de 1989)
- Miembro del Comité Organizador del *Ist International Exhibition and Congress on Laser and Electrooptics*. Madrid (17 a 19 de Septiembre de 1990)
- Director del Curso de Verano *Femtoquímica y Femtobiología*, organizado por la Universidad Complutense de Madrid. 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)
- Miembro del Comité Científico de la *Second European School on Computational Chemistry, Reaction and Molecular Dynamics*. Barcelona (23-28 de Junio 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)
- Coordinador de la UCM del Curso Internacional de Doctorado "Espectroscopía Atómica y Molecular" entre la Universidad Complutense de Madrid y la Universidad de Florencia (Italia).
- Miembro del *International Advisory Committee* del *International Symposium on Molecular Beams*.
- Miembro del Comité Científico del *7th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2005*. Lisboa (21-23 de Marzo de 2005).
- Coordinador general del Curso de Doctorado Interuniversitario *Láseres y Espectroscopía Avanzada en Química (QUIMILASER)* en el que participan 12 universidades y el CSIC. Curso 2005-2006 y 2006-2007 (Mención de Calidad).
- Miembro del Comité Organizador del *8th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2006*. Aranjuez (31 de Agosto-3 de Septiembre de 2006).
- Director del Curso de Verano *Los láseres en el siglo XXI*, organizado por la Universidad Complutense de Madrid. 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 ECAMP10 *European Conference on Atoms, Molecules and Photons*. Salamanca (4-9 Julio 2010).
- Miembro del Comité Científico del 11<sup>th</sup> *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 Comité Científico del 12<sup>th</sup> *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 de Julio de 2015).
- Miembro del Comité Científico del 13<sup>th</sup> *Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2015*. Aveiro, Portugal (6-9 de Septiembre de 2015).
- Miembro del Comité Organizador del XXI *European Conference on the Dynamics of Molecular Systems*. MOLEC2016. Toledo, España (11-16 de Septiembre de 2016).

### **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 Sección Territorial de Madrid de la RSEQ (hasta 2010)
- Miembro de la *Asociación Alexander von Humboldt España*
- Miembro de la *Chemical and Molecular Physics Section* de la *European Physics Society*
- 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 de la Junta Directiva del Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular (GEFAM) de la RSEF y la RSEQ (Periodo: 2013-actualidad)
- Presidente del Grupo Especializado de Láseres Ultrarrápidos (GELUR) de la RSEF (Periodo: 2015-)
- *Fellow* de la *Royal Society of Chemistry* (FRSC) (Periodo: 2015-)
- Vocal de la Junta Directiva del Grupo Especializado de Fotoquímica (GRUFO) de la RSEF (Periodo: 2016-actualidad)

### **Evaluador de Proyectos de Investigación y Trabajos Científicos**

- Evaluador de Proyectos de Investigación
  - Ministerio de Educación y Ciencia
  - Ministerio de Ciencia y Tecnología
  - Ministerio de Ciencia e Innovación
  - Consejería de Educación de la Comunidad de Madrid
  - Consejería de Educación de la Comunidad de Castilla-La Mancha
  - Consejería de Educación de la Comunidad del País Vasco
  - Consejería de Educación de la Junta de Andalucía
- Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica. FONCYT (Argentina)
- National Science Foundation. EE.UU.
- Department of Energy. EE.UU.
- Laserlab Europe Consortium

Netherlands Organisation for Scientific Research (NWO), Council for Chemical Sciences (CW)

- *Referee* de Revistas Internacionales  
Physical Chemistry Chemical Physics  
Chemical Physics Letters  
Journal of Chemical Physics  
Journal of Physical Chemistry  
Chemical Physics  
Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry  
Molecular Physics  
Spectrochimica Acta. Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy  
Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America  
Theoretical Chemistry Accounts  
Nature Photonics  
Nature Chemistry  
The Journal of Physical Chemistry Letters
- Miembro del Comité Evaluador (Panel V) de la Facultad de Ciencias e Ingeniería Medioambiental de la Universidad Técnica de Tampere, Tampere (Finlandia). *Research Assessment Exercise 2010-2011* - 12-17 Junio 2011. Miembros del panel: Julia Jeomans (Oxford, UK) chair; Thomas Baer (Stanford, USA); Luis Bañares (UCM, Madrid); Stephen Campbell (Minnesota, USA); Johan Hustad (NTNU, Noruega); Olli Martio (Helsinki, Finlandia); Bo Mattiasson (Lund, Suecia); Stephen Wong (Cornell, USA).
- Secretario del Comité Evaluador (Panel 2) de la CNEAI. Evaluación de Sexenios 2014 y 2015.
- Miembro del Panel Evaluador del "Quantum Dynamics in Tailored Intense Fields (QUTIF)" SPP 1840/1 de la Deutsche Forschungsgemeinschaft (Alemania). Periodo: 18 a 20 Junio 2015

#### **Participación en Tribunales de Tesis Doctorales**

- Miembro de Tribunales de Tesis Doctorales:  
Universidad Complutense de Madrid  
Universidad de Barcelona  
Universidad del País Vasco  
Universidad Autónoma de Madrid  
Universidad de Valencia  
Universidad de Málaga  
Universidad Pablo de Olavide  
Universidad de Granada  
Vrije Universiteit Amsterdam  
Universidad de Valladolid  
Universidad de Castilla-La Mancha  
Universidad Carlos III



<b>Parte A. DATOS PERSONALES</b>		<b>Fecha del CVA</b>	31/10/2016
Nombre y apellidos	Carmen Barrientos Benito		
DNI/NIE/pasaporte		Edad	
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	K-9698-2014	
	Código Orcid	0000-0003-0078-7379	

**A.1. Situación profesional actual**

Organismo	Universidad de Valladolid		
Dpto./Centro	Departamento de Química Física y Química Inorgánica. Facultad de Ciencias		
Dirección	Campus Miguel Delibes. Paseo de Belén. 47011-Valladolid. España		
Teléfono	34983423205	correo electrónico	<a href="mailto:cbb@cf.uva.es">cbb@cf.uva.es</a>
Categoría profesional	Catedrática de Universidad	Fecha inicio	11/11/2011
Espec. cód. UNESCO	2210, 2206, 2105		
Palabras clave	Química Física; Química Interestelar, Física Molecular, Química Computacional		

**A.2. Formación académica (título, institución, fecha)**

Licenciatura/Grado/Doctorado	Institución	Fecha
Licenciada en Ciencias Químicas	Universidad de Valladolid	1/06/1982
Doctor en Ciencias Químicas	Universidad de Valladolid	9/04/1986

**A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica (véanse instrucciones)**

Número de sexenios de investigación: 5 (Fecha del último concedido: 17-6-2015).  
 Tesis Doctorales dirigidas (últimos diez años): 2  
 Citas totales: 1590  
 Promedio citas/año: 87/2007, 152/2008, 87/2009, 84/2010, 54/2011, 106/2012, 76/2013, 84/2014, 62/2015  
 Publicaciones totales en primer cuartil: 61.  
 Índice h: 23.  
 Publicaciones totales: 127.

**Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM (máximo 3500 caracteres, incluyendo espacios en blanco)**

Licenciada en Ciencias Químicas (Junio 1982) y Doctora en Ciencias Químicas (Abril 1986) por la Universidad de Valladolid (Premio Extraordinario).

Becaria Postdoctoral del Consejo Superior de Investigaciones Científicas y Visiting Research Fellow en la Universidad de Kent (Reino Unido). Enero-Diciembre 1987.

Estancias en instituciones extranjeras:

- Laboratorio de Radioastronomía de la Ecole Normale Supérieure (París)
- Departamento de Química y Materiales de La Universidad de L'Aquila (Italia)

Actividad docente desempeñada:

- Profesora Ayudante en el Departamento de Química Física de la Universidad de Valladolid (octubre de 1983- septiembre 1989).
- Profesora Titular Interina de Universidad en el Departamento de Química Física y Analítica de la Universidad de Oviedo (octubre de 1989- febrero 1993).
- Profesora Titular de Universidad en el Departamento de Química Física y Analítica de la Universidad de Oviedo (febrero 1993-septiembre 1995).

- Profesora Titular de Universidad en el Departamento de Química Física de la Universidad de Valladolid (octubre 1995-noviembre 2011).
- Catedrática de Universidad en Departamento de Química Física y Química Inorgánica de la Universidad de Valladolid (desde noviembre 2011).

Mi actividad investigadora se ha desarrollado a través de tres líneas de investigación. La primera línea es de tipo metodológico y dentro de ella he participado en el desarrollo y puesta a punto del método de orbital de defecto cuántico que se ha aplicado fundamentalmente al estudio de procesos de fotoexcitación. El estudio de magnitudes relacionadas con procesos de fotoionización es objeto de interés en el campo de la astrofísica donde la determinación de la composición y abundancia química requiere disponer de fuerza de oscilador y secciones eficaces de fotoionización precisas. La segunda línea de investigación es de tipo estructural y se ha enfocado hacia el estudio de la estructura y propiedades de nuevas moléculas. En este campo pretendemos aportar información sobre especies moleculares relevantes en diversos campos. En particular hemos estudiado a) Moléculas con interés en la química iónica en fase gas; b) Moléculas de interés en Astroquímica y c) Intermedios y complejos pre-reactivos. El tercer campo de investigación corresponde a estudios sobre reactividad y se ha enfocado básicamente al estudio de reacciones que tienen lugar entre especies neutras con implicaciones en química de la atmósfera y al estudio de reacciones ion-molécula en química interestelar especialmente lo que concierne a la síntesis de aminoácidos. En estos campos hemos colaborado con los Profs. J. Ugalde (Universidad del País Vasco) y Y. Ellinger (Université Pierre et Marie Curie en París, Francia).

Soy autora de 126 publicaciones en revistas científicas y 3 capítulos de libro. He presentado 110 trabajos de investigación en congresos científicos internacionales.

He dirigido 8 Tesinas de Licenciatura y 4 Tesis Doctorales. Dos de los doctores a los que he dirigido su tesis son actualmente profesores permanentes, C. Lavin (Titular Universidad, Valladolid) y A. Cimas (Maître de Conférences, Evry, Francia).

He participado en 21 Proyectos de investigación y Acciones integradas financiados ininterrumpidamente por el Ministerio español correspondiente o por el Gobierno autonómico en diversas convocatorias públicas: en los últimos 10 años he participado en 6 Proyectos de investigación actuando en todos ellos como Investigadora Responsable.

### **Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES** *(ordenados por tipología)*

#### **C.1. Publicaciones (10 publicaciones más relevantes últimos años)**

Autores: Redondo, P.; Largo A.; Vega-Vega, A.; Barrientos, C.

Título: "Structure and spectroscopic properties of neutral and cationic tetratomic [C,H,N,Zn] isomers: A theoretical study"

Referencia: The Journal of Chemical Physics 2015, 142, 104301(1-11).

Autores: Redondo, P.; Barrientos, C.; Largo, A.

Título: "Some insights into formamide formation through gas-phase reactions in the interstellar medium",

Referencia: Astrophysical Journal 2014, 780, 181(1-7).

Autores: Redondo, P.; Barrientos, C.; Largo, A.

Título: "Peptide bond formation through gas-phase reactions in the interstellar medium: formamide and acetamide as prototypes"

Referencia: Astrophysical Journal 2014, 793, 32(1-8).

Autores: Barrientos, C.; Redondo, P.; Martínez, H.; Largo, A.

Título: "Computational prediction of the spectroscopic parameters of methanediol, an elusive molecule for interstellar detection"

Referencia: Astrophysical Journal 2014, 784, 132(1-7).

Autores: Cabezas, C.; Barrientos, C.; Largo, A.; Guillemin, J.-C.; Cernicharo, J.; Peña, I.; Alonso, J.L.

Título: "Generation and structural characterization of aluminum cyanoacetylide"

Referencia: The Journal of Chemical Physics 2014, 141, 104305(1-7).

- Autores: Redondo, P.; Martínez, H.; Cimas, A.; Barrientos, C.; Largo, A.  
Título: "Computational study of peptide bond formation in the gas phase through ion-molecule reactions"  
Referencia: Physical Chemistry Chemical Physics 2013, 15, 13005-13012.
- Autores: Barrientos, C.; Redondo, P.; Largo, L.; Rayón, V.M.; Largo, A.  
Título: "Gas-phase synthesis of precursors of interstellar glycine: a computational study of the reactions of acetic and hydroxylamine and its ionized and protonated derivatives"  
Referencia: Astrophysical Journal 2012, 748, 99(1-7).
- Autores: Largo, L.; Redondo, P.; Rayón, V.M.; Largo, A.; Barrientos, C.  
Título: "The reaction between  $\text{NH}_3^+$  and  $\text{CH}_3\text{COOH}$ : a possible process for the formation of glycine precursors in the interstellar medium"  
Referencia: Astronomy & Astrophysics 2010, 516, A79
- Autores: Rayón, V.M.; Redondo, Barrientos, C.; Largo, A.  
Título: "Structure and bonding in first-row transition-metal dicarbides: are they related to the structure of met-cars?",  
Referencia: Chemistry – A European Journal 2006, 12, 6963-6975.
- Autores: Largo, A.; Redondo, Barrientos, C.  
Título: "On the competition between linear and cyclic isomers in second-row dicarbides"  
Referencia: Journal of American Chemistry Society 2004, 126, 14611-14619.

## C.2. Proyectos (7 Proyectos más destacados en los últimos años)

- Referencia del proyecto: CTQ2010-16864.  
Título: "Estudio mecanocuántico y cinético de sistemas y procesos ion-molécula de interés en Astroquímica y Química Sintética".  
Entidad financiadora: MICINN.  
Convocatoria: 2010  
Nombre del Investigador Principal: Carmen Barrientos Benito (  
Entidad de afiliación: Universidad de Valladolid  
Fecha de inicio: 01/01/2011. . Fecha de finalización: 30/06/2014.  
Cuantía de la subvención: 71.390 euros.  
Tipo de participación: Investigador Principal  
Estado del proyecto: concedido
- Referencia del proyecto: CTQ2007-67234-C02-02  
Título: "Reactividad en fase gas de cationes metálicos con  $\text{CH}_3\text{X}$  (X = H, F, Cl): La importancia de formación de intermediatos en reactividad química".  
Entidad financiadora: MICINN.  
Convocatoria: 2007  
Nombre del Investigador Principal: Carmen Barrientos Benito (  
Entidad de afiliación: Universidad de Valladolid  
Fecha de inicio: 01/10/2007. Fecha de finalización: 30/09/2010.  
Cuantía de la subvención: 54.100 euros.  
Tipo de participación: Investigador Principal  
Estado del proyecto: concedido
- Referencia del proyecto: VA077U13  
Título: "Procesos ion-molécula en fase gas: síntesis interestelar de biomoléculas y reactividad de derivados halocarbonados".  
Entidad financiadora: Junta de Castilla y León.  
Convocatoria: 2013  
Nombre del Investigador Principal: Carmen Barrientos Benito (  
Entidad de afiliación: Universidad de Valladolid  
Fecha de inicio: 03/09/2013. Fecha de finalización: 02/09/2016.  
Cuantía de la subvención: 30.000 euros.  
Tipo de participación: Investigador Principal  
Estado del proyecto: concedido
- Referencia del proyecto: VA040A09

Título: "Reacciones ion-molécula en fase gas. Implicaciones en Química sintética y Astroquímica".

Entidad financiadora: Junta de Castilla y León.

Convocatoria: 2009

Nombre del Investigador Principal: Carmen Barrientos Benito

Entidad de afiliación: Universidad de Valladolid

Fecha de inicio: 01/01/2009. Fecha de finalización: 01/01/2012.

Cuantía de la subvención: 42.100 euros.

Tipo de participación: Investigador Principal

Estado del proyecto: concedido

Referencia del proyecto: VA077A06

Título: "Estudio de la estructura y síntesis de compuestos de interés en Química Atmosférica y en el medio interestelar".

Entidad financiadora: Junta de Castilla y León.

Convocatoria: 2006

Nombre del Investigador Principal: Carmen Barrientos Benito

Entidad de afiliación: Universidad de Valladolid

Fecha de inicio: 01/01/2006. Fecha de finalización: 01/01/2009.

Cuantía de la subvención: 13.300 euros.

Tipo de participación: Investigador Principal

Estado del proyecto: concedido

Referencia del proyecto: VA085/03

Título: " Estructura y procesos de síntesis de compuestos policarbonados: estudio teórico".

Entidad financiadora: Junta de Castilla y León.

Convocatoria: 2006

Nombre del Investigador Principal: Carmen Barrientos Benito

Entidad de afiliación: Universidad de Valladolid

Fecha de inicio: 01/01/2003. Fecha de finalización: 01/01/2006.

Cuantía de la subvención: 13.500 euros.

Tipo de participación: Investigador Principal

Estado del proyecto: concedido

Referencia del proyecto: CTQ2004-07405-C02-01

Título: "Estudio mecanístico de reacciones de interés en química atmosférica y astroquímica".

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología.. Dirección General de Investigación.

Convocatoria: 2004

Nombre del Investigador Principal: Antonio Largo Cabrerizo

Entidad de afiliación: Universidad de Valladolid

Fecha de inicio: 13/12/2004. Fecha de finalización: 31/12/2007.

Cuantía de la subvención: 52.000 euros.

Tipo de participación: Investigador

Estado del proyecto: concedido

### **C.3. Contratos**

### **C.4. Patentes**

### **C.5 Evaluador de Proyectos de Investigación para distintas agencias:**

Ministerio de España (distintas denominaciones). Años: 1997, 2008, 2009, 2010.

### **C.6 - Organización de Congresos.:**

International Conference on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA-2004).

Ámbito: internacional. 24-28 Marzo 2003. Lugar: Valladolid

Tipo de participación: Comité Local.

### **Otros**



---

Comisión Interministerial de Ciencia y  
Tecnología

---

## Curriculum vitae

Nombre: ERNESTO GARCIA PARA

Fecha: 15-Abril-2016

Apellidos: GARCIA PARA  
DNI:

Fecha de nacimiento : - -

Nombre: ERNESTO  
Sexo: V

---

### Situación profesional actual

Organismo: UNIVERSIDAD DEL PAIS VASCO  
Facultad, Escuela o Instituto: Facultad de Farmacia  
Depto./Secc./Unidad estr.: Química Física  
Dirección postal: Paseo de la Universidad,7. Vitoria 01006

Teléfono (indicar prefijo, número y extensión): 945013063  
Fax: 945013014  
Correo electrónico: e.garcia@ehu.es

Especialización (Códigos UNESCO): 230700  
Categoría profesional: Catedrático de Universidad  
Fecha de inicio: 15/11/01

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  
Computación en Red  
Modelización de la contaminación atmosférica

---

### Formación Académica

Titulación Superior	Centro	Fecha
CIENCIAS QUIMICAS	Facultad de Ciencias. Universidad del País Vasco	1982

Doctorado	Centro	Fecha
CIENCIAS QUIMICAS	Facultad de Ciencias. Universidad del País Vasco	1986

### Actividades anteriores de carácter científico profesional

---

Puesto	Institución	Fechas
Becario Predoctoral	Dpto. Química (Univ. Perugia, Italia)	1982 - 1985
Becario Postdoctoral	Dpto. Química Física (Univ. País Vasco)	1986 - 1989
Profesor Asociado	Dpto. Química Física (Univ. Oviedo)	1989 - 1989
Profesor Asociado	Dpto. Química Física (Univ. País Vasco)	1989 - 1991
Profesor Titular Interino	Dpto. Química Física (Univ. País Vasco)	1992 - 1994
Profesor Titular de Universidad	Dpto. Química Física (Univ. País Vasco)	1994 - 2001
Profesor Visitante	Dpto. Química (Universidad de Perugia, Italia)	1997 - 1998

---

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

Idioma	Habla	Lee	Escribe

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

(nacionales y/o internacionales)

---

Título del proyecto: Estudio mecanocuántico de reacciones químicas átomo - molécula diatómica colineales y tridimensionales

Entidad financiadora: Gobierno Vasco

Entidades participantes: Universidad de Perugia (Italia)

Duración, desde: 1982

hasta: 1985

Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Antonio Laganà

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Cinética y dinámica de reacciones químicas de metal alcalino o alcalinotérreo con halógenos de hidrógeno

Entidad financiadora: Ministerio de Educación

Entidades participantes: Universidad del País Vasco

Duración, desde: 1986

hasta: 1989

Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Fernando Castaño

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Dinámica de estados excitados de moléculas BrCl y Br<sub>2</sub>

Entidad financiadora: Universidad del País Vasco

Entidades participantes: Universidad del País Vasco

Duración, desde: 1987

hasta: 1987

Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Ernesto Matrínez Ataz

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Vector and parallel restructuring for reactive scattering code

Entidad financiadora: IBM

Entidades participantes: Universidad del País Vasco, Universidad de Perugia (Italia)

Duración, desde: 1987

hasta: 1987

Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Antonio Laganà

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Estudio teórico clásico y cuántico de reacciones químicas elementales

Entidad financiadora: Acción Integrada de Investigación entre España e Italia

Entidades participantes: Universidad de Salamanca, Universidad del País Vasco, Universidad de Perugia (Italia)

Duración, desde: 1988

hasta: 1988

Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: José M. Alvariño, Antonio Laganà

Número de investigadores participantes:

---



---

Título del proyecto: Formulación generalizada de matrices hamiltonianas reducidas con adaptación de spin y construcción directa de matrices densidad reducida

Entidad financiadora: Universidad del País Vasco

Entidades participantes: Universidad del País Vasco

Duración, desde: 1989 hasta: 1989

Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Luis Lain Pérez

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Determinación directa de matrices densidad reducidas por medio de la teoría de hamiltonianos reducidos con adaptación de spin

Entidad financiadora: Universidad del País Vasco

Entidades participantes: Universidad del País Vasco

Duración, desde: 1990 hasta: 1990

Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Alicia Torre García

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Estudio de las secciones eficaces totales y de excitación de compuestos derivados de metano, con electrones de energía de 20 a 500 eV.

Entidad financiadora: Universidad del País Vasco

Entidades participantes: Universidad del País Vasco

Duración, desde: 1991 hasta: 1991

Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Fernando Castaño Almendral

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Modelización de procesos elementales en flujos hipersónicos

Entidad financiadora: AGENCIA ESPACIAL ITALIANA

Entidades participantes: CNR Bari (Italia), Universidad de Bari, Univ. Perugia (Italia), Univ. País Vasco, Univ. Barcelona

Duración, desde: 1990 hasta: 1992

Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Mario Cacciatore

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Dinámica de reacciones químicas elementales. Dinámica de rotación-vibración en líquidos

Entidad financiadora: MEC - DGICYT (PS89-0160)

Entidades participantes: Universidad de Salamanca, Universidad del País Vasco

Duración, desde: 1990 hasta: 1993

Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Jose M<sup>a</sup> Alvaríño Herrero

Número de investigadores participantes:

---

---

Título del proyecto: Dinámica de reacciones elementales en Química Atmosférica

Entidad financiadora: ACCION INTEGRADA DE INVESTIGACION ENTRE ESPAÑA E ITALIA (HI92-012)

Entidades participantes: Universidad de Salamanca, Universidad del País Vasco, Universidad de Perugia (Italia)

Duración, desde: 1993 hasta: 1993 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Jose M<sup>a</sup> Alvariño Herrero y Antonio Laganà

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Superficies de energía potencial y reactividad química de procesos elementales de interés atmosférico y en sistemas de Van der Waals

Entidad financiadora: MEC - DGICYT (PB92-0295)

Entidades participantes: Universidad de Salamanca, Universidad del País Vasco

Duración, desde: 1993 hasta: 1996 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Jose M<sup>a</sup> Alvariño Herrero

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Software for design of potential energy surfaces for chemicals reactions

Entidad financiadora: Gobierno Vasco

Entidades participantes: Universidad del País Vasco, Universidad de Perugia (Italia)

Duración, desde: 1994 hasta: 1994 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Ernesto García Para y Osvaldo Gervasi

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Desarrollo de métodos computacionales para el estudio de reacciones de recombinación en química atmosférica

Entidad financiadora: Acción Integrada de Investigación entre España e Italia

Entidades participantes: Universidad del País Vasco, Universidad de Salamanca, Universidad de Perugia (Italia)

Duración, desde: 1996 hasta: 1996 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Ernesto García Para y Antonio Laganà

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Dinámica y estereodinámica de reacciones elementales en química atmosférica

Entidad financiadora: MEC - DGICYT (PB95-0930-C02-02)

Entidades participantes: Universidad del País Vasco, Universidad de Salamanca

Duración, desde: 1996 hasta: 1999 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Ernesto García Para

Número de investigadores participantes:

---

---

Título del proyecto: Accurate calculations of detailed reactive properties of polyatomic molecules

Entidad financiadora: Unión Europea (COST-D9/0003/97).

Entidades participantes: Univ. País Vasco, Univ. Bristol, University College London, Univ. Goteborg, Univ. Perugia, Univ. Freiburg, Univ. Coimbra, Univ. Salamanca, Academy of Sciences (Budapest), SOREQ (Israel)

Duración, desde: 1998 hasta: 2002 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Ernesto García Para

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Estudio mecano-cuántico de la reacción  $\text{Na}+\text{HF}\rightarrow\text{NaF}+\text{H}$ .

Entidad financiadora: Gobierno Vasco

Entidades participantes: Universidad del País Vasco, Universidad de Perugia (Italia)

Duración, desde: 1998 hasta: 1998 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Ernesto García

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Estudio teórico de reacciones elementales en química atmosférica y combustión

Entidad financiadora: MEC-DGES (PB98-0281-C02-02)

Entidades participantes: Universidad del País Vasco, Universidad de Salamanca

Duración, desde: 1999 hasta: 2002 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Ernesto García

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Superficies de energía potencial para reacciones poliatómicas

Entidad financiadora: Gobierno Vasco

Entidades participantes: Universidad del País Vasco, Universidad de Perugia (Italia)

Duración, desde: 2000 hasta: 2000 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Ernesto García

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: SIMBEX: A metalaboratoy for the a priori simulation of crossed molecular beam experiments

Entidad financiadora: Unión Europea (COST-D23/003/01)

Entidades participantes: Univ. Perugia, Univ. País Vasco, Univ. Bristol, Univ. Goteborg, Univ. Budapest, Univ. Poznan, Univ. Politécnica de Madrid, CNR Pisa, Lab. Daresbury, Academy of Sciences Budapest

Duración, desde: 2001 hasta: 2005 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Osvaldo Gervasi (Universidad de Perugia, Italia)

Número de investigadores participantes:

---

---

Título del proyecto: Dinámica molecular de reacciones químicas

Entidad financiadora: Universidad del País Vasco

Entidades participantes:

Duración, desde: 2001 hasta: 2004

Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Ernesto García

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Estructura electrónica, dinámica y cinética de reacciones triatómicas no adiabáticas y poliatómicas

Entidad financiadora: MCyT (BQU2002-04462)-C02-02)

Entidades participantes: Universidad del País Vasco, Universidad de Salamanca

Duración, desde: 2002 hasta: 2005

Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Ernesto García

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Dinámica molecular de reacciones químicas

Entidad financiadora: Universidad del País Vasco

Entidades participantes:

Duración, desde: 2004 hasta: 2007

Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Ernesto García

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Dinámica, Estereodinámica y cinética de reacciones triatómicas en estados excitados y de reacciones poliatómicas (Computación GRID)

Entidad financiadora: MEC (CTQ2005-09185-C02-01)

Entidades participantes: Universidad del País Vasco, Universidad de Salamanca

Duración, desde: 2005 hasta: 2008

Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Ernesto García

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: QDYN: Quantum dynamics engine for GRID enable molecular simulators

Entidad financiadora: Unión Europea (COST-D37/002/06)

Entidades participantes: Univ. Perugia, Univ. País Vasco, Univ. Bristol, Univ. Goteborg, Univ. Budapest, Univ. Bielefeld, Univ. Univ. Rennes, Univ. Crete

Duración, desde: 2006 hasta: 2010

Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Antonio Laganà (Universidad de Perugia, Italia)

Número de investigadores participantes:

---

---

Título del proyecto: Dinámica de procesos químicos: experimentos fotoiniciados con láseres de nanosegundo y femtosegundo y métodos teóricos

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación (CTQ2008-02578/BQU)

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Universidad del País Vasco, Universidad de Salamanca

Duración, desde: 1/1/2009 hasta: 31/12/2013 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés (Universidad Complutense de Madrid)

Número de investigadores participantes:

---

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

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad (CTQ2012-37404-C02-02)

Entidades participantes: Universidad de Salamanca, Universidad del País Vasco,

Duración, desde: 1/1/2013 hasta: 31/12/2015 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: José M<sup>º</sup> Alvariño Herrero (Universidad de Salamanca)

Número de investigadores participantes:

---

## 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): E.G. Para, E. Martínez, J.M. Alvaríño.

Título: Franck-Condon factors and r-centroids for the A-X and B-X band system of CuH and CuD

Ref.  revista : Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiation Transfer  Libro

Clave: A Volumen: 30 Páginas, inicial: 439 final: 447 Fecha: 1983

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, E. García

Título: A smooth potential energy fit for reactive systems

Ref.  revista: Journal of Molecular Structure (THEOCHEM)  Libro

Clave: A Volumen: 107 Páginas, inicial: 91 final: 94 Fecha: 1984

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E. García, A. Laganà.

Título: A fit of the potential energy surface of the LIHF

Ref.  revista: Molecular Physics  Libro

Clave: A Volumen: 52 Páginas, inicial: 1115 final: 1124 Fecha: 1984

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E. García, A. Laganà.

Título: Diatomic potential functions for triatomic scattering.

Ref.  revista: Molecular Physics  Libro

Clave: A Volumen: 56 Páginas, inicial: 621 final: 627 Fecha: 1985

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E. García, A. Laganà

Título: A new bond order functional form for triatomic molecules: A fit of the BeHF potential.

Ref.  revista: Molecular Physics  Libro

Clave: A Volumen: 56 Páginas, inicial: 629 final: 639 Fecha: 1985

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, E. García, M.L. Hernández, J.M. Alvariño.

Título: Selective tunneling effects in collinear chemical reactions

Ref.  revista: II Nuovo Cimento

Libro

Clave: A Volumen: D5 Páginas, inicial: 541 final: 550

Fecha: 1985

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): L. Ciccarelli, E. García, A. Laganà.

Título: A quantum mechanical test for a LiHCl semiempirical surface

Ref.  revista: Chemical Physics Letters

Libro

Clave: A Volumen: 120 Páginas, inicial: 75 final: 79

Fecha: 1986

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E. García, A. Laganà.

Título: Rate constants for deactivation of thermal ( $T=300$  K)  $H_2$  molecules by hydrogen atoms

Ref.  revista: Chemical Physics Letters

Libro

Clave: A Volumen: 123 Páginas, inicial: 365 final: 370

Fecha: 1986

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E. García, A. Laganà

Título: High temperature ( $T=4000$  K) rate constants for  $H+H_2(v<10)$ .

Ref.  revista: Journal of Physical Chemistry

Libro

Clave: A Volumen: 90 Páginas, inicial: 987 final: 989

Fecha: 1986

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): J.M. Alvariño, M.L. Hernandez, E. García, A. Laganà.

Título: An improvement of the Li+HF PES based on quasiclassical trajectory test.

Ref.  revista: Journal of Chemical Physics

Libro

Clave: A Volumen: 84 Páginas, inicial: 3059 final: 3067

Fecha: 1986

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

---

Autores (p.o. de firma): E. García, A. Laganà, P. Palmieri.

Título: On the transition state of the Li+HCl reaction.

Ref.  revista: Chemical Physics Letters  Libro  
Clave: A Volumen: 127 Páginas, inicial: 73 final: 77 Fecha: 1986  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, E. García, L. Ciccarelli.

Título: Deactivation of vibrationally excited nitrogen molecules by collision with nitrogen atoms

Ref.  revista: Journal of Physical Chemistry  Libro  
Clave: A Volumen: 91 Páginas, inicial: 312 final: 314 Fecha: 1987  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, E. García.

Título: An approximate estimate of the Li+HF reactivity

Ref.  revista: Chemical Physics Letters  Libro  
Clave: A Volumen: 139 Páginas, inicial: 140 final: 144 Fecha: 1987  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, E. García, L. Ciccarelli.

Título: A vectorizable potential energy functional for reactive scattering.

Ref.  revista: Theoretica Chimica Acta  Libro  
Clave: A Volumen: 72 Páginas, inicial: 253 final: 264 Fecha: 1987  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, O. Gervasi, E. García.

Título: On the representation of potential energy surfaces for alkali and alkaline earth + hydrogen halide reactions

Ref.  revista: Faraday Discussion of Chemical Society  Libro  
Clave: A Volumen: 84 Páginas, inicial: 460 final: 462 Fecha: 1987  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---



---

Autores (p.o. de firma): P. Palmieri, E. García, A. Laganà.  
Título: A potential energy surface for the Li+HCl reaction

Ref.  revista: Journal of Chemical Physics  Libro  
Clave: A Volumen: 88 Páginas, inicial: 181 final: 190 Fecha: 1988  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, O. Gervasi, E. García.  
Título: A bond order LiHF PES for 3D quantum mechanical calculations.

Ref.  revista: Chemical Physics Letters  Libro  
Clave: A Volumen: 143 Páginas, inicial: 174 final: 180 Fecha: 1988  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, E. García, O. Gervasi.  
Título: Improved infinite order sudden cross sections for the Li+HF reaction

Ref.  revista: Journal of Chemical Physics  Libro  
Clave: A Volumen: 89 Páginas, inicial: 7238 final: 7241 Fecha: 1988  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, E. García, O. Gervasi  
Título: Approximate quantum techniques for atom diatom reactions.

Ref.  revista:  Libro: Supercomputer Algorithms for Reactivity, Dynamics and Kinetics of Small Molecules  
Clave: CL Volumen: C277 Páginas, inicial: 271 final: 294 Fecha: 1989  
Editorial (si libro): NATO ASI Series, Kluwer  
Lugar de publicación: Dordrecht

---

Autores (p.o. de firma): J.M.Alvariño, E. García, A.Laganà.  
Título: Quasiclassical calculations for alkali and alkaline earth + hydrogen halide chemical reactions using supercomputers

Ref.  revista:  Libro: Supercomputer Algorithms for Reactivity, Dynamics and Kinetics of Small Molecules  
Clave: CL Volumen: C277 Páginas, inicial: 383 final: 393 Fecha: 1989  
Editorial (si libro): NATO ASI Series, Kluwer  
Lugar de publicación: Dordrecht

---

---

Autores (p.o. de firma): M. Baer, E. García, A. Laganà, O. Gervasi

Título: An approximate three dimensional quantum mechanical study of the  $\text{Li}+\text{HF}=\text{LiF}+\text{H}$  reaction

Ref.  revista: Chemical Physics Letters

Libro

Clave: A Volumen: 158 Páginas, inicial: 362 final: 368

Fecha: 1989

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): J.M. Alvariño, M.L. Hernández, J. Margarido, E. García, A. Laganà.

Título: Estereodinámica y ramificación microscópica en las reacciones químicas elementales  $\text{M}+\text{HF}=\text{MF}+\text{H}$  ( $\text{M}=\text{Be}, \text{Mg}$ ).

Ref.  revista: Anales de Física

Libro

Clave: A Volumen: 86 Páginas, inicial: 170 final: 176

Fecha: 1990

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, E. García, J.M. Alvariño.

Título: A modelling of accurate reduced dimensionality quantum probabilities for the  $\text{H}(\text{D},\text{T})+\text{Cl}_2$  reactions

Ref.  revista: II Nouvo Cimento

Libro

Clave: A Volumen: D12 Páginas, inicial: 1539 final: 1551

Fecha: 1990

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, P. Palmieri, J.M. Alvariño, E. García.

Título: Calculated versus measured scattering and kinetic data for the  $\text{Li}+\text{HCl}$  reaction

Ref.  revista: Journal of Chemical Physics

Libro

Clave: A Volumen: 93 Páginas, inicial: 8764 final: 8770

Fecha: 1990

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, E. García, J. Mateos

Título: Parallel calculations of classical rate constants: The  $\text{H}+\text{H}_2$  reaction

Ref.  revista: Chemical Physics Letters

Libro

Clave: A Volumen: 176 Páginas, inicial: 273 final: 279

Fecha: 1991

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, X. Giménez, E. García, O. Gervasi.  
Título: Parallel calculations of approximate 3D quantum cross sections: The Li+HF reaction

Ref.  revista: Chemical Physics Letters  Libro  
Clave: A Volumen: 176 Páginas, inicial: 280 final: 286 Fecha: 1991  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, E. García, O. Gervasi, R. Baraglia, D. Laforenza, R. Perego  
Título: D+D2 quasiclassical rate constant calculations on parallel computers.

Ref.  revista: Theoretica Chimica Acta  Libro  
Clave: A Volumen: 79 Páginas, inicial: 323 final: 333 Fecha: 1991  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, M. Dini, E. García, J.M. Alvaríño, M. Pariagua.  
Título: Scalar and vector properties of the Mg+HF reaction on a bond order surface.

Ref.  revista: Journal of Physical Chemistry  Libro  
Clave: A Volumen: 95 Páginas, inicial: 8379 final: 8384 Fecha: 1991  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, G. Ferraro, E. García, O. Gervasi, A. Ottavi  
Título: Potential energy representations in the bond order space

Ref.  revista: Chemical Physics  Libro  
Clave: A Volumen: 168 Páginas, inicial: 341 final: 348 Fecha: 1992  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): I. Armenise, M. Cappitelli, E. García, A. Laganà, S. Longo  
Título: Deactivation dynamics of vibrationally excited nitrogen molecules by nitrogen atoms. Effects on non-equilibrium vibrational distribution and dissociation rates of nitrogen under electrical discharges.

Ref.  revista: Chemical Physics Letters  Libro  
Clave: A Volumen: 200 Páginas, inicial: 597 final: 604 Fecha: 1992  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, E. García.  
Título: Temperature dependence of N + N<sub>2</sub> rate coefficients.

Ref.  revista: Journal of Physical Chemistry  Libro  
Clave: A Volumen: 98 Páginas, inicial: 502 final: 507 Fecha: 1994  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, O. Gervasi, S. Crochianti, E. García, G. Ochoa de Aspuru, J.M. Alvaríño  
Título: Cooperative mechanism for halogenic reaction centres: H + ICl and K + ICl.

Ref.  revista: Canadian Journal of Chemistry  Libro  
Clave: A Volumen: 72 Páginas, inicial: 919 final: 923 Fecha: 1994  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, G. Ochoa de Aspuru, E. García.  
Título: Temperature dependence of quasiclassical and quantum rate coefficients for N + N<sub>2</sub>.

Ref.  revista: American Inst. Aeronautics and Astronautics Journal  Libro  
Clave: A Volumen: 94 Páginas, inicial: 1986 final: 1991 Fecha: 1994  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E. García, A. Laganà.  
Título: The largest angle generalization of the rotating bond order potential: The H + H<sub>2</sub> and N + N<sub>2</sub> reactions.

Ref.  revista: Journal of Chemical Physics  Libro  
Clave: A Volumen: 103 Páginas, inicial: 5410 final: 5416 Fecha: 1995  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A.Laganà, G.Ochoa de Aspuru, E. García.  
Título: Theoretical study of the O(<sup>1</sup>D)+HCl reaction on a model potential.

Ref.  revista: Journal of Physical Chemistry  Libro  
Clave: A Volumen: 99 Páginas, inicial: 17139 final: 17144 Fecha: 1995  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, A. Riganelli, G. Ochoa de Aspuru, E. García, M.T. Martínez.

Título: Reactive vibrational deexcitation: The N+N<sub>2</sub> and O+O<sub>2</sub> reactions.

Ref.  revista:  Libro Molecular Physics and Hypersonic Flows

Clave: CL Volumen: C482 Páginas, inicial: 35 final: 52 Fecha: 1996

Editorial (si libro): NATO ASI Series, Kluwer

Lugar de publicación: Dordrecht

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, G. Ochoa de Aspuru, A. Riganelli, E. García.

Título: Rate coefficients for reactive elementary processes involving atoms and vibrationally excited molecules

Ref.  revista: Acta Physica Universitatis Comenianae  Libro

Clave: A Volumen: XXXVII Páginas, inicial: 3 final: 14 Fecha: 1996

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, J.M. Alvariño, M.L. Hernández, P. Palmieri, T. Martínez, E. García.

Título: Ab initio calculations and dynamical test of a potential energy surface for the Na+FH reaction

Ref.  revista: Journal of Chemical Physics  Libro

Clave: A Volumen: 106 Páginas, inicial: 10222 final: 10229 Fecha: 1997

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E. García, A. Laganà.

Título: Effect of varying the transition state geometry on the N+N<sub>2</sub> vibrational deexcitation rate coefficients.

Ref.  revista: Journal of Physical Chemistry  Libro

Clave: A Volumen: 101 Páginas, inicial: 4734 final: 4740 Fecha: 1997

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, S. Crocchianti, G. Ochoa de Aspuru, A. Riganelli, E. García.

Título: Accurate calculations of cross sections and rate coefficients of some atom-diatom reactions relevant to plasma chemistry

Ref.  revista: Plasma Sources: Science and Technology  Libro

Clave: A Volumen: 6 Páginas, inicial: 270 final: 279 Fecha: 1997

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, A. Riganelli, G. Ochoa de Aspuru, E. García, M.T. Martínez  
Título: On multiquantum vibrational deexcitation in symmetric reactions.

Ref.  revista: Chemical Physics Letters  Libro  
Clave: A Volumen: 288 Páginas, inicial: 616 final: 620 Fecha: 1998  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E. García, A. Laganà.  
Título: Rate coefficients under jets conditions

Ref.  revista: Plasma Sources: Science and Technology  Libro  
Clave: A Volumen: 7 Páginas, inicial: 359 final: 362 Fecha: 1998  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Laganà, E. García, G. Ochoa de Aspuru  
Título: The extension of the LAGROBO potential to three different atom reactions

Ref.  revista: Faraday Discussion of Chemical Society  Libro  
Clave: A Volumen: 110 Páginas, inicial: 211 final: 213 Fecha: 1998  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Ceballos, E. García, A. Rodríguez, A. Laganà.  
Título: Quasiclassical trajectory study of the H<sub>2</sub>+H<sub>2</sub> reaction.

Ref.  revista: Chemical Physics Letters  Libro  
Clave: A Volumen: 305 Páginas, inicial: 276 final: 284 Fecha: 1999  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E. García  
Título: A quasiclassical trajectory study of atom - diatom reactions

Ref.  revista: Lecture Notes in Chemistry  Libro  
Clave: CL Volumen: 75 Páginas, inicial: 242 final: 256 Fecha: 2000  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

---

Autores (p.o. de firma): A. Rodríguez, E. García, A. Ceballos, A. Laganà  
Título: A trajectory study of the OH+H<sub>2</sub> reaction

Ref.  revista: Chemical Physics Letters  Libro  
Clave: A Volumen: 333 Páginas, inicial: 471 final: 478 Fecha: 2001  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Ceballos, E. García, A. Rodríguez, A. Laganà  
Título: Quasiclassical kinetics of the H<sub>2</sub>+H<sub>2</sub> reaction and dissociation

Ref.  revista: Journal of Physical Chemistry A  Libro  
Clave: A Volumen: 105 Páginas, inicial: 1797 final: 1804 Fecha: 2001  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Rodríguez, E. García, J.M. Alvariño, A. Laganà  
Título: Progress in validating the potential energy surface of the OH+H<sub>2</sub>: Product vibrational distributions

Ref.  revista: Chemical Physics Letters  Libro  
Clave: A Volumen: 345 Páginas, inicial: 219 final: Fecha: 2001  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Rodríguez, E. García, A. Laganà  
Título: Theoretical rate coefficients for the OH radicals with hydrogen and deuterium

Ref.  revista:  Libro Atmospheric Diagnostic in Urban Regions  
Clave: CL Volumen: Páginas, inicial: 219 final: 225 Fecha: 2001  
Editorial (si libro): Erich Schmidt Verlag  
Lugar de publicación: Berlin

---

Autores (p.o. de firma): A. Ceballos, E. García, A. Laganà  
Título: Quasiclassical rate coefficients for the H<sub>2</sub>+H<sub>2</sub> reaction and dissociation

Ref.  revista: Journal of Physical and Chemical Reference Data  Libro  
Clave: A Volumen: 31 Páginas, inicial: 371 final: 385 Fecha: 2002  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

---

Autores (p.o. de firma): A. Rodríguez, E. García, M.L. Hernández, A. Laganà  
Título: A LAGROBO strategy to fit potential energy surfaces: the OH+HCl reaction

Ref.  revista: Chemical Physics Letters  Libro  
Clave: A Volumen: 360 Páginas, inicial: 304 final: 312 Fecha: 2002  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Ceballos, E. García, A. Laganà  
Título: Reaction and dissociation mechanism control: the H<sub>2</sub>+H<sub>2</sub> system

Ref.  revista: Physical Chemistry Chemical Physics  Libro  
Clave: A Volumen: 4 Páginas, inicial: 5007 final: 5013 Fecha: 2002  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Rodríguez, E. García, M.L. Hernández, A. Laganà  
Título: Isotope effects on the product vibrational distribution of OH(OD)+HCl reaction

Ref.  revista: Chemical Physics Letters  Libro  
Clave: A Volumen: 371 Páginas, inicial: 223 final: 228 Fecha: 2003  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A. Rodríguez, E. García, M.L. Hernández, A. Laganà  
Título: Bond order potentials for a priori simulations of polyatomic reactions

Ref.  revista: Journal of Physical Chemistry A  Libro  
Clave: A Volumen: 107 Páginas, inicial: 7248 final: 7257 Fecha: 2003  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E. García, C. Sánchez, M. Albertí, A. Laganà  
Título: Bond order potentials for a priori simulations of polyatomic reactions

Ref.  revista: Lecture Notes in Computer Science  Libro  
Clave: A Volumen: 3044 Páginas, inicial: 328 final: 337 Fecha: 2004  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---



---

Autores (p.o. de firma): E.García, A.Saracibar, C.Sánchez, A.Laganà  
Título: A full dimensional quasiclassical trajectory study of the Cl+CH<sub>4</sub> rate coefficients

Ref.  revista: Journal of Physical Chemistry A  Libro  
Clave: A Volumen: 108 Páginas, inicial: 8752 final: 8758 Fecha: 2004  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E.García, A.Saracibar, C.Sánchez, A.Laganà  
Título: A multiproperty analysis of the OH + H<sub>2</sub>(D<sub>2</sub>,HD) potential energy surface

Ref.  revista: Chemical Physics  Libro  
Clave: A Volumen: 308 Páginas, inicial: 201 final: 210 Fecha: 2005  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): N. Faginas-Lago, A. Lagnà, E.García, X. Giménez  
Título: Thermal rate coefficients for the N+N<sub>2</sub> reaction: quasiclassical, semiclassical and quantum calculations

Ref.  revista: Lecture Notes in Computer Science  Libro  
Clave: A Volumen: 3480 Páginas, inicial: 1083 final: 1092 Fecha: 2005  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): V.Aquilanti, E.Carmona Novillo, E.García, A.Lombardi, M.B.Sevryuk, E.Yurtsever  
Título: Invariant energy partitions in chemical reactions and cluster dynamics simulations

Ref.  revista: Computational Material Sciences  Libro  
Clave: A Volumen: 35 Páginas, inicial: 187 final: 191 Fecha: 2006  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E.García, C.Sánchez, A.Rodríguez, A.Laganà  
Título: A MEP-MPE potential energy surface of the Cl+CH<sub>4</sub> reaction

Ref.  revista: International Journal of Quantum Chemistry  Libro  
Clave: A Volumen: 106 Páginas, inicial: 623 final: 630 Fecha: 2006  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

---

Autores (p.o. de firma): J.Mayneris, A. Saracibar, E.M.Goldfield, M.González, E.García, S.K.Gray  
Título: Theoretical study of the complex-forming CH+H<sub>2</sub>->CH<sub>2</sub>+H reaction

Ref.  revista: Journal of Physical Chemistry A  Libro  
Clave: A Volumen: 110 Páginas, inicial: 5542 final: 5548 Fecha: 2006  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E.García, A.Saracibar, A. Rodríguez, A.Laganà  
Título: Calculated versus measured product distributions of the OH + D<sub>2</sub> reaction

Ref.  revista: Molecular Physics  Libro  
Clave: A Volumen: 104 Páginas, inicial: 839 final: 846 Fecha: 2006  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E.García, A.Saracibar, L.Zuazo, A.Laganà  
Título: A detailed trajectory study of the OH+CO -> H+CO<sub>2</sub> reaction

Ref.  revista: Chemical Physics  Libro  
Clave: A Volumen: 322 Páginas, inicial: 162 final: 175 Fecha: 2007  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E.García, A.Saracibar, A.Laganà, D. Skouteris  
Título: The shape of the potential energy surface and the thermal rate coefficients of the N+N<sub>2</sub> reaction

Ref.  revista: Journal of Physical Chemistry A  Libro  
Clave: A Volumen: 111 Páginas, inicial: 10362 final: 10368 Fecha: 2007  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E.García, A.Saracibar, S. Gómez-Carrasco, A.Laganà  
Título: Modeling the global potential energy surface of the N+N<sub>2</sub> reaction from ab initio data

Ref.  revista: Physical Chemistry Chemical Physics  Libro  
Clave: A Volumen: 10 Páginas, inicial: 2552 final: 2558 Fecha: 2008  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

---

Autores (p.o. de firma): A.Saracibar, C. Sánchez, E.García, A.Laganà, D. Skouteris  
Título: Grid computing in time-dependent quantum reactive dynamics

Ref.  revista: Lecture Notes in Computer Science  Libro  
Clave: A Volumen: 5072 Páginas, inicial: 1065 final: 1080 Fecha: 2008  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): S. Rampino, D. Skouteris, A.Laganà, E.García  
Título: A comparison of the isotope effect for the N+N<sub>2</sub> reaction calculated on two potential energy surfaces

Ref.  revista: Lecture Notes in Computer Science  Libro  
Clave: A Volumen: 5072 Páginas, inicial: 1081 final: 1093 Fecha: 2008  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A.Laganà, N. Faginas-Lago, S. Rampino, F. Huarte-Larrañaga, E.García  
Título: Thermal rate coefficients in collinear versus bent transition state reactions: The N+N<sub>2</sub> case study

Ref.  revista: Physica Scripta  Libro  
Clave: A Volumen: 78 Páginas, inicial: 058116 final: 058124 Fecha: 2008  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): S. Rampino, D. Skouteris, A.Laganà, E.García, Amaia Saracibar  
Título: A comparison of the quantum-specific efficiency of N+N<sub>2</sub> reaction computed on different potential energy surfaces

Ref.  revista: Physical Chemistry Chemical Physics  Libro  
Clave: A Volumen: 11 Páginas, inicial: 1752 final: 1757 Fecha: 2009  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E.García, C.Sánchez, A.Saracibar, A.Laganà, D. Skouteris  
Título: A detailed comparison of Centrifugal Sudden and J-shift estimates of the reactive properties of the N+N<sub>2</sub> reaction

Ref.  revista: Physical Chemistry Chemical Physics  Libro  
Clave: A Volumen: 11 Páginas, inicial: 11456 final: 11462 Fecha: 2009  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

---

Autores (p.o. de firma): E.Garcia, A.Saracibar, C.Sánchez, A.Laganà  
Título: Effect of the total angular momentum on the dynamics of the H<sub>2</sub>+H<sub>2</sub> system

Ref.  revista: Journal of Physical Chemistry A  Libro  
Clave: A Volumen: 113 Páginas, inicial: 14312 final: 14320 Fecha: 2009  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): S. Rampino, E.Garcia, F.Pirani, A.Laganà  
Título: Accurate quantum dynamics on grid platforms: Some effects of long range interactions on the reactivity of N+N<sub>2</sub>

Ref.  revista: Lecture Notes in Computer Science  Libro  
Clave: A Volumen: 6019 Páginas, inicial: 1 final: 12 Fecha: 2010  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): S.Rampino, F.Pirani, A.Laganà, E.Garcia  
Título: A study on the impact of long range interactions on the N+N<sub>2</sub> reactivity using GEMS

Ref.  revista: International Journal on Web and Grid Services  Libro  
Clave: A Volumen: 6 Páginas, inicial: 196 final: 211 Fecha: 2010  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): M.González, A. Saracibar, E.Garcia  
Título: Capture and dissociation in the complex-forming CH + H<sub>2</sub> --> CH<sub>2</sub> + H, CH + H<sub>2</sub> reactions.

Ref.  revista: Physical Chemistry Chemical Physics  Libro  
Clave: A Volumen: 13 Páginas, inicial: 3421 final: 3428 Fecha: 2010  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E.Garcia, A. Saracibar, A.Laganà  
Título: On the anomaly of the quasiclassical product distributions of the OH+CO->H+CO<sub>2</sub> reaction

Ref.  revista: Theoretical Chemistry Accounts  Libro  
Clave: A Volumen: 128 Páginas, inicial: 727 final: 734 Fecha: 2011  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

---

Autores (p.o. de firma): A.Laganà, N.Balucani, S.Crocchianti, P.Casavecchia, E.Garcia, A.Saracibar  
Título: An extension of the molecular simulator GEMS to calculate the signal of crossed beam experiments

Ref.  revista: Lecture Notes in Computer Science  Libro  
Clave: A Volumen: 6784 Páginas, inicial: 453 final: 465 Fecha: 2011  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): M.González, J.Mayneris-Perxachs, A.Saracibar, E.Garcia  
Título: Capture and dissociation in the complex-forming  $\text{CH}(v=0,1)+\text{D}_2 \rightarrow \text{CHD} + \text{H}, \text{CD}_2 + \text{H}, \text{CD} + \text{HD}$  and comparison with  $\text{CH}(v=0,1)+\text{H}_2$

Ref.  revista: Physical Chemistry Chemical Physics  Libro  
Clave: A Volumen: 13 Páginas, inicial: 13638 final: 13644 Fecha: 2011  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): P.G.Jambrina, E.Garcia, V.Herrero, V.Sáez-Rábanos, F.J.Aoiz  
Título: Can quasiclassical trajectory calculations reproduce the extreme kinetic isotope effect observed in the muonic isotopologues of the  $\text{H} + \text{H}_2$  reaction?

Ref.  revista: Journal of Chemical Physics  Libro  
Clave: A Volumen: 135 Páginas, inicial: 034310 final: (6 pág) Fecha: 2011  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E.Garcia, A.Laganà, D.Skouteris  
Título: An innovative computational comparison of exact and centrifugal sudden quantum properties of the  $\text{N} + \text{N}_2$  reaction

Ref.  revista: Physical Chemistry Chemical Physics  Libro  
Clave: A Volumen: 14 Páginas, inicial: 1589 final: 1595 Fecha: 2012  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E.Garcia, J.C.Corchado, J.Espinosa-García  
Título: A detailed product distribution analysis of some potential energy surfaces describing the  $\text{OH} + \text{CO} \rightarrow \text{H} + \text{CO}_2$  reaction

Ref.  revista: Computational and Theoretical Chemistry  Libro  
Clave: A Volumen: 990 Páginas, inicial: 47 final: 52 Fecha: 2012  
Editorial (si libro):  
Lugar de publicación:

---

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

---

Autores (p.o. de firma): A.Laganà, E.Garcia, A.Paladini, P.Casavecchia, N.Balucani

Título: The last mile of molecular reaction dynamics virtual experiments: the case of OH(N=1-10) + CO(j=0-3) reaction

Ref.  revista: Faraday Discussions

Libro

Clave: A Volumen: 157 Páginas, inicial: 415 final: 436 Fecha: 2012

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

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

Título: A classical versus quantum mechanics study of the OH + CO → H + CO<sub>2</sub>(J=0) reaction

Ref.  revista: Theoretical Chemistry Accounts

Libro

Clave: A Volumen: 131 Páginas, inicial: 1262 final: (11 pág.) Fecha: 2012

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): P.G.Jambrina, E.Garcia, V.Herrero, V.Sáez-Rábanos, 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

Libro

Clave: A Volumen: 14 Páginas, inicial: 14596 final: 14604 Fecha: 2012

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

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

Título: Understanding the reaction between muonium atom and hydrogen molecules: zero point energy, tunneling, and vibrational adiabaticity

Ref.  revista: Molecular Physics

Libro

Clave: A Volumen: 111 Páginas, inicial: 3169 final: 3181 Fecha: 2013

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): A.Kurnosov, M.Cacciatore, A.Laganà, F.Pirani, M. Bartolomei, E.Garcia

Título: The effect of the intermolecular potential formulation on the state-selected energy exchange rate coefficients in N<sub>2</sub>-N<sub>2</sub> collisions

Ref.  revista: Journal of Computational Chemistry

Libro

Clave: A Volumen: 35 Páginas, inicial: 722 final: 736 Fecha: 2014

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

---

Autores (p.o. de firma): E.Garcia, T.Martinez, A.Laganà.

Título: Quasi-resonant vibrational energy transfer in N<sub>2</sub>-N<sub>2</sub> collisions: Effect of the long-range interaction.

Ref.  revista: Chemical Physics Letters

Libro

Clave: A Volumen: 620 Páginas, inicial: 103 final: 108 Fecha: 2015

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E.Garcia , A.Kurnosov, A.Laganà, F.Pirani, M. Bartolomei, M.Cacciatore.

Título: Efficiency of collisional O<sub>2</sub>-N<sub>2</sub> vibrational energy exchange.

Ref.  revista: Journal of Physical Chemistry B

Libro

Clave: A Volumen: 120 Páginas, inicial: 1476 final: 1485 Fecha: 2016

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): L.Pacifici, M.Pastore, E.Garcia, A.Laganà, S.Rampino.

Título: A dynamics investigation of the C+CH<sup>+</sup> → C<sub>2</sub><sup>+</sup>+ H on an ab initio bond-order like potential.

Ref.  revista: Journal of Physical Chemistry A

Libro

Clave: A Volumen: 120 Páginas, inicial: 5125: final: 5135: Fecha: 2016

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): E.Garcia , A.Laganà, F.Pirani, M. Bartolomei, M.Cacciatore, A.Kurnosov.

Título: Enhanced Flexibility of the O<sub>2</sub>+N<sub>2</sub> Interaction and its Effect on Collisional Vibrational Energy Exchange.

Ref.  revista: Journal of Physical Chemistry A

Libro

Clave: A Volumen: 120 Páginas, inicial: 5208 final: 5219 Fecha: 2016

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

Autores (p.o. de firma): S.Rampino, M.Pastore, E.Garcia, L.Pacifici, A.Laganà.

Título: On the temperature dependence of the rate coefficient of formation of C<sub>2</sub><sup>+</sup> from C+CH<sup>+</sup>.

Ref.  revista: Monthly Notices of Royal Astronomical Societ

Libro

Clave: A Volumen: 460 Páginas, inicial:2368 final: 2375 Fecha: 2016

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

---

**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. Universidad de Perugia  
Localidad: Perugia                      País Italia                      Fecha: 1982                      Duración (semanas): 156  
Tema: Investigación  
Clave: D

---

Centro: IBM European Center for Scientific and Engineering Computing  
Localidad: Roma                      País Italia                      Fecha: 1987                      Duración (semanas): 7  
Tema: Investigación  
Clave: I

---

Centro: Departamento de Química. Universidad de Perugia.  
Localidad: Perugia                      País Italia                      Fecha: 1988                      Duración (semanas): 11  
Tema: Investigación  
Clave: I

---

Centro: Departamento de Química. Universidad de Perugia.  
Localidad: Perugia                      País Italia                      Fecha: 1990                      Duración (semanas): 4  
Tema: Investigación  
Clave: I

---

Centro: Departamento de Química. Universidad de Perugia.  
Localidad: Perugia                      País Italia                      Fecha: 1991                      Duración (semanas): 4  
Tema: Investigación  
Clave: I

---

Centro: Departamento de Química. Universidad de Perugia.  
Localidad: Perugia                      País Italia                      Fecha: 1994                      Duración (semanas): 4  
Tema: Investigación  
Clave: I

---

Centro: Departamento de Química. Universidad de Perugia.  
Localidad: Perugia                      País Italia                      Fecha: 1995                      Duración (semanas): 4  
Tema: Investigación  
Clave: I

---

Centro: Departamento de Química. Universidad de Perugia.  
Localidad: Perugia                      País Italia                      Fecha: 2008                      Duración (semanas): 9  
Tema: Investigación  
Clave: I

---

## Contribuciones a Congresos

---

Autores: J.M.Alvariño, F.Castaño, E.Martínez, E.G.Para

Título: Factores de Franck-Condon de las transiciones  $A1\Sigma^{++}-X1\Sigma^{+}$  y  $B3\Pi^{+-}-X1\Sigma^{+}$  de la molécula CuH

Tipo de participación: Comunicación

Congreso: XIX Reunión Bienal de la Sociedad Española de Química

Publicación:

Lugar celebración: Santander

Fecha: 1982

---

Autores: A.Laganà, E.García, J.M.Alvariño

Título: Mass and energy dependence of Franck-Condon structures for the  $X+YY(v)\rightarrow XY(v')+Y$  ( $X=H,D,T$ ;  $Y=F,Cl$ )

Tipo de participación: Comunicación

Congreso: XIVème Congrès des Chimistes Theoriciens d'Expression Latine

Publicación:

Lugar celebración: Lovaina. Bélgica

Fecha: 1983

---

Autores: E.García, A.Laganà

Título: A fit of the Li+HF potential energy surface

Tipo de participación: : Comunicación

Congreso: XVII Congresso Nazionale dell'Associazione Italiana di Chimica Fisica

Publicación:

Lugar celebración: Bari. Italia

Fecha: 1983

---

Autores: E.García, A.Laganà, J.M.Alvariño, M.L.Hernández

Título: An improvement of the Li+HF PES by means of quasiclassical calculations

Tipo de participación: : Comunicación

Congreso: 8th International Symposium on Gas Kinetics

Publicación:

Lugar celebración: Nottingham. Gran Bretaña

Fecha: 1984

---

Autores: E.García, A.Laganà

Título: Un fit per l'energia potenziale di sistemi reattivi

Tipo de participación: : Comunicación

Congreso: X Convegno Annuale del Settore di Fisica Atomica e Molecolare

Publicación:

Lugar celebración: Santa Margherita Ligure. Italia

Fecha: 1984

---

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

---

Autores: E.García, A.Laganà  
Título: A BEBO coordinate fit of reactive systems  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: XIX Congresso Nazionale dell'Associazione Italiana di Chimica Fisica

Publicación:

Lugar celebración: Pisa. Italia Fecha: 1984

---

Autores: P.Palmieri, E.García, A.Laganà  
Título: The Li+HCl reaction: A potential energy surface  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: 2nd European Congress of Atomic and Molecular Physics (ECAMP)

Publicación:

Lugar celebración: Amsterdam. Holanda Fecha: 1985

---

Autores: J.M.Alvariño, M.L.Hernández, E.García, A.Laganà  
Título: A theoretical study of the Li+HF reaction  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: Recents Advances in Molecular Reaction Dynamics

Publicación:

Lugar celebración: Aussois. Francia Fecha: 1985

---

Autores: L.Ciccarelli, E.García, A.Laganà  
Título: A quantum investigation of the Li+HCl reaction  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: Microsymposium on Elementary Processes and Chemical Reactivity

Publicación:

Lugar celebración: Praga. Checoslovaquia Fecha: 1985

---

Autores: E.García, A.Laganà  
Título: Quasiclassical rate constants for vibrational deactivation of hydrogen molecules by H atoms  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: XX Congresso Nazionale dell'Associazione Italiana di Chimica Fisica

Publicación:

Lugar celebración: Turín. Italia Fecha: 1985

---

---

Autores: L.Ciccarelli, E.García, A.Laganà  
Título: A quantum mechanical test for a LiHCl semiempirical surface  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: XX Congresso Nazionale dell'Associazione Italiana di Chimica Fisica

Publicación:

Lugar celebración: Turín. Italia

Fecha: 1985

---

Autores: A.Laganà, E.García, J.M.Alvariño, P.Palmieri  
Título: A dynamical investigation of the Li+HCl reaction  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: 9th International Symposium on Gas Kinetics

Publicación:

Lugar celebración: Burdeos. Francia

Fecha: 1986

---

Autores: A.Laganà, E.García  
Título: em Low and high temperature deactivation rate constants for hydrogen atom -- hydrogen molecules collisions  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: 8th European Sectorial Conference on the Atomic and Molecular Physics of Ionised Gases (ESCAMPIG)

Publicación:

Lugar celebración: Greifswald. R.D.A.

Fecha: 1986

---

Autores: A.Laganà, E.García  
Título: Vibrational energy enhancement in the nitrogen atom -- nitrogen molecule  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: XXI Congresso Nazionale dell'Associazione Italiana di Chimica Fisica

Publicación:

Lugar celebración: Siena. Italia

Fecha: 1986

---

Autores: A.Laganà, L.Ciccarelli, E.García  
Título: Vector performance of a potential energy functional representation  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: The Impact of Supercomputers on Chemistry (ISOC)

Publicación:

Lugar celebración: Londres. Gran Bretaña

Fecha: 1987

---

---

Autores: P.Palmieri, E.García, A.Laganà  
Título: A PES for the Li+HCl reaction  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: American Conference on Theoretical Chemistry

Publicación:

Lugar celebración: Gull Lake. EE.UU.

Fecha: 1987

---

Autores: E.García, A.Laganà, P.Palmieri  
Título: A potential energy surface for the Li+HCl reation  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: XXII Congresso Nazionale dell'Associazione Italiana di Chimica Fisica

Publicación:

Lugar celebración: Como. Italia

Fecha: 1987

---

Autores: A.Laganà, L.Ciccarelli, E.García  
Título: Approximate quantum techniques for atom – diatom reactions  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: NATO Workshop on Supercomputer Algorithms for Reactivity, Dynamics and Kinetics of Small Molecules

Publicación:

Lugar celebración: Colombella di Perugia. Italia

Fecha: 1988

---

Autores: A.Laganà, E.García, J.M.Alvariño  
Título: A.Laganà, E.García, J.M.Alvariño  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: NATO Workshop on Supercomputer Algorithms for Reactivity, Dynamics and Kinetics of Small Molecules

Publicación:

Lugar celebración: Colombella di Perugia. Italia

Fecha: 1988

---

Autores: A.Laganà, E.García, O.Gervasi  
Título: IOS cross sections for the Li+HF reaction  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: VII European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC)

Publicación:

Lugar celebración: Asís. Italia

Fecha: 1988

---

---

Autores: J.M.Alvariño, E.García, A.Laganà  
Título: Dynamics of the Mg+HF reaction  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: XII International Symposium on Molecular Beams

Publicación:

Lugar celebración: Perugia. Italia

Fecha: 1989

---

Autores: A.Laganà, M.Baer, E.García, O.Gervasi  
Título: An approximate three-dimensional study of the Li+HF->LiF+H reaction  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: XII International Symposium on Molecular Beams

Publicación:

Lugar celebración: Perugia. Italia

Fecha: 1989

---

Autores: O.Gervasi, E.García, A.Laganà, R.Baraglia,D.Laforenza, R.Perego  
Título: Distributed versus shared memory parallel calculations of quasiclassical rate constants  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: Parallel Computing for Chemical Reactivity

Publicación:

Lugar celebración: Perugia. Italia

Fecha: 1990

---

Autores: E.García, J.Mateos, A.Laganà  
Título: Temperature dependence for the H+H2 and D+D2 rate constants  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: XI International Symposium on Gas Kinetics

Publicación:

Lugar celebración: Asís. Italia

Fecha: 1990

---

Autores: A.Laganà, P.Palmieri, E.García, J.M.Alvariño  
Título: Calculated versus measured scattering and kinetic data for the Li+HCl reaction  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: XI International Symposium on Gas Kinetics

Publicación:

Lugar celebración: Asís. Italia

Fecha: 1990

---

---

Autores: A.Laganà, E.García, X.Giménez, J.M.Lucas, A.Aguilar  
Título: Infinite order sudden cross sections for the Li+HCl->LiCl+H and Li+HF->LiF+H reactions  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: VIII European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC)

Publicación:

Lugar celebración: Bernkastel-Kues. Alemania                      Fecha: 1990

---

Autores: E.García, A.Laganà  
Título: Temperature dependence for the N+N2 reaction  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: XIII International Symposium on Molecular Beams

Publicación:

Lugar celebración: El Escorial, Madrid                              Fecha: 1991

---

Autores: E.García, G.Ochoa de Aspuru, A.Laganà  
Título: Quantum vs quasiclassical calculations of N+N2 rate coefficients  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: I South European Conference on Atomic and Molecular Physics (SECAMP)

Publicación:

Lugar celebración: Gandía, Valencia                              Fecha: 1992

---

Autores: E.García, G.Ochoa de Aspuru, A.Laganà  
Título: An approximate 3D quantum study of N+N2 reaction  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: IX European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC)

Publicación:

Lugar celebración: Praga. Checoslovaquia                      Fecha: 1992

---

Autores: A.Laganà, S.Crocchianti, E.García, G.Ochoa de Aspuru, J.M.Alvariño  
Título: On H+ICI and K+ICI reactions  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: XVth International Symposium on Molecular Beams

Publicación:

Lugar celebración: Berlín. Alemania                              Fecha: 1993

---



---

Autores: E.García, A.Laganà, G.Ochoa de Aspuru  
Título: N+N<sub>2</sub> linear versus bent transition state quantum reaction dynamics and kinetics  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: Tenth European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC)

Publicación:

Lugar celebración: Salamanca

Fecha: 1994

---

Autores: E.García, A.Laganà, G.Ochoa de Aspuru, O.Gervasi  
Título: A new H+H<sub>2</sub> potential energy surface based on a rotating bond order formulation  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: 2nd South European Conference on Atomic and Molecular Physics (SECAMP)

Publicación:

Lugar celebración: Pisa. Italia

Fecha: 1994

---

Autores: E.García, M.T.Martínez, J.M.Alvariño, M.L.Hernández, A.Laganà  
Título: Quasiclassical trajectory test of the Na+FH potential energy surface  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: XIVth International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET)

Publicación:

Lugar celebración: Kloster Banz. Alemania

Fecha: 1995

---

Autores: E.García, M.T.Martínez, A.Laganà, A.Riganelli  
Título: Quasiclassical deactivation of vibrationally excited oxygen molecules by oxygen atoms  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: XIVth International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET)

Publicación:

Lugar celebración: Kloster Banz. Alemania

Fecha: 1995

---

Autores: E.García, M.T.Martínez, J.M.Alvariño, M.L.Hernández, A.Laganà  
Título:  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: A classical trajectory study of the {rm Na+HF} dynamics on a new potential

Publicación: Second Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics

Lugar celebración: Bilbao

Fecha: 1995

---

---

Autores: A.Laganà, G.Ochoa de Aspuru, A.Riganelli, E.García  
Título: A theoretical study of the  $\text{O}+\text{O}_2$  reaction excited  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: Air Quality'95

Publicación:

Lugar celebración: Pisa. Italia

Fecha: 1995

---

Autores: E.García, G.Ochoa de Aspuru, A.Laganà  
Título: An RIOS quantum study of the  $\text{O}(3P) + \text{O}_2 \rightarrow \text{O}_2 + \text{O}(3P)$  reaction  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: XI European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC)

Publicación:

Lugar celebración: Copenague. Dinamarca

Fecha: 1996

---

Autores: T.Martínez, E.García, J.M.Alvariño, A.Laganà  
Título: Propiedades estereodinámicas de la reacción  $\text{Na}+\text{FH} \rightarrow \text{NaF}+\text{H}$   
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: XXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Publicación:

Lugar celebración: Cáceres

Fecha: 1996

---

Autores: E.García, T.Martínez, A.Laganà  
Título: The effect of translational and rotational temperature on the detailed reactivity of  $\text{O}+\text{O}_2$   
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: 3rd South European Conference on Atomic and Molecular Physics (SECAMP)

Publicación:

Lugar celebración: Kos. Grecia

Fecha: 1996

---

Autores: E.García, A.Laganà  
Título: Accurate cross section and rate coefficient calculations for modelling vibrational kinetics in nonequilibrium flows  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: 1st Electronic Conference on Vibrational Kinetics in Nonequilibrium Flows

Publicación:

Lugar celebración: [ba.cnr.it/~cscpdg39/conferen/home.htm](http://ba.cnr.it/~cscpdg39/conferen/home.htm) Fecha: 1997

---

---

Autores: E.García, G.Ochoa de Aspuru, A.Laganà  
Título: A model potential energy surface of the O(1D)+HBr reaction and its dynamical test  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: Second European Conference on Computational Chemistry (EUCCO-CC2)

Publicación:

Lugar celebración: Lisboa. Portugal

Fecha: 1997

---

Autores: A.Rodríguez, E.García, A.Ceballos, G.Ochoa de Aspuru, A.Laganà  
Título: A quasiclassical trajectory test of a new LAGROBO potential energy surface of the OH+H<sub>2</sub> reaction  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: III Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics

Publicación:

Lugar celebración: Mira. Portugal

Fecha: 1998

---

Autores: E.García, T.Martínez, J.M.Alvariño, S.Crocchianti, A.Laganà  
Título: Quantum and classical stereodynamics of the Li+FH reaction  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: 6th European Conference on Atomic and Molecular Physics (ECAMP VI)

Publicación:

Lugar celebración: Siena. Italia

Fecha: 1998

---

Autores: A.Laganà, E.García  
Título: Rate coefficients under jet conditions  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: 6th European Conference on Atomic and Molecular Physics (ECAMP VI)

Publicación:

Lugar celebración: Siena. Italia

Fecha: 1998

---

Autores: A.Laganà, E.García  
Título: Rate coefficients under jet conditions  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: 6th European Conference on Atomic and Molecular Physics (ECAMP VI)

Publicación:

Lugar celebración: Siena. Italia

Fecha: 1998

---

---

Autores: A.Ceballos, E.García, A.Laganà  
Título: A quasiclassical trajectory study of the H<sub>2</sub>+H<sub>2</sub> reaction for a wide range of vibrational states  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: 15th International Symposium on Gas Kinetics

Publicación:

Lugar celebración: Bilbao

Fecha: 1998

---

Autores: E.García, A.Rodríguez, A.Ceballos, A.Laganà  
Título: Quasiclassical dynamics of the H<sub>2</sub>+H<sub>2</sub> reaction and dissociation  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)

Publicación:

Lugar celebración: Asís. Italia

Fecha: 1999

---

Autores: A.Rodríguez, E.García, A.Ceballos, A.Laganà  
Título: Quasiclassical kinetics and dynamics of the {OH+H<sub>2</sub> reaction  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: IBER2000: IV Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics

Publicación:

Lugar celebración: El Escorial (Madrid)

Fecha: 2000

---

Autores: E.García, A.Ceballos, A.Laganà  
Título: Isotopic effects in collision-induced dissociations: The H<sub>2</sub>+H<sub>2</sub> system  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: XIII European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC)

Publicación:

Lugar celebración: Jerusalem. Israel

Fecha: 2000

---

Autores: A.Rodríguez, E.García, J.M.Alvariño, A.Laganà  
Título: Classical state resolved product vibrational distribution of the <sup>18</sup>O<sup>18</sup>H+D<sub>2</sub> reaction  
Tipo de participación: : Comunicación  
Congreso: XIX International Symposium on Molecular Beams

Publicación:

Lugar celebración: Roma. Italia

Fecha: 2001

---

---

Autores: E.García, A.Rodríguez, J.M.Alvariño, A.Laganà  
Título: Quasiclassical trajectory test of a new analytical potential energy surface of the OH+HCl reaction  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: International Symposium on Electronic Structure and Chemical Reactivity

Publicación:

Lugar celebración: Barcelona

Fecha: 2001

---

Autores: A. Saracibar, E.García, A.Rodríguez, A.Laganà  
Título: A dynamical test of a new potential energy surface for the OH+H<sub>2</sub> reaction  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: 5th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics

Publicación:

Lugar celebración: Lisboa. Portugal

Fecha: 2002

---

Autores: E.García, M.T.Martínez, A.Laganà  
Título: Quasiclassical product distributions for the OH+CO reaction  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: XIV European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC)

Publicación:

Lugar celebración: Estambul. Turquía

Fecha: 2002

---

Autores: E.García, A.Laganà  
Título: Effect of the potential energy surface on the collision-induced dissociation of the H<sub>2</sub>+H<sub>2</sub> system  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: XVIII International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVIII)

Publicación:

Lugar celebración: San Lorenzo de El Escorial (Madrid)

Fecha: 2003

---

Autores: E.García, A.Rodríguez, J.M.Alvariño, A.Laganà  
Título: Quasiclassical trajectory test of a new analytical potential energy surface of the OH+HCl reaction  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: International Symposium on Electronic Structure and Chemical Reactivity

Publicación:

Lugar celebración: Barcelona

Fecha: 2001

---

---

Autores: A. Saracibar, E. García, A. Rodríguez, A. Laganà  
Título: A dynamical test of a new potential energy surface for the OH+H<sub>2</sub> reaction  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: 5th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics

Publicación:

Lugar celebración: Lisboa, Portugal

Fecha: 2002

---

Autores: E. García, M.T. Martínez, A. Laganà  
Título: Quasiclassical product distributions for the OH+CO reaction  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: XIV European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC)

Publicación:

Lugar celebración: Estambul, Turquía

Fecha: 2002

---

Autores: E. García, A. Laganà  
Título: Effect of the potential energy surface on the collision-induced dissociation of the H<sub>2</sub>+H<sub>2</sub> system  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: XVIII International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVIII)

Publicación:

Lugar celebración: San Lorenzo de El Escorial (Madrid)

Fecha: 2003

---

Autores: A. Saracibar, C. Sánchez, E. García, A. Laganà  
Título: Effect of the potential energy surface on the collision-induced dissociation of the H<sub>2</sub>+H<sub>2</sub> system  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: XXIX Reunión Bienal de las Reales Sociedades Españolas de Física y Química (Centenario de las Reales Sociedades Españolas de Física y Química, 1903-2003)  
6th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics.

Publicación:

Lugar celebración: Madrid

Fecha: 2003

---

Autores: C. Sánchez, A. Rodríguez, E. García, A. Laganà  
Título: GRID computing in quasiclassical trajectory calculations  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: XXIX Reunión Bienal de las Reales Sociedades Españolas de Física y Química (Centenario de las Reales Sociedades Españolas de Física y Química, 1903-2003)  
6th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics.

Publicación:

Lugar celebración: Madrid

Fecha: 2003

---

Autores: E.García, C.Sánchez, A.Laganà  
Título: Cálculo de coeficientes de velocidad de la reacción  $\text{Cl}+\text{CH}_4$  empleando trayectorias cuasiclásicas  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: 29ème Congrès International des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine

Publicación:

Lugar celebración: Marrakech (Marruecos)

Fecha: 2003

---

Autores: E. García, L. Piñeiro, A. Laganà  
Título: Full dimensional quasiclassical trajectory study of the  $\text{OH} + \text{CH}_4 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{CH}_3$  reaction  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: XV European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC XV)

Publicación:

Lugar celebración: Nunspeet (Holanda)

Fecha: 2004

---

Autores: E. García, A. Rodríguez, L. Zuazo, A. Laganà  
Título: Quasiclassical rate coefficients for the  $\text{OH} + \text{CO}$  reaction on ab initio potential energy surfaces  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA2004)

Publicación:

Lugar celebración: Valladolid

Fecha: 2004

---

Autores: O. Azula, E. García, A. Rodríguez, A. Laganà  
Título: On the branching ratio of the  $\text{OH}+\text{HD} \rightarrow \text{D}+\text{HOH}, \text{H}+\text{HOD}$  reaction  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: 7th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER-2005)

Publicación:

Lugar celebración: Lisboa (Portugal)

Fecha: 2005

---

Autores: L.Piñeiro,, E. García, A. Laganà  
Título: Isotopic effects for the  $\text{OH}+\text{CH}_4 \rightarrow \text{H}_2\text{O}+\text{CH}_3$  reaction  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: 7th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER-2005)

Publicación:

Lugar celebración: Lisboa (Portugal)

Fecha: 2005

---

Autores: L.Zuazo, E. García, A. Laganà  
Título: Isotopic effects for the OH+CO->H+CO2 reaction  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: 7th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER-2005)

Publicación:

Lugar celebración: Lisboa (Portugal)

Fecha: 2005

---

Autores: E. García, A.Saracibar, S.Gómez-Carrasco, A. Laganà  
Título: Modelling the global potential energy surface of the N+N2 reaction from ab initio data  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA-2006)

Publicación:

Lugar celebración: Santiago de Compostela

Fecha: 2006

---

Autores: A.Saracibar, E.Goldfield, E.García  
Título: Capture probabilities for the complex-forming CH+H2 -> CH2+H reaction  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: 8th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER-2006)

Publicación:

Lugar celebración: Aranjuez (Madrid)

Fecha: 2006

---

Autores: A.Saracibar, E. García, A. Laganà  
Título: Quasiclassical product distributions for the OH+CO reaction on the Leiden PES  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: XVI European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC XVI)

Publicación:

Lugar celebración: Trento. Italia

Fecha: 2006

---

Autores: N.Faginas-Lago, A.Laganà, E.García  
Título: Semiclassical and quantum reduced dimensionality calculations of the rate coefficient of the N+N2 reaction  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: XVI European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC XVI)

Publicación:

Lugar celebración: Trento. Italia

Fecha: 2006

---



---

Autores: A.Saracibar, E. García, D.Skouteris, A. Laganà  
Título: Quantum rate coefficients for the N+N<sub>2</sub> reaction on a potential energy surface with a bent transition state  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: 20th International Conference on Molecular Energy (COMET XX)

Publicación:

Lugar celebración: Arcachon. Francia Fecha: 2007

---

Autores: A.Saracibar, E. García, D.Skouteris, A. Laganà  
Título: CS vs J-shift cross sections for the N+N<sub>2</sub> reaction  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: 9th International Workshop on Quantum Reactive Scattering (QRS IX)

Publicación:

Lugar celebración: Cambridge. Reino Unido Fecha: 2007

---

Autores: E.García, A.Saracibar, C. Sánchez, A. Laganà  
Título: Effetto del momento angolare totale sulla dinamica del sistema H<sub>2</sub>+H<sub>2</sub>  
Tipo de participación: Comunicación Oral  
Congreso: XXXIV Congresso dei Chimici Teorici de Espressione Latina (CHITEL 08)

Publicación:

Lugar celebración: Cetraro. Italia Fecha: 2008

---

Autores: E.García, A.Saracibar, C. Sánchez, A. Laganà  
Título: Effetto del momento angolare totale sulla dinamica del sistema H<sub>2</sub>+H<sub>2</sub>  
Tipo de participación: Comunicación Oral  
Congreso: XXXIV Congresso dei Chimici Teorici de Espressione Latina (CHITEL 08)

Publicación:

Lugar celebración: Cetraro. Italia Fecha: 2008

---

Autores: E.García, A.Saracibar, S. Rampino, D. Skouteris, A. Laganà  
Título: Quantum rate coefficients for the N+N<sub>2</sub> reaction using an ab initio potential energy surface  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 08)

Publicación:

Lugar celebración: Palma de Mallorca Fecha: 2008

---

---

Autores: E.García, A.Saracibar, D.Skouteris, A.Laganà  
Título: Converged cross sections for the N + N<sub>2</sub> exchange reaction  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: 10th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER-2009)

Publicación:

Lugar celebración: Santiago de Compostela Fecha: 2009

---

Autores: E.García, A.Saracibar, D.Skouteris, A.Laganà  
Título: Centrifugal Sudden vs exact calculations for the N + N<sub>2</sub> ( $J \leq 8$ ) exchange reaction  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: 10th European Conference on Atoms, Molecules and Photons (ECAMP10)

Publicación:

Lugar celebración: Salamanca Fecha: 2010

---

Autores: A.Saracibar, E.García, J.D.Sierra, M.González  
Título: Theoretical study of the kinetics of the CH+H<sub>2</sub>→CH<sub>2</sub>+H complex-forming reaction  
Tipo de participación: Comunicación Oral  
Congreso: 21th International Symposium on Gas Kinetics (GK2010)

Publicación:

Lugar celebración: Leuven (Bélgica) Fecha: 2010

---

Autores: E.García, A.Saracibar, J.D.Sierra, M.González  
Título: OCT study of the CH+D<sub>2</sub> complex-forming reaction kinetics  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: XVIII European Conference on Dynamics of Molecular Systems (MOLEC-2010)

Publicación:

Lugar celebración: Curia/Anadia (Portugal) Fecha: 2010

---

Autores: E.García  
Título: COMPCHEM Virtual Organization  
Tipo de participación: Comunicación Oral  
Congreso: 5ª Reunion Plenaria de la Red Española de e-Ciencia

Publicación:

Lugar celebración: Santander Fecha: 2011

---

---

Autores: E.García, M.González  
Título: QCT simulation of a CH+D2 -> CD + HD molecular beam experiment  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: XXIVth International Symposium on Molecular Beams (ISMB24)

Publicación:

Lugar celebración: Burdeos (Francia) Fecha: 2011

---

Autores: P.G.Jambrina, E.García, V.J.Herrero, V.Sáez-Rábanos, F.J.Aoiz  
Título: A quasiclassical interpretation of the extreme kinetic isotope effect observed in the muonic variants of the H+H2 reaction  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: 11th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2011)

Publicación:

Lugar celebración: Coimbra (Portugal) Fecha: 2011

---

Autores: E.García, M.González  
Título: QCT study of the CD + D2 reaction kinetics  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: Conference on molecular energy transfer (COMET2011)

Publicación:

Lugar celebración: Oxford (Reino Unido) Fecha: 2011

---

Autores: E.García  
Título: Herramientas de soporte a usuarios: GRIF  
Título: Usuarios de la Infraestructura: Reacciones químicas en la atmósfera y en combustión  
Tipo de participación: Comunicaciones Orales  
Congreso: Jornadas de Usuarios de Infraestructuras GRID

Publicación:

Lugar celebración: Madrid Fecha: 2012

---

Autores: E.García, F.J.Aoiz, A.Laganà  
Título: A classical versus quantum mechanics study of the OH+CO → H+CO2 (J=0) reaction  
Tipo de participación: Comunicación  
Congreso: XIX European Conference on the Dynamics of Molecular Systems (MOLEC2012)

Publicación:

Lugar celebración: Oxford. Reino Unido Fecha: 2012

---

---

Autores: E.García, P.G.Jambrina, M.Menéndez, F.J.Aoiz.

Título: Quantum and quasiclassical simulation of molecular beam experiments on  $\text{Li}+\text{FH}\rightarrow\text{LiF}+\text{H}$ .

Tipo de participación: Comunicación

Congreso: XXVI International Symposium on Molecular Beams (ISMB2015).

Publicación:

Lugar celebración: Segovia (España)

Fecha: 2015

---

Autores: E.García, P.G.Jambrina, M.Menéndez, F.J.Aoiz.

Título: On the translational energy threshold of the  $\text{Li}+\text{FH}\rightarrow\text{LiF}+\text{H}$  reaction.

Tipo de participación: Comunicación

Congreso: XIII International Workshop on Quantum Reactive Scattering (QRS2015).

Publicación:

Lugar celebración: Salamanca (España)

Fecha: 2015

---

---

Autores: P.G.Jambrina, R.Pérez de Tudela, E.García, V.J.Herrero, V.Sáez-Rábanos, F.J.Aoiz

Título: Dynamics of the reaction of muonium atoms with hydrogen molecules: Zero point energy, tunneling and vibrational adiabaticity

Tipo de participación: Comunicación

Congreso: XIX European Conference on the Dynamics of Molecular Systems (MOLEC2012)

Publicación:

Lugar celebración: Oxford. Reino Unido

Fecha: 2012

---

## Tesis Doctorales dirigidas

---

Título: : Estudio teórico de las reacciones atmosféricas O(1D)+HCl, O(1D)+HBr, O(1D)+CF<sub>3</sub>Br y O(3P)+O<sub>2</sub>

Doctorando: Guillermo Ochoa de Aspuru Berriozábal  
Universidad: Universidad del País Vasco  
Facultad / Escuela: Departamento de Química Física  
Fecha: 1996

---

Título: Dinámica y cinética de las reacciones OH+H<sub>2</sub>, H+H<sub>2</sub>O, OH+HCl y Cl+H<sub>2</sub>O

Doctorando: Aurelio Rodríguez López  
Universidad: Universidad del País Vasco  
Facultad / Escuela: Departamento de Química Física  
Fecha: 2001

---

Título: Quantum rate coefficients for triatomic and tetraatomic reactions

Doctorando: Amaia Sarcibar Ruiz de Ocenda  
Universidad: Universidad del País Vasco  
Facultad / Escuela: Programa de Doctorado Intervuniversitario Química Teórica y Computacional  
Fecha: 2007

---

Título: Computación de alto rendimiento en Dinámica Química

Doctorando: Carlos Sánchez Orive  
Universidad: Universidad del País Vasco  
Facultad / Escuela: Programa de Doctorado Intervuniversitario Química Teórica y Computacional  
Fecha: 2011

---

Título: Efecto de los aerosoles sobre las reacciones fotoquímicas involucradas en la formación de ozono troposférico.

Doctorando: Oier Azula Aurrekoetxea  
Universidad: Universidad del País Vasco  
Facultad / Escuela: Programa de Doctorado Intervuniversitario Ingeniería Ambiental  
Fecha: 2011

---

---

**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: Comité de Gestión de la Acción D9 del Programa de COST de Cooperación Científica y Técnica en Química (Representante por España)

Entidad de la que depende: Unión Europea

Tema: Química computacional avanzada para sistemas de complejidad creciente

Fecha: 2000-2002

---

Título del Comité: Comité de Gestión de la Acción D23 del Programa de COST de Cooperación Científica y Técnica en Química (Representante por España)

Entidad de la que depende: Unión Europea

Tema: METAQUIM: Metalaboratorios para aplicaciones computacionales complejas

Fecha: 2001-2005

---

---

**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: Second Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics

Tipo de actividad: Miembro del comité organizador      Ambito: España y Portugal

Fecha: 1995

---

Título: 15th International Symposium on Gas Kinetics

Tipo de actividad: Miembro del comité organizador      Ambito: Internacional

Fecha: 1998

---

---

**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).

---

Valoración positiva por la Comisión Nacional de Evaluación de la Actividad Investigadora de los cinco sexenios solicitados (1983-1988, 1989-1994, 1995-2000, 2001-2006 y 2007-2012)

Miembro del Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular (GEFAM) desde su creación (1988) y vocal de la Junta Directiva (2005-2009).



---

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

---

## **Currículum Vitae**

Nombre: ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ

Fecha: 30-09-2016

Número de hojas que contiene: 41

El arriba firmante declara que son ciertos los datos que figuran en este currículum, asumiendo en caso contrario las responsabilidades que pudieran derivarse de las inexactitudes que consten en el mismo.

**APELLIDOS: JUNQUERA GONZÁLEZ**

**NOMBRE: ELENA** **SEXO: MUJER**

**DNI:** **FECHA DE NACIMIENTO:**

**Nº FUNCIONARIO:**

**DIRECCION PARTICULAR:**

**CIUDAD:** **CODIGO POSTAL:** **TELEFONO:**

**ESPECIALIZACIÓN (Códigos UNESCO): 2307, 221004, 221005, 221016, 221019, 221030, 221032**

---

### FORMACIÓN ACADÉMICA

<u>Titulación Superior</u>	<u>Centro</u>	<u>Fecha</u>
LICENCIADO C. QUIMICAS	FAC. CC. QUÍMICAS, UCM	1988
<u>Doctorado</u>	<u>Centro</u>	<u>Fecha</u>
CIENCIAS QUIMICAS	FAC. CC. QUIMICAS, UCM	1992
<i>DIRECTOR DE TESIS: EMILIO AICART Y GLORIA TARDAJOS</i>		
<u>Master</u>	<u>Centro</u>	<u>Fecha</u>
Evaluación Impacto Ambiental	UPM	1995
Planificación y Gestión Ambiental	UPM	1995

---

### SITUACIÓN PROFESIONAL ACTUAL

**ORGANISMO:** UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

**FACULTAD, ESCUELA o INSTITUTO DEL C.S.I.C.:** FACULTAD DE CIENCIAS QUIMICAS

**DEPT./SECC./ UNIDAD ESTR.:** DEPARTAMENTO DE QUIMICA FISICA I

**CATEGORIA PROFESIONAL Y FECHA DE INICIO:**

CATEDRÁTICO DE UNIVERSIDAD (18-11-2014).

**DIRECCION POSTAL:** 28040-MADRID

**TELEFONO (indicar prefijo, número y extensión):** Tlf.: 91-394-4131 Fax: 91-394-4135

**CORREO ELECTRÓNICO:** [junquera@ucm.es](mailto:junquera@ucm.es)

**Researcher ID:** C-7578-2015

**Código ORCID:** 0000-0002-0655-5782

**Situación administrativa**

Plantilla  Contratado Interino Becario

Otras situaciones especificar:

**Dedicación:** A tiempo completo

A tiempo parcial

## ACTIVIDADES ANTERIORES DE CARACTER CIENTIFICO O PROFESIONAL

<u>Puesto</u>	<u>Institución</u>	<u>Fechas</u>
Becario PFPI	Fac. C.C. Químicas, UCM	1989-91
Becario Predoctoral PFPI	Department of Chemistry, University of Saskatchewan, Canadá	1990
Prof. Ayudante Esc. Univ.	Fac. C.C. Químicas, UCM	1991-92
Prof. Ayudante Universidad	Fac. C.C. Químicas, UCM	1992-97
Estancia Postdoctoral	Grupo de Carbohidratos, Instituto de Química Orgánica, CSIC	1994-95
Estancia Postdoctoral (Beca Del Amo)	Department of Chemistry, University Of California, Irvine	1997-98
Profesor Asociado	Fac. C.C. Químicas, UCM	1997-1999
Profesor Titular	Fac. C.C. Químicas, UCM	2000-2014
Catedrático Universidad	Fac. C.C. Químicas, UCM	2014-cont

### LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

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

CICLODEXTRINAS, FARMACOS, TENSIOACTIVOS, CARBOHIDRATOS, COMPLEJOS DE INCLUSION, RECONOCIMIENTO MOLECULAR, BIOTERMODINAMICA, ELECTROQUIMICA, QUÍMICA PEPTIDOMIMÉTICA, FLUORESCENCIA, UV-VIS, RMN, CALORIMETRÍA, MICELAS MIXTAS, VESÍCULAS, LIPOSOMAS, SOLUBILIZACIÓN, SISTEMAS COLOIDALES, SISTEMAS COMPLEJOS, FENÓMENOS DE AUTO-ORGANIZACIÓN, LIPOPLEJOS, MEMBRANAS, TURBIDIMETRÍA, ELECTROACÚSTICA, QUÍMICA COLOIDAL Y SUPRAMOLECULAR, SURFOPLEJOS, TERAPIA GÉNICA, DNA, NANOESTRUCTURAS COLOIDALES, NANOCOMPACTACIÓN, siRNAs, CORONA DE PROTEINAS, PROTEOMICA, TRANSFECCIÓN, SILENCIAMIENTO GÉNICO, CITOTOXICIDAD, CRIO-TEM, SAXS, INTERNALIZACIÓN CELULAR

### IDIOMAS DE INTERES CIENTIFICO (R=regular,B=bien,C=correctamente)

<i>IDIOMA</i>	<i>HABLA</i>	<i>LEE</i>	<i>ESCRIBE</i>
INGLES	C	C	C
ITALIANO	C	C	C
FRANCES	-	R	R

## PARTICIPACION EN PROYECTOS DE INVESTIGACION FINANCIADOS

- 
- 0.- *Título del proyecto:* Estudio conformacional de moléculas y macromoléculas disueltas en micelas y microemulsiones mediante una técnica de absorción ultrasónica. (PB86-568)  
*Entidad financiadora:* CAICYT  
*Duración, desde:* Nov. 1987 *hasta:* Octubre 1990 *Cuántía de la subvención:* 5.500.000 pta.  
*Investigador responsable:* GLORIA TARDAJOS RODRIGUEZ  
*Número de investigadores participantes:* 5 (participación como becaria durante 1988, 1989 y 1990)
- 
- 1.- *Título del proyecto:* Cinética de sistemas mimetizadores de membranas mediante una técnica de absorción ultrasónica. (PB89-113)  
*Entidad financiadora:* DGICYT  
*Duración, desde:* Nov. 1990 *hasta:* Octubre 1993 *Cuántía de la subvención:* 8.500.000 pta.  
*Investigador responsable:* GLORIA TARDAJOS RODRIGUEZ  
*Número de investigadores participantes:* 6
- 
- 2.- *Título del proyecto:* Nuevas Tecnologías: Nuevos Materiales. (EC300-92)  
*Entidad financiadora:* Comunidad Autónoma de Madrid  
*Duración, desde:* Enero 1993 *hasta:* Dic. 1993 *Cuántía de la subvención:* 5.500.000 pta.  
*Investigador responsable:* EMILIO AICART SOSPEDRA  
*Número de investigadores participantes:* 5
- 
- 3.- *Título del proyecto:* Microencapsulación de tensoagentes por formación de complejos de inclusión con ciclodextrinas o éteres-corona y su aplicación a la depuración de aguas residuales. (PB92-229)  
*Entidad financiadora:* DGICYT  
*Duración, desde:* Junio 1993 *hasta:* Mayo 1996 *Cuántía de la subvención:* 4.000.000 pta.  
*Investigador responsable:* EMILIO AICART SOSPEDRA  
*Número de investigadores participantes:* 4
- 
- 4.- *Título del proyecto:* Espectrofotómetro UV-VIS con esfera integradora y controlador de temperatura. (IN95-508)  
*Entidad financiadora:* CICYT  
*Duración, desde:* Enero 1996 *hasta:* Dic. 1996 *Cuántía de la subvención:* 13.500.000 pta.  
*Investigador responsable:* REYES JIMENEZ APARICIO  
*Número de investigadores participantes:* 12
- 
- 5.- *Título del proyecto:* Físicoquímica de la hidratación específica de carbohidratos y de su reconocimiento molecular por receptores modelo (ciclodextrinas y glicofanos). (PB95-356)  
*Entidad financiadora:* DGES  
*Duración, desde:* Nov. 1996 *hasta:* Octubre 1999 *Cuántía de la subvención:* 5.000.000 pta.  
*Investigador responsable:* EMILIO AICART SOSPEDRA  
*Número de investigadores participantes:* 4
- 
- 6.- *Título de la Red Temática:* Microencapsulation for low cost, high volume pharmaceutical applications. (ERB BRRT-CT98-5100)  
*Entidad financiadora:* COMUNIDAD EUROPEA (Industrial and Materials Technol. Programme)  
*Duración, desde:* Enero 1999 *hasta:* Dic. 2001 *Cuántía de la subvención:* 15.240 €  
*Investigador responsable de la UCM:* EMILIO AICART SOSPEDRA  
*Número de investigadores participantes de la UCM:* 3
-

- 
- 7.- *Título del Proyecto:* Caracterización químico-física de fármacos. Mejora de su biodisponibilidad por microencapsulación con nuevos excipientes. (PB98-755)  
*Entidad financiadora:* DGES  
*Duración, desde:* Dic. 1999 *hasta:* Nov. 2002 *Cuantía de la subvención:* 6.600.000 pta.  
*Investigador responsable:* EMILIO AICART SOSPEDRA  
*Número de investigadores participantes:* 3
- 
- 8.- *Título del Proyecto:* Agregados supramoleculares: micelas mixtas y vesículas. Caracterización estructural, estabilidad coloidal y vectorización de moléculas con interés biológico. (BQU2002-586)  
*Entidad financiadora:* MICYT  
*Duración, desde:* Nov. 2002 *hasta:* Oct. 2005 *Cuantía de la subvención:* 54.250 €  
*Investigador responsable:* EMILIO AICART SOSPEDRA  
*Número de investigadores participantes:* 4
- 
- 9.- *Título del Proyecto:* Auto-organización y reconocimiento molecular en nanoestructuras coloidales. (CTQ2005-01106BQU).  
*Entidad financiadora:* MEC  
*Duración, desde:* Oct. 2005 *hasta:* Abril 2009 *Cuantía de la subvención:* 85300 €  
*Investigador responsable:* ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ  
*Número de investigadores participantes:* 4
- 
- 10.- *Título del Proyecto:* Lipoplejos (genosomas): Vectores coloidales de transferencia genética.  
*Entidad financiadora:* BSCH-UCM PR27/05-14049  
*Duración, desde:* Dic. 2005 *hasta:* Dic. 2007 *Cuantía de la subvención:* 5000 €  
*Investigador responsable:* ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ  
*Número de investigadores participantes:* 4
- 
- 11.- *Título del Proyecto:* Reconocimiento molecular y fisicoquímica de sustratos de interés biológico con nanoestructuras coloidales y supramoleculares. (910447)  
*Entidad financiadora:* UCM - CAM Programa anual de financiación de la CAM a Grupos de Investigación UCM consolidados  
*Duración, desde:* Dic. 2005 *hasta:* Dic. 2006 *Cuantía de la subvención:* 6600 €  
*Investigadores responsables:* EMILIO AICART SOSPEDRA y ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ  
*Número de investigadores participantes:* 4
- 
- 12.- *Título del Proyecto:* Sistemas coloidales de tensioactivos mezclados: micelas, vesículas y liposomas mixtos. (A/3263/05)  
*Entidad financiadora:* AECI  
*Duración, desde:* Enero. 2006 *hasta:* Dic. 2006 *Cuantía de la subvención:* 8400 €  
*Investigador responsable:* EMILIO AICART SOSPEDRA  
*Número de investigadores participantes:* 7
- 
- 13.- *Título del Proyecto:* Equipo de relajación ultrasónica. (UCMA05-33-010)  
*Entidad financiadora:* MEC-UCM  
*Duración, desde:* Enero 2006 *hasta:* Dic. 2008 *Cuantía de la subvención:* 126.200.- €  
*Investigador responsable:* EMILIO AICART SOSPEDRA  
*Número de investigadores participantes:* 14
-

- 
- 14.- *Título del Proyecto:* Red de Transferencia Tecnológica COLINTER (CTQ2006-27199-E/PPQ)  
*Entidad financiadora:* MEC  
*Duración, desde:* Enero. 2007 *hasta:* Enero 2008 *Cuantía de la subvención:* 12000 €  
*Investigador responsable:* ROQUE HIDALGO ALVAREZ  
*Número de investigadores participantes:* 26 grupos de investigación
- 
- 15.- *Título del Proyecto:* Aproximación multidimensional a la identificación y caracterización de nuevas dianas terapéuticas y al desarrollo de nuevos fármacos mediante el empleo de química modular, nanocristales semiconductores (*quantum dots*) y proteómica. (S-SAL-0249-2006)  
*Entidad financiadora:* CAM  
*Duración, desde:* Enero. 2007 *hasta:* Dic. 2010 *Cuantía de la subvención:* 700000 €  
*Investigador responsable:* MARÍA LUZ LÓPEZ RODRÍGUEZ, EMILIO AICART SOSPEDRA, ROBERTO FERNÁNDEZ DE LA PRADILLA SAINZ DE AJA  
*Número de investigadores participantes:* 21
- 
- 16.- *Título del Proyecto:* Reconocimiento molecular y fisicoquímica de sustratos de interés biológico con nanoestructuras coloidales y supramoleculares. (910447)  
*Entidad financiadora:* UCM - CAM Programa anual de financiación de la CAM a Grupos de Investigación UCM consolidados  
*Duración, desde:* Dic. 2006 *hasta:* Dic. 2007 *Cuantía de la subvención:* SIN FINANCIACIÓN VALORACIÓN POSITIVA  
*Investigadores responsables:* EMILIO AICART SOSPEDRA y ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ  
*Número de investigadores participantes:* 4
- 
- 17.- *Título del Proyecto:* Reconocimiento molecular y fisicoquímica de sustratos de interés biológico con nanoestructuras coloidales y supramoleculares. (910447)  
*Entidad financiadora:* UCM - CAM Programa anual de financiación de la CAM a Grupos de Investigación UCM consolidados  
*Duración, desde:* Ene. 2008 *hasta:* Dic. 2008 *Cuantía de la subvención:* 4.994,17 €  
*Investigadores responsables:* EMILIO AICART SOSPEDRA y ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ  
*Número de investigadores participantes:* 4
- 
- 18.- *Título del Proyecto:* Nanocompactación Coloidal del ADN: Una Aproximación Experimental y Teórica (FIS2008-06197-C02-01/FIS)  
*Entidad financiadora:* MICINN  
*Duración, desde:* Enero 2009 *hasta:* Diciembre 2009 *Cuantía de la subvención:* 20000 €  
*Investigador responsable:* ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ  
*Número de investigadores participantes:* 4
- 
- 19.- *Título del Proyecto:* Reconocimiento molecular y fisicoquímica de sustratos de interés biológico con nanoestructuras coloidales y supramoleculares. (ref . 910447), (GR58/08)  
*Entidad financiadora:* SCH-UCM. Programa anual de financiación a Grupos de Investigación UCM consolidados  
*Duración, desde:* Enero 2009 *hasta:* Dic. 2010  
*Cuantía de la subvención:* 4450.- €  
*Investigador responsable:* EMILIO AICART SOSPEDRA y ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ  
*Número de investigadores participantes:* 5
-



- 
- 20.- *Título del Proyecto:* Compactación del ADN mediante nanoagregados coloidales: Lipoplejos y Surfoplejos (CTQ2009-10002)  
*Entidad financiadora:* MICINN  
*Duración, desde:* Enero 2010 *hasta:* Diciembre 2012  
*Cuantía de la subvención:* 78.000 €  
*Investigador responsable:* ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ  
*Número de investigadores participantes:* 5
- 
- 21.- *Título del Proyecto:* Transfection and compaction of nucleic acid with novel gemini lipids: developing new formulations for potential use of lipoplexes in gene therapy (Compactación de DNA/siRNA con nuevos lípidos gemini: Transfección de formulaciones en terapia génica)  
*Entidad financiadora:* MICINN (JOINT PROGRAMME OF COOPERATION IN SCIENCE AND TECHNOLOGY) MICINN-ACI2009-0867  
*Duración, desde:* Ene. 2010 *hasta:* Dic. 2012  
*Cuantía de la subvención:* 56.000.- €  
*Investigadores responsables del equipo español:* EMILIO AICART SOSPEDRA y ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ  
*Número de investigadores participantes:* 8
- 
- 22.- *Título del Proyecto:* Reconocimiento molecular y fisicoquímica de sustratos de interés biológico con nanoestructuras coloidales y supramoleculares. (ref . 910447), (GR35/10-A)  
*Entidad financiadora:* SCH-UCM. Programa anual de financiación a Grupos de Investigación UCM consolidados  
*Duración, desde:* Enero 2011 *hasta:* Dic. 2011  
*Cuantía de la subvención:* 2328.- €  
*Investigador responsable:* EMILIO AICART SOSPEDRA y ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ  
*Número de investigadores participantes:* 5
- 
- 23.- *Título del Proyecto:* Nuevos vectores coloidales biocompatibles de compactacion y transfeccion del DNA o siRNA: Una aproximacion multidisciplinar (CTQ2012-30821)  
*Entidad financiadora:* MINECO  
*Duración, desde:* Enero 2013 *hasta:* Diciembre 2015  
*Cuantía de la subvención:* 81.000 €  
*Investigador responsable:* ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ  
*Número de investigadores participantes:* 5
- 
- 24.- *Título del Proyecto:* Reconocimiento molecular y fisicoquímica de sustratos de interés biológico con nanoestructuras coloidales y supramoleculares. (ref . 910447), (GR3/14)  
*Entidad financiadora:* SCH-UCM. Programa anual de financiación a Grupos de Investigación UCM consolidados  
*Duración, desde:* Enero 2015 *hasta:* Nov. 2015 *Cuantía de la subvención:* 1146,51.- €  
*Investigador responsable:* EMILIO AICART SOSPEDRA y ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ  
*Número de investigadores participantes:* 5
- 
- 25.- *Título del Proyecto:* Macrocielos policatiónicos como vectores de ácidos nucleicos (pDNAs y siRNAs): un planteamiento pluridisciplinar en terapia génica  
*Entidad financiadora:* MEC (CTQ2015-65972-R)  
*Duración, desde:* 01-01-2016 *hasta:* 31-12-2018 *Cuantía de la subvención:* 74.000.- €  
*Investigador responsable:* ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ  
*Número de investigadores participantes:* 3
-

## PUBLICACIONES

---

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

---

- 1.- *Autores:* E. Junquera, G. Tardajos y E. Aicart  
*Título:* Speeds of sound and isentropic compressibilities of (cyclohexane + benzene) and (1-chlorobutane + n-hexane or n-heptane or n-decane) at 298.15 K.  
*Ref. revista / Libro:* J. CHEMICAL THERMODYNAMICS  
*Clave:* A *Volumen:* 20 *Páginas, inicial:* 1461 *final:* 1467 *Fecha:* 1988

---

- 2.- *Autores:* E. Junquera, E. Aicart y G. Tardajos  
*Título:* Speed of sound and isentropic compressibility of (1-chlorobutane + n-undecane or n-dodecane or n-hexadecane) at 298.15 K.  
*Ref. revista / Libro:* J. CHEMICAL THERMODYNAMICS  
*Clave:* A *Volumen:* 21 *Páginas, inicial:* 1223 *final:* 1230 *Fecha:* 1989

---

- 3.- *Autores:* E. Aicart, M. Costas, E. Junquera y G. Tardajos  
*Título:* Ultrasonic speeds and isentropic compressibilities of (1,4-dioxane + n-heptane or n-decane or n-tetradecane).  
*Ref. revista / Libro:* J. CHEMICAL THERMODYNAMICS  
*Clave:* A *Volumen:* 22 *Páginas, inicial:* 1153 *final:* 1158 *Fecha:* 1990

---

- 4.- *Autores:* A. D. Matilla, G. Tardajos, E. Junquera y E. Aicart  
*Título:* Thermodynamic properties for binary liquid mixtures of 1-chlorobutane + n-alkanes.  
*Ref. revista / Libro:* J. SOLUTION CHEMISTRY  
*Clave:* A *Volumen:* 20 *Páginas, inicial:* 805 *final:* 816 *Fecha:* 1991

---

- 5.- *Autores:* E. Junquera, E. Aicart y G. Tardajos  
*Título:* Inclusional complexes of decyltrimethylammonium bromide and  $\beta$ -cyclodextrin in water.  
*Ref. revista / Libro:* J. PHYSICAL CHEMISTRY  
*Clave:* A *Volumen:* 96 *Páginas, inicial:* 4533 *final:* 4537 *Fecha:* 1992

---

- 6.- *Autores:* D. J. Jobe, R. E. Verrall, E. Junquera y E. Aicart  
*Título:* Effects of surfactant/ $\beta$ -cyclodextrin complex formation on the surfactant monomer-micelle exchange rate in aqueous solutions of decyltrimethylammonium bromide.  
*Ref. revista / Libro:* J. PHYSICAL CHEMISTRY  
*Clave:* A *Volumen:* 97 *Páginas, inicial:* 1243 *final:* 1248 *Fecha:* 1993

---

- 7.- *Autores:* E. Junquera, G. Tardajos y E. Aicart  
*Título:* Effect of the presence of  $\beta$ -cyclodextrin on the micellization process of sodium dodecylsulfate or sodium perfluorooctanoate in water.  
*Ref. revista / Libro:* LANGMUIR  
*Clave:* A *Volumen:* 9 *Páginas, inicial:* 1213 *final:* 1219 *Fecha:* 1993

---

- 8.- *Autores:* E. Junquera, G. Tardajos y E. Aicart  
*Título:* Study of the 2,6-di-O-methyl- $\beta$ -cyclodextrin + hexadecyltrimethylammonium bromide + water from speed of sound measurements.  
*Ref. revista / Libro:* J. COLLOID INTERFACE SCIENCE  
*Clave:* A *Volumen:* 158 *Páginas, inicial:* 388 *final:* 394 *Fecha:* 1994

---

- 
- 9.- *Autores:* G. Tardajos, [E. Junquera](#) y E. Aicart  
*Título:* Isothermal compressibility and isobaric thermal expansivity of linear and branched hexanols at 298.15 K.  
*Ref. revista / Libro:* J. CHEMICAL ENGINEERING DATA  
*Clave:* A *Volumen:* 39 *Páginas, inicial:* 349 *final:* 350 *Fecha:* 1994
- 
- 10.- *Autores:* [E. Junquera](#), J. González-Benito, L. Peña y E. Aicart  
*Título:* Encapsulation processes of dodecyltrimethylammonium bromide into the  $\beta$ -cyclodextrin or 2,6-di-O-methyl- $\beta$ -cyclodextrin cavities from speed of sound data.  
*Ref. revista / Libro:* J. COLLOID INTERFACE SCIENCE  
*Clave:* A *Volumen:* 163 *Páginas, inicial:* 355 *final:* 361 *Fecha:* 1994
- 
- 11.- *Autores:* [E. Junquera](#), L. Peña y E. Aicart  
*Título:* Influence of temperature on the micellization of sodium dodecylsulfate in water from speed of sound measurements.  
*Ref. revista / Libro:* J. SOLUTION CHEMISTRY  
*Clave:* A *Volumen:* 23 *Páginas, inicial:* 421 *final:* 430 *Fecha:* 1994
- 
- 12.- *Autores:* [E. Junquera](#) y E. Aicart  
*Título:* A fully computerized technique to measure conductivity in liquid mixtures.  
*Ref. revista / Libro:* REVIEW SCIENTIFIC INSTRUMENTS  
*Clave:* A *Volumen:* 65 *Páginas, inicial:* 2672 *final:* 2674 *Fecha:* 1994
- 
- 13.- *Autores:* D. J. Jobe, R. E. Verrall, [E. Junquera](#) y E. Aicart  
*Título:* Effects of  $\beta$ -cyclodextrin/surfactant complex formation on the surfactant monomer-micelle exchange rate in aqueous solutions of sodium perfluorooctanoate and  $\beta$ -cyclodextrin.  
*Ref. revista / Libro:* J. PHYSICAL CHEMISTRY  
*Clave:* A *Volumen:* 98 *Páginas, inicial:* 10814 *final:* 10818 *Fecha:* 1994
- 
- 14.- *Autores:* E. Aicart, [E. Junquera](#), B. Skalski, D. J. Jobe y R. E. Verrall  
*Título:* Estudio de sistemas micelares en presencia de alcoholes mediante medidas de conductividad, relajación ultrasónica y fluorescencia inducida por láser.  
*Ref. Libro:* PROPIEDADES, CARACTERIZACIÓN Y APLICACIONES DE LOS SISTEMAS COLOIDALES. ISBN: 84-8138-035-0  
*Editorial:* Serv. Pub. Univ. Alcalá de Henares (España)  
*Clave:* CL *Volumen:* 1 *Páginas, inicial:* 135 *final:* 145 *Fecha:* 1994
- 
- 15.- *Autores:* D. J. Jobe, R. E. Verrall, [E. Junquera](#), L. Peña, J. González y E. Aicart  
*Título:* Caracterización de los complejos de inclusión ciclodextrina/surfactante en disolución acuosa.  
*Ref. Libro:* PROPIEDADES, CARACTERIZACIÓN Y APLICACIONES DE LOS SISTEMAS COLOIDALES. ISBN: 84-8138-035-0  
*Editorial:* Serv. Pub. Univ. Alcalá de Henares (España)  
*Clave:* CL *Volumen:* 1 *Páginas, inicial:* 397 *final:* 399 *Fecha:* 1994
- 
- 16.- *Autores:* L. Peña, [E. Junquera](#) y E. Aicart  
*Título:* Ultrasonic study of the molecular encapsulation and micellization processes of dodecylethyldimethylammonium bromide water solutions in the presence of  $\beta$ -cyclodextrin or 2,6-di-O-methyl- $\beta$ -cyclodextrin.  
*Ref. revista / Libro:* J. SOLUTION CHEMISTRY  
*Clave:* A *Volumen:* 24 *Páginas, inicial:* 1075 *final:* 1091 *Fecha:* 1995
-

- 
- 17.- *Autores:* E. Aicart, [E. Junquera](#) y T. M. Letcher  
*Título:* Isobaric thermal expansivity and isothermal compressibility of several nonsaturated hydrocarbons at 298.15 K.  
*Ref. revista / Libro:* J. CHEMICAL ENGINEERING DATA  
*Clave:* A *Volumen:* 40 *Páginas, inicial:* 1225 *final:* 1227 *Fecha:* 1995
- 
- 18.- *Autores:* [E. Junquera](#), L. Peña y E. Aicart  
*Título:* A conductimetric study of the interaction of  $\beta$ -cyclodextrin or hydroxypropyl- $\beta$ -cyclodextrin with dodecyltrimethylammonium bromide in water solution.  
*Ref. revista / Libro:* LANGMUIR  
*Clave:* A *Volumen:* 11 *Páginas, inicial:* 4685 *final:* 4690 *Fecha:* 1995
- 
- 19.- *Autores:* J. Jiménez-Barbero, [E. Junquera](#), M. Martín-Pastor, S. Sharma, C. Vicent, S. Penadés.  
*Título:* Molecular Recognition of Carbohydrates Using a Synthetic Receptor. A Model System to Understand the Stereoselectivity of a Carbohydrate-Carbohydrate Interaction in Water.  
*Ref. revista / Libro:* J. AM. CHEM. SOC.  
*Clave:* A *Volumen:* 117 *Páginas, inicial:* 11198 *final:* 11204 *Fecha:* 1995
- 
- 20.- *Autores:* [E. Junquera](#), J. Laynez, M. Menéndez, S. Sharma, C. Vicent, S. Penadés.  
*Título:* Thermodynamics of  $\alpha$ -Cyclodextrin-p-Nitrophenyl Glycosides Complexes. A Simple System to Understand the Energetics of Carbohydrate Interactions in Water.  
*Ref. revista / Libro:* J.ORG. CHEM.  
*Clave:* A *Volumen:* 61 *Páginas, inicial:* 6790 *final:* 6798 *Fecha:* 1996
- 
- 21.- *Autores:* [E. Junquera](#), L. Peña y E. Aicart  
*Título:* Conductivity studies of the molecular encapsulation of sodium perfluorooctanoate by  $\beta$ -cyclodextrin derivatives.  
*Ref. revista / Libro:* J. INCLUSION PHENOMENA MOLEC. RECOGN. IN CHEM.  
*Clave:* A *Volumen:* 24 *Páginas, inicial:* 233 *final:* 239 *Fecha:* 1996
- 
- 22.- *Autores:* [E. Junquera](#), L. Peña y E. Aicart  
*Título:* Micellar behavior of the aqueous solutions of dodecylethyldimethylammonium bromide. A characterization study in the presence and absence of hydroxypropyl- $\beta$ -cyclodextrin.  
*Ref. revista / Libro:* LANGMUIR  
*Clave:* A *Volumen:* 13 *Páginas, inicial:* 219 *final:* 224 *Fecha:* 1997
- 
- 23.- *Autores:* D. J. Jobe, R. E. Verrall, [E. Junquera](#) y E. Aicart  
*Título:* Ultrasonic absorption studies of aqueous solutions of cetyltrimethylammonium bromide and 2,6-di-O-methyl- $\beta$ -cyclodextrin.  
*Ref. revista / Libro:* J. COLLOID INTERFACE SCIENCE  
*Clave:* A *Volumen:* 189 *Páginas, inicial:* 294 *final:* 298 *Fecha:* 1997
- 
- 24.- *Autores:* [E. Junquera](#) y E. Aicart  
*Título:* Effect of the pH on the encapsulation of the salicylic acid/salicylate system by hydroxypropyl- $\beta$ -cyclodextrin at 25 °C. A fluorescence enhancement study in aqueous solutions.  
*Ref. revista / Libro:* J. INCLUSION PHENOMENA MOLEC. RECOGN. IN CHEM.  
*Clave:* A *Volumen:* 25 *Páginas, inicial:* 119 *final:* 136 *Fecha:* 1997
-

- 
- 25.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart  
*Título:* Potentiometric study of the encapsulation of ketoprofen by hydroxypropyl- $\beta$ -cyclodextrin. Temperature, solvent and salt effects.  
*Ref. revista / Libro:* J. PHYSICAL CHEMISTRY B  
*Clave:* A *Volumen:* 101 *Páginas, inicial:* 6163 *final:* 7171 *Fecha:* 1997
- 
- 26.- *Autores:* E. Junquera, O. Pastor y E. Aicart  
*Título:* Aggregation number of the n-octyl- $\beta$ -glucopyranoside micelles in the presence and absence of salt at 298.15 K by a steady state fluorescence method.  
*Ref. Libro:* SPECTROS. BIOL. MOLEC.: MODERN TRENDS, ISBN: 0-7923-4685-8  
*Editorial:* Kluwer Academic Pub., Dordrecht, Holanda  
*Clave:* CL *Volumen:* 1 *Páginas, inicial:* 331 *final:* 332 *Fecha:* 1997
- 
- 27.- *Autores:* E. Junquera, O. Pastor y E. Aicart  
*Título:* Encapsulation of the salicylic acid/salicylate system by hydroxypropyl- $\beta$ -cyclodextrin at 25 °C. A fluorescence enhancement study in aqueous solutions.  
*Ref. Libro:* SPECTROS. BIOL. MOLEC.: MODERN TRENDS, ISBN: 0-7923-4685-8  
*Editorial:* Kluwer Academic Pub., Dordrecht, Holanda  
*Clave:* CL *Volumen:* 1 *Páginas, inicial:* 397 *final:* 398 *Fecha:* 1997
- 
- 28.- *Autores:* E. Junquera, L. Peña y E. Aicart  
*Título:* Binding of sodium salicylate by  $\beta$ -cyclodextrin or 2,6-di-O-methyl- $\beta$ -cyclodextrin in aqueous solution.  
*Ref. revista / Libro:* J. PHARMACEUTICAL SCIENCES  
*Clave:* A *Volumen:* 87 *Páginas, inicial:* 86 *final:* 90 *Fecha:* 1998
- 
- 29.- *Autores:* O. Pastor, E. Junquera y E. Aicart  
*Título:* Hydration and micellization processes of n-octyl- $\beta$ -glucopyranoside in aqueous solution. A thermodynamic and fluorimetric study in the absence and presence of salts.  
*Ref. revista / Libro:* LANGMUIR  
*Clave:* A *Volumen:* 14 *Páginas, inicial:* 2950 *final:* 2957 *Fecha:* 1998
- 
- 30.- *Autores:* E. Junquera, M. Matín-Pastor y E. Aicart  
*Título:* Molecular encapsulation of flurbiprofen and/or ibuprofen by hydroxypropyl- $\beta$ -cyclodextrin in aqueous solution. Potentiometric and molecular modeling studies.  
*Ref. revista / Libro:* J. ORGANIC CHEMISTRY  
*Clave:* A *Volumen:* 63 *Páginas, inicial:* 4349 *final:* 4358 *Fecha:* 1998
- 
- 31.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart  
*Título:* A fluorimetric, potentiometric and conductimetric study of the aqueous solutions of naproxen and its association with hydroxypropyl- $\beta$ -cyclodextrin.  
*Ref. revista / Libro:* INTERNATIONAL J. OF PHARMACEUTICS  
*Clave:* A *Volumen:* 176 *Páginas, inicial:* 169 *final:* 178 *Fecha:* 1999
- 
- 32.- *Autores:* E. Junquera, J.S. Nowick  
*Título:* Folding of an Artificial- $\beta$ -Sheet in Competitive Solvents.  
*Ref. revista / Libro:* J. ORG. CHEM  
*Clave:* A *Volumen:* 64 *Páginas, inicial:* 2527 *final:* 2531 *Fecha:* 1999
-

- 
- 33.- *Autores:* E. Junquera, V.G. Baonza y E. Aicart  
*Título:* Energetics of the encapsulation of o-, m-, and p-hydroxybenzoic acids by  $\beta$ -cyclodextrin and its methylated and hydroxypropylated derivatives in aqueous solution.  
*Ref. revista / Libro:* CANADIAN J. CHEMISTRY  
*Clave:* A *Volumen:* 77 *Páginas, inicial:* 348 *final:* 355 *Fecha:* 1999
- 
- 34.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart  
*Título:* Thermodynamic analysis of the binding of an hepatoprotectant drug, thioctic acid, by  $\beta$ -cyclodextrin.  
*Ref. revista / Libro:* J. PHARMACEUTICAL SCIENCES  
*Clave:* A *Volumen:* 88 *Páginas, inicial:* 626 *final:* 631 *Fecha:* 1999
- 
- 35.- *Autores:* E. Junquera, F. Mendicuti y E. Aicart  
*Título:* Driving forces for the inclusion of the drug tolmetin by  $\beta$ -cyclodextrin in aqueous medium. Conductimetric and molecular modeling studies.  
*Ref. revista / Libro:* LANGMUIR  
*Clave:* A *Volumen:* 15 *Páginas, inicial:* 4472 *final:* 4479 *Fecha:* 1999
- 
- 36.- *Autores:* E. Junquera, D. Ruiz y E. Aicart  
*Título:* Role of the hydrophobic effect on the non-covalent interactions between salicylic acid and a series of  $\beta$ -cyclodextrins.  
*Ref. revista / Libro:* J. COLLOID INTERFACE SCI.  
*Clave:* A *Volumen:* 216 *Páginas, inicial:* 154 *final:* 160 *Fecha:* 1999
- 
- 37.- *Autores:* N. Martínez, E. Junquera y E. Aicart  
*Título:* Ultrasonic, density, and potentiometry characterization of the interaction of gentisic and gallic acids with an apolar cavity in aqueous solution.  
*Ref. revista / Libro:* PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS (PCCP)  
*Clave:* A *Volumen:* 1 *Páginas, inicial:* 4811 *final:* 4817 *Fecha:* 1999
- 
- 38.- *Autores:* C. Merino, E. Junquera, J. Jiménez-Barbero y E. Aicart  
*Título:* Effect of the presence of  $\beta$ -cyclodextrin on the solution behavior of the procaine hydrochloride. Spectroscopic and thermodynamic studies.  
*Ref. revista / Libro:* LANGMUIR  
*Clave:* A *Volumen:* 16 *Páginas, inicial:* 1557 *final:* 1565 *Fecha:* 2000
- 
- 39.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart  
*Título:* An easy and fast experiment for the determination of the equilibrium constants of an acid/base pair, free and complexed with a molecular receptor.  
*Ref. revista / Libro:* J. CHEMICAL EDUCATION  
*Clave:* A *Volumen:* 77 *Páginas, inicial:* 1215 *final:* 1217 *Fecha:* 2000
- 
- 40.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart  
*Título:* Estudio termodinámico y espectroscópico de sistemas ternarios n-octil- $\beta$ -glucopiranosido / sal / agua.  
*Ref. Libro:* COLOIDES e INTERFASES. ISBN: 84-600-9686-6  
*Editorial:* CSIC-Universitat de Barcelona, Barcelona  
*Clave:* CL *Volumen:* 1 *Páginas, inicial:* 153 *final:* 156 *Fecha:* 2000
-

- 
- 41.- *Autores:* E. Junquera, J. C. Romero y E. Aicart  
*Título:* Behavior of tricyclic antidepressants in aqueous solution: Self-aggregation and association with  $\beta$ -cyclodextrin.  
*Ref. revista / Libro:* LANGMUIR  
*Clave:* A *Volumen:* 17 *Páginas, inicial:* 1826 *final:* 1832 *Fecha:* 2001
- 
- 42.- *Autores:* E. Junquera, A. Pasero y E. Aicart  
*Título:* Electrochemical study of the chelation of  $\text{Cu}^{+2}$  cation by 18-crown-6-ether and hydroxybenzoic acids in aqueous solution.  
*Ref. revista / Libro:* J. SOLUTION CHEMISTRY  
*Clave:* A *Volumen:* 30 *Páginas, inicial:* 497 *final:* 508 *Fecha:* 2001
- 
- 43.- *Autores:* E. Junquera, D. Olmos y E. Aicart  
*Título:* Carbohydrate-water interactions of p-nitrophenylglycosides in aqueous solution. Ultrasonic and densitometric studies.  
*Ref. revista / Libro:* PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS (PCCP)  
*Clave:* A *Volumen:* 4 *Páginas, inicial:* 352 *final:* 357 *Fecha:* 2002
- 
- 44.- *Autores:* E. Junquera, M. Ruiz, S. López y E. Aicart  
*Título:* A technique and a method for the continuous, simultaneous and automatic measurement of density and speed of sound in pure liquids and solutions.  
*Ref. revista / Libro:* REVIEW OF SCIENTIFIC INSTRUMENTS  
*Clave:* A *Volumen:* 73 *Páginas, inicial:* 416 *final:* 421 *Fecha:* 2002
- 
- 45.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart  
*Título:* Physical methods for the determination of stability constants.  
*Ref. revista / Libro:* ENCYCLOPEDIA OF SURFACE AND COLLOID SCIENCE.  
*Clave:* CL *Volumen:* 4 *Páginas, inicial:* 4090 *final:* 4104 *Fecha:* 2002
- 
- 46.- *Autores:* E. Aicart y E. Junquera  
*Título:* Molecular encapsulation by cyclodextrins  
*Ref. Libro:* MICROCAP MANUAL: EUROPEAN THEMATIC NETWORK 1999-2001  
*Editorial:* Brace GmbH, Copenhagen, DK.  
*Clave:* CL *Volumen:* 1 *Páginas, inicial:* 1 *final:* 5 *Fecha:* 2002
- 
- 47.- *Autores:* E. Aicart y E. Junquera  
*Título:* Molecular encapsulation of caffeine with hydroxypropyl- $\beta$ -cyclodextrin  
*Ref. Libro:* MICROCAP MANUAL: EUROPEAN THEMATIC NETWORK 1999-2001  
*Editorial:* Brace GmbH, Copenhagen, DK.  
*Clave:* CL *Volumen:* 1 *Páginas, inicial:* 48 *final:* 52 *Fecha:* 2002
- 
- 48.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart  
*Título:* Mixed micellization of dodecylethyldimethylammonium bromide and dodecyltrimethylammonium bromide in aqueous solution.  
*Ref. revista / Libro:* LANGMUIR  
*Clave:* A *Volumen:* 18 *Páginas, inicial:* 9250 *final:* 9258 *Fecha:* 2002
- 
- 49.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart  
*Título:* Physical methods and experimental techniques for the determination of stability constants.  
*Ref. revista / Libro:* ENCYCLOPEDIA OF SURFACE AND COLLOID SCIENCE.  
*Clave:* CL *Volumen:* 3 *Páginas, inicial:* 1 *final:* 19 *Fecha:* 2003
-

- 50.- Autores: E. Aicart and [E. Junquera](#)  
 Título: Mixed surfactant aggregates: experimental and theoretical characterization.  
 Ref. revista / Libro: ENCYCLOPEDIA OF SURFACE AND COLLOID SCIENCE.  
 Clave: CL Volumen: 2 Páginas, inicial: 1 final: 17 Fecha: 2003
- 
- 51.- Autores: [E. Junquera](#), F. Ortega y E. Aicart  
 Título: Aggregation process of the mixed ternary system dodecylethyldimethylammonium bromide / dodecylpyridinium chloride / H<sub>2</sub>O: an experimental and theoretical approach.  
 Ref. revista / Libro: LANGMUIR  
 Clave: A Volumen: 19 Páginas, inicial: 4923 final: 4932 Fecha: 2003
- 
- 52.- Autores: T. Fergoug, [E. Junquera](#) y E. Aicart  
 Título: Effect of Temperature on the Encapsulation of the Drug Tetracaine Hydrochloride by  $\beta$ -Cyclodextrin and Hydroxypropyl- $\beta$ -Cyclodextrin in Aqueous Medium.  
 Ref. revista : J. INCLUSION PHENOMENA & MACROCYCLIC IN CHEM.  
 Clave: A Volumen: 47 Páginas, inicial: 65 final: 70 Fecha: 2003
- 
- 53.- Autores: E. Aicart y [E. Junquera](#)  
 Título: Complex formation between purine derivatives and cyclodextrins: a fluorescence spectroscopy study.  
 Ref. revista : J. INCLUSION PHENOMENA & MACROCYCLIC IN CHEM.  
 Clave: A Volumen: 47 Páginas, inicial: 161 final: 165 Fecha: 2003
- 
- 54.- Autores: [E. Junquera](#) y E. Aicart  
 Título: Modelización de Sistemas Micelares Mixtos de Tensioactivos Catiónicos.  
 Ref. Libro: COLOIDES e INTERFASES. ISBN: 84-8158-242-5  
 Editorial: Universidad de Vigo  
 Clave: CL Volumen: 1 Páginas, inicial: 135 final: 140 Fecha: 2003
- 
- 55.- Autores: A. Rodríguez, [E. Junquera](#), P. del Burgo y E. Aicart  
 Título: Caracterización del Proceso de Micelización Mixta del Bromuro de Dodeciltrimetilamonio y el Hidrocloruro de Amitriptilina en Medio Acuoso  
 Ref. Libro: COLOIDES e INTERFASES. ISBN: 84-8158-242-5  
 Editorial: Universidad de Vigo  
 Clave: CL Volumen: 1 Páginas, inicial: 357 final: 360 Fecha: 2003
- 
- 56.- Autores: A. Rodríguez, P. del Burgo, [E. Junquera](#) y E. Aicart  
 Título: Conductometric and spectrofluorimetric characterization of the mixed micelles constituted by dodecyltrimethylammonium bromide and a tricyclic antidepressant drug in aqueous solution  
 Ref. revista : J. COLLOID INTERFACE SCIENCE  
 Clave: A Volumen: 269 Páginas, inicial: 476 final: 483 Fecha: 2004
- 
- 57.- Autores: P. del Burgo, [E. Junquera](#) y E. Aicart  
 Título: Mixed micellization of a nonionic-cationic surfactant system constituted by n-octyl- $\beta$ -D-glucopyranoside/dodecyltrimethylammonium bromide/H<sub>2</sub>O. An electrochemical, thermodynamic and spectroscopic study.  
 Ref. revista : LANGMUIR  
 Clave: A Volumen: 20 Páginas, inicial: 1587 final: 1596 Fecha: 2004
- 
- 58.- Autores: A. Lainez, P. del Burgo, [E. Junquera](#) y E. Aicart  
 Título: Mixed micelles formed by n-octyl- $\beta$ -D-glucopyranoside and tetradecyltrimethylammonium bromide in aqueous media.  
 Ref. revista : LANGMUIR  
 Clave: A Volumen: 20 Páginas, inicial: 5745 final: 5752 Fecha: 2004
- 
- 59.- Autores: [Elena Junquera](#), Rocío Arranz y E. Aicart  
 Título: Mixed Vesicle Formation on a Ternary Surfactant System: Didodecyldimethylammonium Bromide/Dodecylethyldimethylammonium Bromide/Water  
 Ref. revista : LANGMUIR  
 Clave: A Volumen: 20 Páginas, inicial: 6619 final: 6625 Fecha: 2004
-



- 60.- *Autores:* [Elena Junquera](#), Patricia del Burgo, Rocío Arranz, Oscar Llorca y Emilio Aicart  
*Título:* Aggregation phenomena on the ternary ionic-nonionic surfactant system: didodecyltrimethylammonium bromide/ octyl- $\beta$ -D-glucopyranoside/water. Mixed microaggregates, vesicles and micelles.  
*Ref. revista :* LANGMUIR  
*Clave:* A *Volumen:* 21 *Páginas, inicial:* 1795 *final:* 1801 *Fecha:* 2005
- 
- 61.- *Autores:* [E. Junquera](#), P. del Burgo y E. Aicart  
*Título:* Caracterización de sistemas complejos que forman agregados mixtos: Bromuro de didodecildimetilamonio y tensioactivos catiónico o no iónico en medio acuoso.  
*Ref. revista :* COLOIDES E INTERFASES  
*Clave:* CL *Volumen:* I *Páginas, inicial:* 409 *final:* 415 *Fecha:* 2005
- 
- 62.- *Autores:* [Elena Junquera](#), Patricia del Burgo, Jasminka Boskovic y E. Aicart  
*Título:* Self-organization of the ternary didecyltrimethylammonium bromide/octyl- $\beta$ -D-glucopyranoside/water system.  
*Ref. revista :* LANGMUIR  
*Clave:* A *Volumen:* 21 *Páginas, inicial:* 7143 *final:* 7152 *Fecha:* 2005
- 
- 63.- *Autores:* Emilio Aicart, Patricia del Burgo, Oscar Llorca and [Elena Junquera](#)  
*Título:* Electrochemical, Microscopic and Spectroscopic Characterization of Prevesicle Nanostructures and Vesicles on Mixed Cationic Surfactant Systems.  
*Ref. revista :* LANGMUIR  
*Clave:* A *Volumen:* 22 *Páginas, inicial:* 4027 *final:*4036 *Fecha:* 2006
- 
- 64.- *Autores:* Patricia del Burgo, Emilio Aicart y [Elena Junquera](#)  
*Título:* Mixed Vesicles and mixed micelles of the cationic-cationic surfactant system: didecyltrimethylammonium bromide/dodecylethyldimethylammonium bromide/water.  
*Ref. revista :* COLLOIDS AND SURFACES A : PHYS. CHEM. ASPECTS  
*Clave:* A *Volumen:* 292 *Páginas, inicial:* 165 *final:* 172 *Fecha:* 2007
- 
- 65.- *Autores:* Patricia del Burgo, [Elena Junquera](#), y Emilio Aicart  
*Título:* Spectrofluorimetric Characterization of Mixed Nanoaggregates Comprising a Double-Chain Cationic Surfactant and a Cationic or Non-ionic Single-Chain Surfactant  
*Ref. revista :* APPLIED SPECTROSCOPY  
*Clave:* A *Volumen:* 60 *Páginas, inicial:* 1307 *final:* 1314 *Fecha:* 2006
- 
- 66.- *Autores:* Patricia del Burgo, Emilio Aicart, Oscar Llorca y [Elena Junquera](#)  
*Título:* Cationic Pre-Vesicle and Vesicle Nanoaggregates: An Experimental and Theoretical Study  
*Ref. revista :* THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B  
*Clave:* A *Volumen:* 110 *Páginas, inicial:* 23524 *final:* 23539 *Fecha:* 2006
- 
- 67.- *Autores:* J. Cano, A. Rodríguez, E. Aicart y [E. Junquera](#)  
*Título:* Temperature Effect on the Complex Formation between Tricyclic Antidepressant Drugs (Amitriptyline or Imipramine) and Hydroxypropyl- $\beta$ -Cyclodextrin in Water  
*Ref. revista* *J. Inclusion Phenomena*  
*Clave:* A *Volumen:* 59 *Páginas, inicial:* 279 *final:* 285 *Fecha:* 2007
- 
- 68.- *Autores:* E. Lorente, A. Rodríguez, E. Aicart, [E. Junquera](#)  
*Título:* Non-ionic and cationic micelle nanostructures as drug solubilization vehicles. Spectrofluorimetric and electrochemical studies.  
*Ref. revista* *Colloid & Polymer Science*  
*Clave:* A *Volumen:* 285 *Páginas, inicial:* 1321 *final:* 1329 *Fecha:* 2007
- 
- 69.- *Autores:* J. L. Rodríguez, M. B. Sierra, P.V. Messina, M. M. Morini, P. C. Schulz, P. del Burgo, [E. Junquera](#), A. Rodríguez y E. Aicart  
*Título:* Surface and bulk properties of aqueous decyltrimethylammonium bromide-hexadecyltrimethylammonium bromide mixed system.  
*Ref. revista :* J. COLLOID INTERFACE SCIENCE  
*Clave:* A *Volumen:* 314 *Páginas, inicial:* 699 *final:* 706 *Fecha:* 2007
-

- 
- 70.- *Autores:* M. B. Sierra, M. M. Morini, P. C. Schulz, [E. Junquera](#) y E. Aicart  
*Título:* Effect of double bonds in the formation of sodium dodecanoate and sodium 10-undecenoate mixed micelles in water.  
*Ref. revista :* J. PHYS. CHEM. B  
*Clave:* A *Volumen:* 111 *Páginas, inicial:* 11692 *final:* 11699 *Fecha:* 2007 *FI:* 4.086
- 
- 71.- *Autores:* [E. Junquera](#) y E. Aicart  
*Título:* Self-Organization of the Ternary Dialkyldimethylammonium Bromide/OBG/Water Systems. Mixed Nanoaggregates, Vesicles and Micelles. Chapter 13  
*Ref. revista :* Sugar-Based Surfactants: Fundamentals and Applications  
*Editorial:* CRC Taylor & Francis (Editores: A. Hubbard y C. Carnero Ruiz)  
*Clave:* CL *Volumen:* CAP. 13 *Páginas:* 501-545 *Fecha:* 2008
- 
- 72.- *Autores:* A. Rodríguez-Pulido, E. Aicart, O. Llorca y [E. Junquera](#)  
*Título:* Compaction Process of Calf Thymus DNA by Mixed Cationic-Zwitterionic Liposomes. A Physicochemical Study.  
*Ref. revista :* J. Phys. Chem. B.  
*Clave:* A *Volumen:* 112 *Páginas, inicial:* 2187 *final:* 2197 *Fecha:* 2008 *FI:* 4,189
- 
- 73.- *Autores:* A. Rodríguez-Pulido, F. Ortega, E. Aicart, O. Llorca y [E. Junquera](#)  
*Título:* A Physicochemical Characterization of the Interaction between DC-CHOL/DOPE Cationic Liposomes and DNA  
*Ref. revista :* J. Phys. Chem. B  
*Clave:* A *Volumen:* 112 *Páginas, inicial:* 12555 *final:* 12565 *Fecha:* 2008 *FI:* 4,189
- 
- 74.- *Autores:* A. Rodríguez, E. Aicart, y [E. Junquera](#)  
*Título:* Electrochemical and Spectroscopic Study of Octadecyltrimethylammonium Bromide Cationic Micelles/DNA Surfoplexes  
*Ref. revista :* Langmuir  
*Clave:* A *Volumen:* 25 *Páginas, inicial:* 4402 *final:* 4411 *Fecha:* 2009 *FI:* 3,898
- 
- 75.- *Autores:* A. Rodríguez-Pulido, O. Llorca, C. Rodríguez, E. Aicart, A. Martín-Molina y [E. Junquera](#)  
*Título:* A Theoretical and Experimental Approach to the Compaction Process of DNA by Dioctadecyldimethylammonium Bromide/Zwitterionic Mixed Liposomes  
*Ref. revista / Libro:* J. PHYSICAL CHEMISTRY B  
*Clave:* A *Volumen:* 113 *Páginas, inicial:* 15648 *final:* 15661 *Fecha:* 2009 *FI:* 3,471
- 
- 76.- *Autores:* M. B. Sierra, J. L. Rodríguez, R. M. Minardi, M. M. Moroni, [E. Junquera](#), E. Aicart y P. C. Schulz  
*Título:* The low concentration aggregation of sodium oleate-sodium linoleate in aqueous mixtures  
*Ref. revista:* COLLOID AND POLYMER SCIENCE  
*Clave:* A *Volumen:* 288 *Páginas, inicial:* 631 *final:* 641 *Fecha:* 2010 *FI:* 2,443
- 
- 77.- *Autores:* [E. Junquera](#), A. Casado, A. Rodríguez-Pulido, M. Muñoz-Úbeda y E. Aicart  
*Título:* Experimental and theoretical approach to the sodium decanoate –dodecanoate mixed surfactant system in aqueous solution.  
*Ref. revista:* LANGMUIR  
*Clave:* A *Volumen:* 26 *Páginas, inicial:* 9378 *final:* 9385 *Fecha:* 2010 *FI:* 4,269
- 
- 78.- *Autores:* D. Alonso, H. Vázquez-Villa, A. M. Gamo, M. F. Martínez-Esperón, M. Tortosa, A. Viso, R. Fernández-Pradilla, [E. Junquera](#), E. Aicart, M. Martín-Fontecha, B. Benhamú, M. L. López-Rodríguez, y S. Ortega-Gutiérrez  
*Título:* Development of fluorescent ligands for human 5-HT<sub>1A</sub> receptors.  
*Ref. revista:* ACS MEDICINAL CHEMISTRY LET.  
*Clave:* A *Volumen:* 1 *Páginas, inicial:* 249 *final:* 253 *Fecha:* 2010 *FI:* 3,355
-

- 
- 79.- *Autores:* H. Vázquez-Villa, J. A. González-Vera, B. Benhamú, A. Viso, R. Fernández-Pradilla, E. Junquera, E. Aicart, M. L. López-Rodríguez, y S. Ortega-Gutiérrez  
*Título:* Development of molecular probes for the human 5-HT<sub>6</sub> receptors  
*Ref. revista:* J. MEDICINAL CHEMISTRY  
*Clave:* A *Volumen:* 53 *Páginas, inicial:* 7095 *final:* 7106 *Fecha:* 2010 FI: 5,207
- 
- 80.- *Autores:* M. Muñoz-Úbeda, A. Rodríguez-Pulido, A. Nogales, A. Martín-Molina, E. Aicart y E. Junquera  
*Título:* Effect of lipid composition on the structure and theoretical phase diagrams of DC-Chol/DOPE-DNA Lipoplexes.  
*Ref. revista:* BIOMACROMOLECULES  
*Clave:* A *Volumen:* 11 *Páginas, inicial:* 3332 *final:* 3340 *Fecha:* 2010 FI: 5,327
- 
- 81.- *Autores:* M. Muñoz-Úbeda, A. Rodríguez-Pulido, A. Nogales, O. Llorca, M. Quesada-Pérez, A. Martín-Molina, E. Aicart y E. Junquera  
*Título:* Gene vectors based on DOEPC/DOPE mixed cationic liposomes: A physicochemical study.  
*Ref. revista:* SOFT MATTER  
*Clave:* A *Volumen:* 7 *Páginas, inicial:* 5991 *final:* 6004 *Fecha:* 2011 FI: 4,390
- 
- 82.- *Autores:* 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  
*Título:* Why is less cationic lipid required to prepare lipoplexes from plasmid DNA than linear DNA in gene therapy?  
*Ref. revista:* J. AMER. CHEM. SOC.  
*Clave:* A *Volumen:* 133 *Páginas, inicial:* 18014 *final:* 18017 *Fecha:* 2011 FI: 9,907
- 
- 83.- *Autores:* A. B. Dávila-Ibañez, V. Salgueirino, V. Martínez-Zorzano, R. Mariño-Fernández, A. García-Lorenzo, M. Maceira-Campos, M. Muñoz-Úbeda, E. Junquera, E. Aicart, J. Rivas, F. J. Rodríguez-Berrocal y J. L. Legido  
*Título:* Magnetic silica nanoparticle cellular uptake and cytotoxicity regulated by electrostatic polyelectrolytes DNA loading at their surface.  
*Ref. revista:* ACS NANO  
*Clave:* A *Volumen:* 6 *Páginas, inicial:* 747 *final:* 759 *Fecha:* 2012 FI: 12,062
- 
- 84.- *Autores:* A. L. Barrán-Berdón, M. Muñoz-Úbeda, C. Aicart-Ramos, L. Pérez, M. R. Infante, P. Castro-Hartmann, A. Martín-Molina, E. Aicart y E. Junquera  
*Título:* Lipoplexes constituted by lysine based cationic gemini lipids and plasmid DNA.  
*Ref. revista:* SOFT MATTER  
*Clave:* A *Volumen:* 8 *Páginas, inicial:* 7368 *final:* 7380 *Fecha:* 2012 FI: 3,909  
DOI: 10.1039/c2sm25711d **PORTADA DE REVISTA**
- 
- 85.- *Autores:* M. Muñoz-Úbeda, S. K. Misra, A. L. Barrán-Berdón, S. Datta, C. Aicart-Ramos, P. Castro-Hartmann, P. Kondaiah, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart  
*Título:* How does spacer length of cationic gemini lipids influence the lipoplex formation with plasmid DNA? Physicochemical and biochemical characterizations and their relevance in gene therapy.  
*Ref. revista:* BIOMACROMOLECULES  
*Clave:* A *Volumen:* 13 *Páginas, inicial:* 3926 *final:* 3937 *Fecha:* 2012 FI: 5,371
-

- 
- 86.- *Autores:* 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  
*Título:* Effects of a delocalizable cation on the headgroup of gemini lipids on the lipoplex-type nanoggregates directly formed from plasmid DNA.  
*Ref. revista:* BIOMACROMOLECULES DOI: 10.1021/bm401079h  
*Clave:* A *Volumen:* 14 *Páginas, inicial:* 3951 *final:* 3963 *Fecha:* 2013 FI: 5,371
- 
- 87.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart  
*Título:* Cationic lipids as transfecting agents of DNA in gene therapy.  
*Ref. revista:* CURRENT TOPICS IN MEDICINAL CHEMISTRY  
*Clave:* A *Volumen:* 14 *Páginas, inicial:* 649 *final:* 663 *Fecha:* 2014 FI: 3,702
- 
- 88.- *Autores:* A. L. Barrán-Berdón, S. K. Misra, S. Datta, M. Muñoz-Úbeda, P. Kondaiah, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart  
*Título:* Cationic gemini lipids containing polyoxyethylene spacers as improved transfecting agents of plasmid DNA in cancer cells.  
*Ref. revista:* J. MATERIALS CHEMISTRY B DOI: 10.1039/c4tb00389f  
*Clave:* A *Volumen:* 2 *Páginas, inicial:* 4640 *final:* 4652 *Fecha:* 2014 FI: 6,108
- 
- 89.- *Autores:* Ana L. Barrán-Berdón, Belén Yélamos, Marc Malfois, Emilio Aicart and Elena Junquera  
*Título:* Ca<sup>2+</sup>-Mediated Anionic Lipid-Plasmid DNA Lipoplexes. Electrochemical, Structural and Biochemical Studies  
*Ref. revista:* Langmuir DOI: 10.1021/la502823z  
*Clave:* A *Volumen:* 30 *Páginas, inicial:* 11704 *final:* 11713 *Fecha:* 2014 FI: 4.384
- 
- 90.- *Autores:* K. Kumar, A. L. Barrán-Berdón, S. Datta, M. Muñoz-Úbeda, C. Aicart-Ramos, P. Kondaiah, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart  
*Título:* A delocalizable cationic headgroup together with an oligo-oxyethylene spacer in gemini cationic lipids improves their biological activity as vectors of plasmid DNA.  
*Ref. revista:* J. Mat. Chemistry B  
*Clave:* A *Volumen:* 3 *Páginas, inicial:* 1495 *final:* 1506 *Fecha:* 2015 FI: 6.626
- 
- 91.- *Autores:* A. Barran-Berdón; B. Yélamos; L. García-Río; O. Domenech; E. Aicart; E. Junquera  
*Título:* Polycationic Macrocyclic Scaffolds as Potential Non-Viral Vectors of DNA: A Multidisciplinary Study  
*Ref. revista:* ACS Applied Materials & Interfaces DOI: 10.1021/acsami.5b03231  
*Clave:* A *Volumen:* 7 *Páginas, inicial:* 14404 *final:* 14414 *Fecha:* 2015 FI: 7,145
- 
- 92.- *Autores:* E. Junquera, y E. Aicart  
*Título:* Recent progress in gene therapy to deliver nucleic acids with multivalent cationic vectors  
*Ref. revista:* ADV. COLLOID INTERFACE SCIENCE DOI:10.1016/j.cis.2015.07.003  
*Clave:* A *Volumen:* 233 *Páginas, inicial:* 161 *final:* 175 *Fecha:* 2016 FI: 7,813
- 
- 93.- *Autores:* J. L. Jiménez Blanco, F. Ortega-Caballero, L. Blanco-Fernández, T. Carmona, G. Marcelo, M. Martínez-Negro, E. Aicart, E. Junquera, F. Mendicuti, C. Tros de Ilarduya, C. Ortiz Mellet, J. M. García Fernández  
*Título:* Trehalose-based Janus cyclooligosaccharides: “Click” synthesis and DNA-directed assembly into pH-sensitive transfectious nanoparticles.  
*Ref. revista:* CHEMICAL COMMUNICATIONS DOI: 10.1039/c6cc04791b  
*Clave:* A *Volumen:* 52 *Páginas, inicial:* 10117 *final:* 10120 *Fecha:* 2016 FI: 6,567
-

---

94.- *Autores:* M. Martínez-Negro, K. Kumar, A. L. Barrán-Berdón, S. Datta, P. Kondaiah, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart

*Título:* Efficient cellular knockdown mediated by siRNA nanovectors of gemini cationic lipids having delocalizable headgroups and oligo-oxyethylene spacers.

*Ref. revista:* ACS APPLIED MATERIALS & INTERFACES DOI: 10.1021/acsami.6b08823

*Clave:* A *Volumen:* 8 *Páginas, inicial:* 22113 *final:* 22126 *Fecha:* 2016 *FI:* 7,145

---

95.- *Autores:* A. L. Barrán-Berdón, E. Aicart y E. Junquera

*Título:* Anionic/zwitterionic lipid-based gene vectors of pDNA.

*Ref. Revista/Libro:* METHODS IN MOLECULAR BIOLOGY: NON-VIRAL GENE DELIVERY VECTORS: METHODS AND PROTOCOLS ISBN: 978-1-4939-3715-5

*Editorial:* Humana Press, New York, USA DOI: 10.1007/978-1-4939-3718-9\_4

*Clave:* CL *Volumen:* Chapter 4 *Páginas, inicial:* 45 *final:* 61 *Fecha:* 2016 *FI:* \*\*\*

---

## **PARTICIPACION EN CONTRATOS DE INVESTIGACION DE ESPECIAL RELEVANCIA CON EMPRESAS Y/O ADMINISTRACIONES**

---

*Título del contrato/proyecto:* Determinación del Potencial Zeta en Disoluciones de Agua de Mar.  
*Tipo de contrato:* Contrato de muestras según Art. 83 de la LOU  
*Empresa/Administración financiadora:* VEOLIA WATER Solutions & Technologies  
*Entidades participantes:* UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID y VEOLIA WATER  
*Duración, desde:* Junio de 2006 *hasta:* Septiembre de 2006  
*Investigador responsable:* EMILIO AICART SOSPEDRA  
*Número de investigadores participantes:* 3  
*PRECIO TOTAL DEL PROYECTO:* 88.- Euros por muestra (+IVA)

---

### Relaciones con otras Empresas:

Laboratorios Alter (Madrid)  
Laboratorios Esteve (Barcelona)  
Laboratorios Glaxo-Smithkline-Beechman (Madrid)  
ACIA (Barcelona)

---

*Título del contrato/proyecto:* Determinación del Potencial Zeta en Disoluciones de Agua de Mar.  
*Tipo de contrato:* Contrato de muestras según Art. 83 de la LOU  
*Empresa/Administración financiadora:* VEOLIA WATER Solutions & Technologies  
*Entidades participantes:* UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID y VEOLIA WATER  
*Duración, desde:* Junio de 2008 *hasta:* Junio de 2009  
*Investigador responsable:* [ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ](#)  
*Número de investigadores participantes:* 4  
*PRECIO TOTAL DEL PROYECTO:* 100.- Euros por muestra (+IVA)

---

*Título del contrato/proyecto:* *GENERACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE NANOPARTICULAS LIPÍDICAS*  
*Tipo de contrato:* Contrato de asesoramiento según Art. 83 de la LOU  
*Empresa/Administración financiadora:* Biodan Sciences S.L.  
*Entidades participantes:* UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID y BIODAN SCIENCES S.L.  
*Duración, desde:* 2/04/2013 *hasta:* al 30/06/2013  
*Investigador responsable:* EMILIO AICART y [ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ](#)  
*Número de investigadores participantes:* 3  
*PRECIO TOTAL DEL PROYECTO:* 12222,22 € IVA (+IVA)

---

## PATENTES Y MODELOS DE UTILIDAD

---

*Inventores (p.o. de firma):* E. Junquera, M. Ruiz, S. López y E. Aicart

*Título:* Técnica y un método para la medida continua, simultánea y automática de la velocidad del sonido y la densidad en líquidos y disoluciones.

*N. de solicitud:* P200101592

*País de prioridad:* España

*Fecha de prioridad:* 6-7-2001

*Entidad titular:* UCM / UPM

*Países a los que se ha extendido:*

*Empresa/s que la están explotando:*

---

**ESTANCIAS EN CENTROS EXTRANJEROS  
(O DISTINTOS AL DEPARTAMENTO DE DESTINO)  
(ESTANCIAS CONTINUADAS SUPERIORES A UN MES)**

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

---

*Centro:* University of Saskatchewan

*Localidad:* SASKATOON      *País:* Canada      *Fecha:* 1990      *Duración:* 26 semanas

*Tema:* Absorción ultrasónica de medios micelares en presencia y ausencia de ciclodextrinas

*Clave:* D, C

---

*Centro:* Grupo de Carbohidratos, Instituto de Química Orgánica, CSIC

*Localidad:* MADRID      *País:* ESPAÑA      *Fecha:* 1994-95      *Duración:* 56 semanas

*Tema:* Reconocimiento Molecular de Carbohidratos con Sistemas Modelo

*Clave:* P

---

*Centro:* University of California, Irvine

*Localidad:* IRVINE (CA)      *País:* USA      *Fecha:* 1997-98      *Duración:* 30 semanas

*Tema:* Caracterización de láminas  $\beta$  proteicas artificiales en medios competitivos por RMN

*Clave:* P

---



## CONGRESOS

---

- 1.- *Autores:* [E. Junquera](#), G. Tardajos y [E. Aicart](#)  
*Título:* Speed of sound and isentropic compressibility of 1-chlorobutane + an n-alkane.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* 10<sup>th</sup> IUPAC Conference on Chemical Thermodynamics  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Paper I-15  
*Lugar de celebración:* Praga (Checoslovaquia) *Fecha:* 1988
- 
- 2.- *Autores:* E. Aicart, M. Costas, [E. Junquera](#), A. D. Matilla y G. Tardajos  
*Título:* Excess speed of sound and excess isentropic compressibility of (1,4-dioxane + an n-alkane).  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* Ultrasonics International 89  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Pag. 86  
*Lugar de celebración:* Madrid (España) *Fecha:* 1989
- 
- 3.- *Autores:* A. D. Matilla, [E. Junquera](#), G. Tardajos y E. Aicart  
*Título:* Second-order mixing functions for chlorobenzene with linear alkanes.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* 4<sup>th</sup> International Conference on Thermodynamics of Solution of Non-electrolytes.  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Paper P-I.3  
*Lugar de celebración:* Santiago de Compostela (España) *Fecha:* 1989
- 
- 4.- *Autores:* E. Junquera, [E. Aicart](#), G. Tardajos, D. J. Jobe y R. E. Verrall  
*Título:* Inclusion complexes of decyltrimethylammonium bromide and  $\beta$ -cyclodextrin in water.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* 7<sup>th</sup> International Conference on surface and Colloid Science  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Paper C1/P-27  
*Lugar de celebración:* Compiègne (Francia) *Fecha:* 1991
- 
- 5.- *Autores:* [E. Junquera](#), D. J. Jobe y R. E. Verrall  
*Título:* Ultrasonic relaxation spectroscopy studies of micelles in the presence of cyclodextrins  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* 7<sup>th</sup> International Conference on surface and Colloid Science  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Paper C1/P-28  
*Lugar de celebración:* Compiègne (Francia) *Fecha:* 1991
- 
- 6.- *Autores:* D. J. Jobe, R. E. Verrall, [E. Junquera](#), L. Peña, J. González-Benito y [E. Aicart](#)  
*Título:* Caracterización de los complejos de inclusión ciclodextrina/surfactante en disolución acuosa.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* Propiedades, Caracterización y Aplicaciones de los Sistemas Coloidales.  
*Publicación:* Libro de memorias, Pag. 397  
*Lugar de celebración:* Alcalá de Henares (España) *Fecha:* 1993
- 
- 7.- *Autores:* [E. Aicart](#), [E. Junquera](#), B. Skalski, D. J. Jobe y R. E. Verrall  
*Título:* Estudio de sistemas micelares en presencia de alcoholes mediante medidas de conductividad, relajación ultrasónica y fluorescencia inducida por láser.  
*Tipo de participación:* Conferencia  
*Congreso:* Propiedades, caracterización y aplicaciones de los sistemas coloidales.  
*Publicación:* Libro de memorias, Pag. 135  
*Lugar de celebración:* Alcalá de Henares (España) *Fecha:* 1993
-

- 
- 8.- *Autores:* J. González-Benito, [E. Junquera](#), L. Peña y [E. Aicart](#)  
*Título:*  $\beta$ -Cyclodextrin or 2,6-di-O-methyl- $\beta$ -cyclodextrin and dodecyltrimethylammonium bromide in aqueous solution.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* 23<sup>rd</sup> International Conference on Solution Chemistry  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Paper PO43  
*Lugar de celebración:* Leicester (Reino Unido) *Fecha:* 1993
- 
- 9.- *Autores:* [E. Junquera](#), L. Peña y [E. Aicart](#)  
*Título:* Influence of temperature on the micellization of sodium dodecylsulfate in water.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* 23<sup>rd</sup> International Conference on Solution Chemistry  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Paper PO44  
*Lugar de celebración:* Leicester (Reino Unido) *Fecha:* 1993
- 
- 10.- *Autores:* J.M. Coterón, [E. Junquera](#), J.C. Morales, S. Sharma, C. Vicent, [S. Penadés](#)  
*Título:* A stereoselective carbohydrate-carbohydrate interaction in water using a synthetic model system.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* XVIIth International Carbohydrate Symposium  
*Publicación:* Libro de Abstracts, Paper P67  
*Lugar de celebración:* Ottawa (Canadá) *Fecha:* 1994
- 
- 11.- *Autores:* [E. Junquera](#), L. Peña y [E. Aicart](#)  
*Título:* Microencapsulación de bromuro de dodeciltrimetilamonio con ciclodextrinas y su influencia en la micelización del tensoagente con una técnica conductimétrica automatizada.  
*Tipo de participación:* Conferencia  
*Congreso:* XXV Reunión Bienal de la R. S. E. de Química  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Simposio 6, Resumen 6-O-1  
*Lugar de celebración:* Vitoria (España) *Fecha:* 1994
- 
- 12.- *Autores:* J.M. Coterón, J.C. Morales, S. Sharma, S. Penadés, S. Sharma, C. Vicent, [E. Junquera](#)  
*Título:* A stereoselective carbohydrate-carbohydrate interaction in water using a synthetic model system  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* International Symposium of Recognition Processes  
*Publicación:* Libro de Abstracts, Paper A2.12  
*Lugar de celebración:* Birmingham (Reino Unido) *Fecha:* 1994
- 
- 13.- *Autores:* [E. Junquera](#), J. Laynez, M. Menéndez, S. Sharma, S. Penadés  
*Título:* Energetics of  $\alpha$ -cyclodextrin-4-nitrophenyl glycosides complexes in water  
*Tipo de participación:* Conferencia  
*Congreso:* EUROCARB 95, 8th European Carbohydrate Symposium  
*Publicación:* Libro de Abstracts, Paper CO-1  
*Lugar de celebración:* Sevilla *Fecha:* 1995
- 
- 14.- *Autores:* J. Jiménez-Barbero, [E. Junquera](#), M. Martín, S. Sharma, C. Vicent, [S. Penadés](#)  
*Título:* The Origin of the Selectivity of a Carbohydrate-Carbohydrate Interaction in Water Using a Model System  
*Tipo de participación:* Conferencia  
*Congreso:* EUROCARB 95, 8th European Carbohydrate Symposium  
*Publicación:* Libro de Abstracts, Paper BO-6  
*Lugar de celebración:* Sevilla *Fecha:* 1995
-

- 
- 15.- *Autores:* [E. Junquera](#), L. Peña y E. Aicart  
*Título:* Molecular encapsulation of surfactants by cyclodextrins. A conductimetric study.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* IX<sup>th</sup> European Colloid and Interface Society Conference  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Paper PI-39  
*Lugar de celebración:* Barcelona (España) *Fecha:* 1995
- 
- 16.- *Autores:* [E. Junquera](#), L. Peña y [E. Aicart](#)  
*Título:* Determinación de la conductividad electroquímica en mezclas líquidas con una técnica totalmente automatizada.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* 7<sup>as</sup> Jornadas de Análisis Instrumental  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Comunicación C-DIN-18  
*Lugar de celebración:* Madrid (España) *Fecha:* 1995
- 
- 17.- *Autores:* [E. Junquera](#), J. Laynez, M. Menéndez, S. Sharma, S. Penadés  
*Título:* Thermodynamics of  $\alpha$ -cyclodextrin-p-nitrophenyl glycosides complexes. A simple system to understand the energetics of carbohydrate interactions in water  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* The 8<sup>th</sup> International Cyclodextrin Symposium  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Paper 2-p12  
*Lugar de celebración:* Budapest (Hungría) *Fecha:* 1996
- 
- 18.- *Autores:* D. Ruiz, [E. Junquera](#), V. García-Baonza y E. Aicart  
*Título:* Molecular encapsulation of salicylic acid by  $\beta$ -cyclodextrin. A potentiometric study.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* The 8<sup>th</sup> International Cyclodextrin Symposium  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Paper 2-p11  
*Lugar de celebración:* Budapest (Hungría) *Fecha:* 1996
- 
- 19.- *Autores:* [E. Junquera](#), O. Pastor y [E. Aicart](#)  
*Título:* Encapsulation of the salicylic acid/salicylate system by hydroxypropyl- $\beta$ -cyclodextrin at 298.15 K. A fluorescence enhancement study in aqueous solutions.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* 1997 Pharmaceutical Applications of Cyclodextrins  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Paper 5-46  
*Lugar de celebración:* Lawrence (USA) *Fecha:* 1997
- 
- 20.- *Autores:* [E. Junquera](#) y [E. Aicart](#)  
*Título:* A potentiometric study of the encapsulation of ketoprofen by hydroxypropyl- $\beta$ -cyclodextrin. Temperature, solvent and salt effects.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* 1997 Pharmaceutical Applications of Cyclodextrins  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Paper 5-47  
*Lugar de celebración:* Lawrence (USA) *Fecha:* 1997
- 
- 21.- *Autores:* [E. Junquera](#), O. Pastor y [E. Aicart](#)  
*Título:* Encapsulation of the salicylic acid/salicylate system by hydroxypropyl- $\beta$ -cyclodextrin at 25 °C. A fluorescence enhancement in aqueous solutions.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* 7<sup>th</sup> European Conference on Spectroscopy of Biological Molecules  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Pag. 397  
*Lugar de celebración:* San Lorenzo del Escorial (España) *Fecha:* 1997
-

- 
- 22.- *Autores:* [E. Junquera](#), O. Pastor y [E. Aicart](#)  
*Título:* Aggregation number of the n-octyl- $\beta$ -glucopyranoside micelles in the presence and absence of salt at 298.15 K by a steady state fluorescence method.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* 7<sup>th</sup> European Conference on Spectroscopy of Biological Molecules  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Pag. 331  
*Lugar de celebración:* San Lorenzo del Escorial (España) *Fecha:* 1997
- 
- 23.- *Autores:* [E. Junquera](#) y [E. Aicart](#)  
*Título:* Energetic study of the inclusion of the hydroxybenzoic acids in  $\beta$ -CD, DIMEB, or HPBCD in aqueous solution.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* 9<sup>th</sup> International Symposium on Cyclodextrins  
*Publicación:* Libro de resúmenes, 7-P-12  
*Lugar de celebración:* Santiago de Compostela (España) *Fecha:* 1998
- 
- 24.- *Autores:* [E. Junquera](#), M. Martín-Pastor y [E. Aicart](#)  
*Título:* Encapsulation of nonsteroidal antiinflammatory drugs by hydroxypropyl- $\beta$ -cyclodextrin in aqueous solution.  
*Tipo de participación:* Conferencia  
*Congreso:* 9<sup>th</sup> International Symposium on Cyclodextrins  
*Publicación:* Libro de resúmenes, 3-O-12  
*Lugar de celebración:* Santiago de Compostela (España) *Fecha:* 1998
- 
- 25.- *Autores:* [E. Aicart](#) y [E. Junquera](#)  
*Título:* Techniques for the characterization of surfactants, carbohydrates and host:guest systems in aqueous solution.  
*Tipo de participación:* Conferencia  
*Congreso:* 1<sup>st</sup> Minutes of the MICROCAP  
*Lugar de celebración:* Marsella (Francia) *Fecha:* 1999
- 
- 26.- *Autores:* N. Martínez, [E. Junquera](#) y [E. Aicart](#)  
*Título:* Estudio de los complejos de inclusión formados por los ácidos gálico y gálico con  $\beta$ -cyclodextrina en disolución acuosa.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* XXVII Reunión Bienal de la R. S. E. Química  
*Publicación:* Libro de resúmenes, S4-C-05  
*Lugar de celebración:* La Laguna (España) *Fecha:* 1999
- 
- 27.- *Autores:* [E. Junquera](#) y [E. Aicart](#)  
*Título:* Microencapsulation of drugs by  $\beta$ -cyclodextrin in water solution.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* 12<sup>th</sup> International Symposium on Microencapsulation  
*Publicación:* Libro de resúmenes, 26  
*Lugar de celebración:* Londres (Reino Unido) *Fecha:* 1999
- 
- 28.- *Autores:* C. Merino, [E. Junquera](#), J. Jiménez-Barbero y [E. Aicart](#)  
*Título:* Spectroscopic and thermodynamic studies of the procaine hydrochloride/ $\beta$ -cyclodextrin/water ternary system.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* 12<sup>th</sup> International Symposium on Microencapsulation  
*Publicación:* Libro de resúmenes, 27  
*Lugar de celebración:* Londres (Reino Unido) *Fecha:* 1999
-

- 
- 29.- *Autores:* [E. Aicart](#) y [E. Junquera](#)  
*Título:* Techniques and characterization for end user applications.  
*Tipo de participación:* Conferencia  
*Congreso:* 1<sup>st</sup> MICROCAP Workshop, University of London, UK  
*Lugar de celebración:* Londres (Reino Unido) *Fecha:* 1999
- 
- 30.- *Autores:* [E. Junquera](#) y [E. Aicart](#)  
*Título:* Estudio termodinámico y espectral de sistemas ternarios n-octil-β-D-glucopiranosido / sal / agua.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Congreso:* 4<sup>a</sup> Reunión Grupo de Coloides e Interfases de la Real Soc. Esp. Química  
*Publicación:* Libro de resúmenes, P1  
*Lugar de celebración:* Barcelona (España) *Fecha:* 2000
- 
- 31.- *Autores:* [E. Aicart](#) y [E. Junquera](#)  
*Título:* Molecular encapsulation by cyclodextrins.  
*Tipo de participación:* Conferencia  
*Congreso:* 3<sup>rd</sup> Minutes of the MICROCAP  
*Lugar de celebración:* París (Francia) *Fecha:* 2000
- 
- 32.- *Autores:* [E. Aicart](#) y [E. Junquera](#)  
*Título:* Molecular encapsulation of caffeine with hydroxypropyl-β-cyclodextrin.  
*Tipo de participación:* Conferencia  
*Congreso:* 3<sup>rd</sup> Minutes of the MICROCAP  
*Lugar de celebración:* París (Francia) *Fecha:* 2000
- 
- 33.- *Autores:* [E. Junquera](#), J. C. Romero y [E. Aicart](#)  
*Título:* Association of tricyclic antidepressants with β-cyclodextrin in aqueous solution.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Comunicación P-063  
*Congreso:* 13<sup>th</sup> International Symposium on Microencapsulation  
*Lugar de celebración:* Angers (Francia) *Fecha:* 2001
- 
- 34.- *Autores:* [E. Junquera](#), A. Pasero y [E. Aicart](#)  
*Título:* Electrochemical study of the chelation of Cu<sup>2+</sup> cation by 18-crown-6-ether and hydroxybenzoic acids in aqueous solution.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Comunicación P-064  
*Congreso:* 13<sup>th</sup> International Symposium on Microencapsulation  
*Lugar de celebración:* Angers (Francia) *Fecha:* 2001
- 
- 35.- *Autores:* [E. Aicart](#) y [E. Junquera](#)  
*Título:* Mixed micelles of cationic alkylsurfactants  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Comunicación P-079-A  
*Congreso:* 14<sup>th</sup> SIS Surfactants in Solution Symposium  
*Lugar de celebración:* Barcelona (España) *Fecha:* 2002 *Carácter:* Internacional
- 
- 36.- *Autores:* [E. Junquera](#), y [E. Aicart](#)  
*Título:* Self-aggregation of the tricyclic antidepressants drugs, imipramine, desimipramine and amitriptyline in aqueous solution.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Comunicación P-061-A  
*Congreso:* 14<sup>th</sup> SIS Surfactants in Solution Symposium  
*Lugar de celebración:* Barcelona (España) *Fecha:* 2002 *Carácter:* Internacional
-

- 37.- *Autores:* [E. Junquera](#) y E. Aicart  
*Título:* Modelización de sistemas micelares mixtos de tensioactivos catiónicos  
*Tipo de participación:* Conferencia  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Comunicación O-22  
*Congreso:* 5ª Reunión Grupo de Coloides e Interfases de la Real Soc. Esp. Química  
*Lugar de celebración:* Vigo (España) *Fecha:* 2003 *Carácter:* Nacional
- 
- 38.- *Autores:* A. Rodríguez, [E. Junquera](#), P. del Burgo y E. Aicart  
*Título:* Caracterización del proceso de micelización mixta del bromuro de dodeciltrimetilamonio y el hidrocloreuro de amitriptilina en medio acuoso  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Comunicación P-47  
*Congreso:* 5ª Reunión Grupo de Coloides e Interfases de la Real Soc. Esp. Química  
*Lugar de celebración:* Vigo (España) *Fecha:* 2003 *Carácter:* Nacional
- 
- 39.- *Autores:* [E. Junquera](#), A. Rodríguez, P. del Burgo y [E. Aicart](#)  
*Título:* Solubilización del Fármaco Antidepresivo Hidrocloreuro de Amitriptilina en Agregados Micelares en Medio Acuoso.  
*Tipo de participación:* Póster (ponente)  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Comunicación S4-P6  
*Congreso:* 100 RSEF-RSEQ. XXIX Reunión Bienal de Química  
*Lugar de celebración:* Madrid (España) *Fecha:* 2003 *Carácter:* Internacional
- 
- 40.- *Autores:* [E. Junquera](#), P. del Burgo y [E. Aicart](#)  
*Título:* Mixed aggregation of the nonionic-ionic ternary system octyl- $\beta$ -d-glucopyranoside / dodecyltrimethylammonium bromide / H<sub>2</sub>O  
*Tipo de participación:* Póster (ponente)  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Comunicación 157-SP  
*Congreso:* 11<sup>th</sup> International Conference on Surface and Colloid Science  
*Lugar de celebración:* Foz de Iguazú (Brasil) *Fecha:* 2003 *Carácter:* Internacional
- 
- 41.- *Autores:* [E. Junquera](#), P. del Burgo y [E. Aicart](#)  
*Título:* A theoretical approach for the mixed aggregation of octyl- $\beta$ -d-glucopyranoside and dodecyltrimethylammonium bromide in aqueous solution  
*Tipo de participación:* Póster (ponente)  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Comunicación 158-SP  
*Congreso:* 11<sup>th</sup> International Conference on Surface and Colloid Science  
*Lugar de celebración:* Foz de Iguazú (Brasil) *Fecha:* 2003 *Carácter:* Internacional
- 
- 42.- *Autores:* [E. Junquera](#) y E. Aicart  
*Título:* Mixed vesicles of di-dodecyldimethylammonium bromide/dodecylethyldimethylammonium bromide in water  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Comunicación P1.46  
*Congreso:* 18<sup>th</sup> Conference of the European Colloid and Interface Society  
*Lugar de celebración:* Almería (Spain) *Fecha:* 2004 *Carácter:* Internacional
- 
- 43.- *Autores:* A. Lainez, P. del Burgo, [E. Junquera](#) and E. Aicart  
*Título:* Mixed Aggregation of the Octyl- $\beta$ -D-Glucopyranoside/ Tetradecyltrimethylammonium Bromide in Water  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Comunicación P1.47  
*Congreso:* 18<sup>th</sup> Conference of the European Colloid and Interface Society  
*Lugar de celebración:* Almería (Spain) *Fecha:* 2004 *Carácter:* Internacional
-

- 44.- *Autores:* E. Junquera, P. del Burgo, y E. Aicart  
*Título:* Caracterización de sistemas complejos que forman agregados mixtos: Bromuro de didodecildimetilamonio y tensioactivos catiónicos en medio acuoso  
*Tipo de participación:* Conferencia  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Comunicación S6O01, p. 113  
*Congreso:* VI Reunión del Grupo Especializado de Coloides e Interfases y I Reunión Ibérica de Coloides e Interfases  
*Lugar de celebración:* Salamanca (Spain) *Fecha:* 2005 *Carácter:* Internacional
- 
- 45.- *Autores:* E. Lorente, E. Junquera, A. Rodriguez, y E. Aicart  
*Título:* The solubilization of the local anesthetic drug, tetracaine, in non ionic and ionic micelles, and in vesicles of several surfactants in water  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Comunicación P8, pg. 36  
*Congreso:* M3: Molecules, Materials and Medicines  
*Lugar de celebración:* Reykjavik, (Iceland) *Fecha:* 2007 *Carácter:* Internacional
- 
- 46.- *Autores:* J. Cano, E. Junquera, A. Rodriguez, y E. Aicart  
*Título:* Molecular encapsulation of tricyclic antidepressant drugs (amitriptyline and imipramine) by hydroxypropyl- $\beta$ -cyclodextrin in water.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Comunicación P09, pg. 37  
*Congreso:* M3: Molecules, Materials and Medicines  
*Lugar de celebración:* Reykjavik, (Iceland) *Fecha:* 2007 *Carácter:* Internacional
- 
- 47.- *Autores:* M.B. Sierra, E. Junquera, E. Aicart, P.C. Schulz y M.A. Morini  
*Título:* Estudio de la agregación a baja concentración de una mezcla de oleato de sodio y linoleato de sodio  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, pg. 70, D07  
*Congreso:* XV Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica  
*Lugar de celebración:* Buenos Aires (Argentina) *Fecha:* 2007 *Carácter:* Internacional
- 
- 48.- *Autores:* M.B. Sierra, M.A. Moroni, P.C. Schulz, E. Junquera y E. Aicart  
*Título:* El Efecto de los dobles enlaces en la formación de micelas mezcladas  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, pg. 71, D11  
*Congreso:* XV Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica  
*Lugar de celebración:* Buenos Aires (Argentina) *Fecha:* 2007 *Carácter:* Internacional
- 
- 49.- *Autores:* A. Rodriguez, E. Aicart y E. Junquera  
*Título:* Electrochemical, microscopic and spectroscopic studies of DODAB/DOPE-DNA and DSTAP/DOPE-DNA lipoplexes  
*Tipo de participación:* Conferencia  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Comunicación OC#3.2, pg. 30  
*Congreso:* VII Reunión del Grupo Especializado de Coloides e Interfases y II Reunión Ibérica de Coloides e Interfases  
*Lugar de celebración:* Coimbra (Portugal) *Fecha:* 2007 *Carácter:* Internacional
- 
- 50.- *Autores:* A. Rodriguez, E. Aicart y E. Junquera  
*Título:* Lipoplejos: compactación de la molécula de ADN mediante liposomas catiónicos  
*Tipo de participación:* Conferencia  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Comunicación G403, pg. 177  
*Congreso:* XXXI Reunión Bienal de la RSEQ  
*Lugar de celebración:* Toledo (Spain) *Fecha:* 2007 *Carácter:* Nacional
-

- 51.- *Autores:* R. Chicharro, V. I. Doderó, A. Viso, R. Fernández de la Pradilla, N. Lwoff, A. B. García, E. Aicart, E. Junquera, M. Martín-Fontecha, S. Ortega-Gutiérrez, B. Benhamú, M. L. López-Rodríguez  
*Título:* Labeling of ligands for the study of serotonin 5-HT<sub>1A</sub> and 5-HT<sub>6</sub> receptors  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, pág. 166  
*Congreso:* XV Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica  
*Lugar de celebración:* San Lorenzo del Escorial *Fecha:* 2007 *Carácter:* Nacional
- 
- 52.- *Autores:* M. B. Sierra, M. A. Moroni, J. L. Rodríguez, E. Junquera, E. Aicart y P. C. Schulz  
*Título:* Estudio de la agregación a baja concentración de una mezcla acuosa de oleato y linoleato de sodio  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, pág. 194  
*Congreso:* Congreso Iberoamericano Química. 75 años de la Sociedad de Química. XXIV Congreso Peruano de Química  
*Lugar de celebración:* Cuzco (Perú) *Fecha:* 2008 *Carácter:* Internacional
- 
- 53.- *Autores:* A. Rodríguez, E. Aicart y E. Junquera  
*Título:* Electrochemical and Spectroscopic Aspects of the Formation Process of Octadecyltrimethylammonium Bromide/DNA Surfoplexes  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Contribución 423, pág. 133  
*Congreso:* ICSCS2009, 13th Intl. Association of Colloid & Interface Scientists Conference on Surface and Colloid Science  
*Lugar de celebración:* Nueva York (EEUU) *Fecha:* 2009  
*Carácter:* Internacional
- 
- 54.- *Autores:* A. Martín-Molina, A. Rodríguez, O. Llorca, C. Martínez-Beas, E. Aicart y E. Junquera  
*Título:* Compaction Mechanism of DNA by Cationic Vesicles: An Experimental And Theoretical Approach  
*Tipo de participación:* Comunicación oral  
*Publicación:* Libro de resúmenes, Contribución 1222, pág. 364  
*Congreso:* ICSCS2009, 13th Intl. Association of Colloid & Interface Scientists Conference on Surface and Colloid Science  
*Lugar de celebración:* Nueva York (EEUU) *Fecha:* 2009  
*Carácter:* Internacional
- 
- 55.- *Autores:* E. Junquera  
*Título:* Complex Colloidal Systems: A Vectorization Tool  
*Tipo de participación:* Conferencia Plenaria Invitada  
*Publicación:* Libro de resúmenes, pág. 39  
*Congreso:* III Reunión Ibérica de Coloides e Interfases (RICI) y VIII Reunión del Grupo Especializado de Coloides e Interfases (GECI)  
*Lugar de celebración:* Granada (España) *Fecha:* 2009  
*Carácter:* Internacional
- 
- 56.- *Autores:* A. Rodríguez, A. Martín-Molina, C. Martínez-Beas, O. Llorca E. Aicart y E. Junquera  
*Título:* Effect of the Helper Zwitterionic Lipid on the Compaction Process of DNA by Cationic Lipids  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, pág. 165  
*Congreso:* III Reunión Ibérica de Coloides e Interfases (RICI) y VIII Reunión del Grupo Especializado de Coloides e Interfases (GECI)  
*Lugar de celebración:* Granada (España) *Fecha:* 2009  
*Carácter:* Internacional



- 57.- *Autores:* M. B. Sierra, M. A. Moroni, J. L. Rodríguez, R.M. Minardi, E.P. Schulz, M.A. Frechero, E. Junquera, E. Aicart y P. C. Schulz  
*Título:* Monocapas en la Interfase Aire/Solución de Mezclas de Bromuro de Deciltrimetilamonio y de Hexadeciltrimetilamonio. Una No Idealidad Causada por la Diferencia de Longitud de las Cadenas Hidrocarbonadas.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, CD  
*Congreso:* XVI Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica  
*Lugar de celebración:* Salta (Argentina) *Fecha:* 2009  
*Carácter:* Internacional  
*ISBN:* 978-987-633-025-1
- 
- 58.- *Autores:* H. Vázquez-Villa, D. Alonso, J. A. González Vera, F. Martínez Esperón, A. Viso, R. Fernández de la Pradilla, E. Aicart, E. Junquera, S. Ortega-Gutiérrez, B. Benhamú, M. L. López-Rodríguez  
*Título:* Synthesis of chemical probes for the study of serotonin 5-HT<sub>1A</sub> and 5-HT<sub>6</sub> receptors  
*Tipo de participación:* Presentación Oral  
*Congreso:* Escuela de verano: “Desarrollo de nuevos fármacos”, Universidad de Castilla-La Mancha  
*Lugar de celebración:* Toledo *Fecha:* 2009 *Carácter:* Internacional
- 
- 59.- *Autores:* M. Muñoz-Úbeda, A. Rodríguez-Pulido, A. Nogales, O. Llorca, E. Aicart y E. Junquera  
*Título:* Effect of the cationic lipid structure on the compaction process of DNA.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, comunicación P-306, p. 524  
*Congreso:* International Soft Matter Conference 2010  
*Lugar de celebración:* Granada (España) *Fecha:* 2010 *Carácter:* Internacional
- 
- 60.- *Autores:* A. Rodríguez-Pulido, A. Casado, M. Muñoz-Úbeda, E. Junquera y E. Aicart  
*Título:* Experimental and theoretical approach of the sodium decanoate-dodecanoate mixed system in aqueous solution.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, comunicación P-418, p. 651  
*Congreso:* Internacional Soft Matter Conference 2010  
*Lugar de celebración:* Granada (España) *Fecha:* 2010 *Carácter:* Internacional
- 
- 61.- *Autores:* A. Rodríguez-Pulido, M. Muñoz-Úbeda, E. Junquera y E. Aicart  
*Título:* Colloidal nanocompaction of DNA.  
*Tipo de participación:* Conferencia Invitada  
*Publicación:* Libro de resúmenes, comunicación Track 1-1, p. 040  
*Congreso:* BIT's 1st Annual World Conference of Nanomedicine 2010  
*Lugar de celebración:* Beijing (China) *Fecha:* 2010 *Carácter:* Internacional
- 
- 62.- *Autores:* A. B. Dávila-Ibáñez, E. Junquera, E. Aicart y V. Salgueirino  
*Título:* DNA functionalized magnetic nanoparticles.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, A24-P-2-47 (1770)  
*Congreso:* EUROMAT 2011. European Congress and Exhibition on Advanced and Materials and Processes  
*Lugar de celebración:* Montpellier (Francia) *Fecha:* 2011 *Carácter:* Internacional
-

- 63.- *Autores:* M. Muñoz-Úbeda, A. Lilia Barrán-Berdón, M. B. Sierra, C. Aicart-Ramos, J. Biswas, S. K. Mishra, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart  
*Título:* Biophysical and transfection studies of gemini/DOPE- pEGFP-C3 plasmid DNA lipoplexes.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, comunicación P6.14, pag. 181  
*Congreso:* IV Iberian Meeting on Colloids and Interfases, y IX Reunión Grupo de Coloides e Interfases de la Real Soc. Esp. Química.  
*Lugar de celebración:* Porto (Portugal) *Fecha:* 2011 *Carácter:* Internacional
- 
- 64.- *Autores:* A. Lilia Barrán-Berdón, M. Muñoz-Úbeda, M. B. Sierra, C. Aicart-Ramos, L. Pérez, M. R. Infante, E. Aicart y E. Junquera  
*Título:* Lysine derivated cationic lipid like genetic carriers: C<sub>6</sub>(N<sup>q</sup>LK)<sub>2</sub>.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, comunicación P6.1, pag. 168  
*Congreso:* IV Iberian Meeting on Colloids and Interfases, y IX Reunión Grupo de Coloides e Interfases de la Real Soc. Esp. Química.  
*Lugar de celebración:* Porto (Portugal) *Fecha:* 2011 *Carácter:* Internacional
- 
- 65.- *Autores:* M. Muñoz-Ubeda, A. L. Barrán, A. Rodríguez-Pulido, A. Martín-Molina, E. Junquera y E. Aicart  
*Título:* Cationic lipids as nonviral compacting agents of DNA.  
*Tipo de participación:* Conference  
*Publicación:* Libro de resúmenes, comunicación ID 10977, pag. 88-Tech. Coll.  
*Congreso:* 242<sup>nd</sup> American Chemical Society National Meeting & Exposition  
*Lugar de celebración:* Denver (USA) *Fecha:* 2011 *Carácter:* Internacional
- 
- 66.- *Autores:* A. L. Barrán-Berdón, M. Muñoz-Ubeda, M. B. Sierra, C. Aicart-Ramos, L. Pérez, M. R. Infante, E. Aicart y E. Junquera  
*Título:* Physicochemical characterization of lipoplex formed by lisyne derivated cationic lipids with plasmidic DNA and linear DNA.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, p. 79  
*Congreso:* VIII Simposio de Investigadores Jóvenes de la RSEQ  
*Lugar de celebración:* Torremolinos (España) *Fecha:* 2011 *Carácter:* Nacional
- 
- 67.- *Autores:* M. Muñoz-Úbeda, A. L. Barrán-Berdón, C. Aicart-Ramos, S. K. Mishra, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart  
*Título:* Gemini/DOPE-plasmid DNA lipoplexes: A biophysical characterization.  
*Tipo de participación:* Conferencia  
*Publicación:* Libro de resúmenes, C-20, p. 44  
*Congreso:* VIII Congreso de Investigadores Jóvenes de la RSEQ  
*Lugar de celebración:* Torremolinos (España) *Fecha:* 2011 *Carácter:* Nacional
- 
- 68.- *Autores:* M. Muñoz-Úbeda, A. L. Barrán-Berdón, S. K. Misra, S. Bhattacharya, E. Junquera y E. Aicart  
*Título:* Compaction of pEGFP-C3 plasmid DNA by several gemini/DOPE mixed liposomes.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, P1.38  
*Congreso:* Colloids and Nanomedicine  
*Lugar de celebración:* Amsterdam (Holanda) *Fecha:* 2012 *Carácter:* Internacional
- 
- 69.- *Autores:* S. K. Misra, M. Muñoz-Úbeda, S. Datta, E. Junquera, E. Aicart y S. Bhattacharya  
*Título:* Investigation of high transfection efficiency and low cytotoxicity of small spacer cationic gemini surfactants based lipoplexes with plasmid DNA by small-angle X-ray scattering.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, SP38  
*Congreso:* 12<sup>th</sup> International Conference on Surface X-ray and Neutron Scattering  
*Lugar de celebración:* Kolkata (India) *Fecha:* 2012 *Carácter:* Internacional
-

- 70.- *Autores:* A. Lilia Barrán-Berdón, M. Muñoz-Úbeda, M. B. Sierra, C. Aicart-Ramos, L. Pérez, M. R. Infante, E. Aicart y E. Junquera  
*Título:* How chirality may affect to the self-aggregation pattern of lysine-based cationic gemini lipids and their interaction with plasmid DNA?. Ribbon-type and cluster-type lipoplexes.  
*Tipo de participación:* Póster presentado y defendido oralmente PREMIO LANGMUIR  
*Publicación:* Libro de resúmenes, comunicación PSS21, pag. 139  
*Congreso:* V Iberian Meeting on Colloids and Interfases, RIC15  
*Lugar de celebración:* Donostia (España) *Fecha:* 2013 *Carácter:* Internacional
- 
- 71.- *Autores:* A. L. Barrán-Berdón, S.K. Misra, S. Bhattacharya, E. Junquera y E. Aicart  
*Título:* Cationic Gemini lipids possessing oxyethylene spacers as plasmid vectors in gene therapy.  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, P-33  
*Congreso:* X Simposio de Investigadores Jóvenes  
*Lugar de celebración:* Madrid *Fecha:* 2013 *Carácter:* Nacional
- 
- 72.- *Autores:* A. L. Barrán-Berdón, B. Yélamos, E. Aicart y E. Junquera  
*Título:* The Role of Ca<sup>2+</sup> on the Interaction in Lipoplexes Formed by PlasmidDNA and Anionic Mixed Liposomes.  
*Tipo de participación:* Comunicación  
*Publicación:* Libro de resúmenes, O1.2  
*Congreso:* II Reunion de Jóvenes Investigadores en Coloides e Interfases, JICI2  
*Lugar de celebración:* Granada *Fecha:* 2014 *Carácter:* Nacional
- 
- 73.- *Autores:* A. L. Barrán-Berdón, K. Kumar, S. Bhattacharya, E. Junquera y E. Aicart  
*Título:* Efficient Non-viral Vectors in Gene Therapy: Cationic Gemini Lipids Possessing Oxyethylene Spacer and Imidazol Heads  
*Tipo de participación:* Comunicación  
*Publicación:* Libro de resúmenes, O8.8  
*Congreso:* 20th International Symposium on Surfactants in Solution (SIS 2014)  
*Lugar de celebración:* Coimbra (Portugal) *Fecha:* 2014 *Carácter:* Internacional
- 
- 74.- *Autores:* M. Martínez-Negro, A. L. Barrán-Berdón, M.L. Moyá, E. Aicart y E. Junquera  
*Título:* Compaction of a Plasmid DNA by Cationic Liposomes constituted by either a Gemini Lipid and/or its Monomeric;Countpart  
*Tipo de participación:* Póster  
*Publicación:* Libro de resúmenes, P8.4  
*Congreso:* 20th International Symposium on Surfactants in Solution (SIS 2014)  
*Lugar de celebración:* Coimbra (Portugal) *Fecha:* 2014 *Carácter:* Internacional
- 
- 75.- *Autores:* M. Martinez-Negro, K. Kumar, A. Lilia Barrán-Berdón, S. Bhattacharya, E. Aicart y E. Junquera  
*Título:* Lipoplex formed by imidazolium oligo-oxyethylene based cationic lipids and monooleinglycerol compact siRNA with cubic structures tah improve gene silencing  
*Tipo de participación:* Comunicación oral  
*Publicación:* Libro de resúmenes, comunicación O2.2, pag. 60  
*Congreso:* VI Iberian Meeting on Colloids and Interfases, RIC16  
*Lugar de celebración:* Guimaraes (Portugal) *Fecha:* 2015 *Carácter:* Internacional
-

## TESIS DOCTORALES DIRIGIDAS

- 1.- *Título:* Procesos de agregación en sistemas coloidales complejos: Micelas y Vesículas mixtas  
*Doctorando:* PATRICIA DEL BURGO ESTEVEZ  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 7 de Mayo 2007  
*Calificación:* Sobresaliente CUM LAUDE
- 2.- *Título:* Compactación Coloidal del ADN: Lipoplejos y Surfoplejos  
*Doctorando:* ALBERTO RODRÍGUEZ PULIDO  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 14 de Mayo de 2009  
*Calificación:* Sobresaliente CUM LAUDE
- 3.- *Título:* Lipofección del DNA con nanovectores coloidales de interés en terapia génica  
*Doctorando:* MÓNICA MUÑOZ ÚBEDA (**Premio Extraordinario de Doctorado**)  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 28 de Febrero de 2013  
*Calificación:* Sobresaliente CUM LAUDE
- 4.- *Título:* Derivados Lipídicos Biocompatibles: una mejora en la transfección coloidal del DNA  
*Doctorando:* ANA LILIA BARRÁN  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 21 de Mayo de 2015  
*Calificación:* Sobresaliente CUM LAUDE
- 5.- *Título:* Nuevas estrategias de compactación y transfección de pDNA/siRNA en terapia génica  
*Doctorando:* MARIA MARTINEZ NEGRO  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 2013- en curso

## DEAs DIRIGIDOS

- 1.- *Título:* Agregados supramoleculares mixtos en disolución acuosa. Análisis experimental y teórico.  
*Doctorando:* PATRICIA DEL BURGO ESTÉVEZ  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 2004  
*Calificación:* Sobresaliente
- 2.- *Título:* Compactación de ADN con liposomas catiónicos.  
*Doctorando:* ALBERTO RODRÍGUEZ PULIDO  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 2007  
*Calificación:* Sobresaliente
- 3.- *Título:* Nanocompactación coloidal del ADN  
*Doctorando:* MÓNICA MUÑOZ ÚBEDA  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 2010  
*Calificación:* Sobresaliente

---

## TESIS DE LICENCIATURA DIRIGIDAS

---

- 1.- *Título:* Estudio del complejo de inclusión de  $\beta$ -ciclodextrina y bromuro de dodeciltrimetilamonio.  
*Doctorando:* FRANCISCO JAVIER GONZALEZ BENITO  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 1992

---

  - 2.- *Título:* Microencapsulación de los bromuros de dodeciltrimetilamonio y dodeciletildimetilamonio con  $\beta$ -ciclodextrina o con 2,6-di-O-metil- $\beta$ -ciclodextrina.  
*Doctorando:* LOURDES PEÑA DE LA IGLESIA  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 1993

---

  - 3.- *Título:* Comportamiento del n-octil- $\beta$ -glucopiranosido en disolución, en ausencia y presencia de electrolitos.  
*Doctorando:* OSCAR PASTOR ROJO  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 1997

---

  - 4.- *Título:* Determinación simultánea de constantes de asociación de complejos ciclodextrina:ácido/base conjugados. Estudio del sistema  $\beta$ -CD y derivados del ácido salicílico. Efecto de la temperatura y del disolvente.  
*Doctorando:* DAVID RUIZ VICENTE  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 1998

---

  - 5.- *Título:* Termodinámica del proceso de encapsulación molecular del ácido gentísico y del ácido gálico en disolución acuosa.  
*Doctorando:* NOELIA MARTÍNEZ SANZ  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 1999

---

  - 6.- *Título:* Vectorización de un anestésico local, el clorhidrato de procaina, en disolución acuosa.  
*Doctorando:* M<sup>a</sup> DEL CAMINO MERINO BENITO  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 1999
-

## PROYECTOS DE LICENCIATURA DIRIGIDOS

---

- 1.- *Título:* Estudio de las Interacciones Carbohidrato-Carbohidrato en Agua  
*Doctorando:* DANIA OLMOS DÍAZ  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 2000

---

  - 2.- *Título:* ASOCIACIÓN DE FÁRMACOS QUELANTES CON METALES PESADOS  
*Doctorando:* AITOR PASERO GARCÍA  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 2000

---

  - 3.- *Título:* Solubilización de fármacos en agregados supramoleculares.  
*Doctorando:* JESSICA CANO RUBIO  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 2006

---

  - 4.- *Título:* Vectorización coloidal de sustratos de interés biológico.  
*Doctorando:* ELENA LORENTE GALÁN  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 2006

---

  - 5.- *Título:* Genosomas: vectorización de la molécula de ADN con liposomas catiónicos.  
*Doctorando:* IRENE NAVARRO SERRANO  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 2006

---

  - 6.- *Título:* Caracterización de Nanoestructuras Coloidales Mixtas.  
*Doctorando:* AITOR CASADO RUFAS  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 2008
- 

## TRABAJOS FIN DE GRADO DIRIGIDOS

---

- 1.- *Título:* Nuevos Vectores No Virales de Ácidos Nucleicos: Compactación y Caracterización Biofísica  
*Doctorando:* MARTA MURILLO SÁNCHEZ  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 2015
- 

## ESTANCIAS ERASMUS PLUS DIRIGIDAS

---

- 1.- *Título:* Biophysical Characterization of Lipoplexes and/or CDplexes  
*Graduado:* Paolo Tentori  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Facultad / Escuela:* Ciencias Químicas  
*Año:* 2016
-

---

## ESTANCIAS DE INVESTIGACIÓN DIRIGIDAS (DE CIENTÍFICOS EXTRANJEROS)

1.-	Prof. T. Fergoug, Univ. Mascara (Argelia)	1 mes	<i>Fecha:</i> 2003
2.-	Prof. M.B. Sierra, Univ. Bahía Blanca (Argentina)	2 meses	<i>Fecha:</i> 2006
3.-	Prof. J.L. Rodríguez, Univ. Bahía Blanca (Argentina)	1 mes	<i>Fecha:</i> 2006
4.-	Prof. P.C. Schulz, Univ. Bahía Blanca (Argentina)	1 mes	<i>Fecha:</i> 2006
5.-	Prof. P.V. Messina, Univ. Bahía Blanca (Argentina)	1 mes	<i>Fecha:</i> 2006
6.-	Prof. J. Biswas, Indian Institute of Science (India)	2 mes	<i>Fecha:</i> 2010
7.-	Prof. A.B. Dávila, Univ. Santiago, (España)	2 semanas	<i>Fecha:</i> 2011
8.-	Prof. M.B. Sierra, Univ. Bahía Blanca (Argentina)	3 meses	<i>Fecha:</i> 2011
9.-	Prof. S. Bhattacharya, Indian Inst. Sci., Bangalore (India)	3 semanas	<i>Fecha:</i> 2011
10.-	Prof. S. K. Misra, Indian Inst. Sci., Bangalore (India)	6 semanas	<i>Fecha:</i> 2011
11.-	Prof. S. Bhattacharya, Indian Inst. Sci., Bangalore (India)	3 semanas	<i>Fecha:</i> 2012
12.-	Prof. K. Kumar, Indian Inst. Sci., Bangalore (India)	4 semanas	<i>Fecha:</i> 2013

---

## GRANDES EQUIPOS QUE UTILIZA O HA UTILIZADO

CLAVE : R= responsable, UA = usuario asiduo, UO = usuario ocasional

---

<i>Equipo:</i> Compresibilidad Isotérmica	<i>Fecha:</i> 1988-1992	<i>Clave:</i> UO
<i>Equipo:</i> Expansibilidad Isobárica	<i>Fecha:</i> 1988-1995	<i>Clave:</i> UO
<i>Equipo:</i> Velocidad del Sonido en Líquidos	<i>Fecha:</i> 1987-Cont.	<i>Clave:</i> UA
<i>Equipo:</i> Compresibilidad Adiabática	<i>Fecha:</i> 1987-Cont.	<i>Clave:</i> UA
<i>Equipo:</i> Capacidad Calorífica	<i>Fecha:</i> 1989	<i>Clave:</i> UO
<i>Equipo:</i> Densidad y Volumen Aparente	<i>Fecha:</i> 1988-Cont.	<i>Clave:</i> UA
<i>Equipo:</i> Técnicas Ultrasónicas de Relajación	<i>Fecha:</i> 1990-1992	<i>Clave:</i> UA
<i>Equipo:</i> Espectroscopía de Fluorescencia Dinámica (inducida por Láser)	<i>Fecha:</i> 1990-1992	<i>Clave:</i> UO
<i>Equipo:</i> Resonancia Magnética Nuclear Mono y Bidimensional	<i>Fecha:</i> 1994-1998	<i>Clave:</i> UA
<i>Equipo:</i> Microcalorimetría	<i>Fecha:</i> 1994-1997	<i>Clave:</i> UA
<i>Equipo:</i> Conductividad	<i>Fecha:</i> 1989-Cont.	<i>Clave:</i> R
<i>Equipo:</i> Potenciometría con electrodos selectivos (ISE)	<i>Fecha:</i> 1992-Cont.	<i>Clave:</i> R
<i>Equipo:</i> Espectroscopia de Fluorescencia	<i>Fecha:</i> 1994-Cont.	<i>Clave:</i> R
<i>Equipo:</i> Espectroscopia de UV-VIS-NIR	<i>Fecha:</i> 1996-Cont.	<i>Clave:</i> R
<i>Equipo:</i> Velocidad del Sonido+Densidad (sobre la misma muestra líquida). <b>PATENTADA</b>	<i>Fecha:</i> 1998-Cont.	<i>Clave:</i> UA
<i>Equipo:</i> Potencial Zeta (LDE-Láser Doppler Electroforesis)	<i>Fecha:</i> 2002-Cont.	<i>Clave:</i> R
<i>Equipo:</i> Turbidimetría	<i>Fecha:</i> 2002-Cont.	<i>Clave:</i> R
<i>Equipo:</i> DLS-PCS	<i>Fecha:</i> 2007-Cont.	<i>Clave:</i> UO
<i>Equipo:</i> Relajación Ultrasónica+Tamaño de Partícula	<i>Fecha:</i> 2007-Cont.	<i>Clave:</i> R
<i>Equipo:</i> SAXS (ALBA, Barcelona)	<i>Fecha:</i> 2014-Cont.	<i>Clave:</i> UO

---



**Experiencia de Gestión de I+D**  
**Gestión de programas, planes y acciones de I+D**

---

Título:	Tesorera del Grupo Especializado de Coloides e Interfases
Tipo de actividad:	Gestión de cuentas, gestión de la web (mantenimiento, actualización, etc)
Fecha:	2006-2016

---

Título:	Miembro del Comité Científico del III Reunión Ibérica de Coloides e Interfases (RICI3) y VIII Reunión del Grupo Especializado de Coloides e Interfases (GECI)
Tipo de actividad:	Gestión de los aspectos científicos del encuentro/congreso
Fecha:	2009

---

Título:	Miembro del Panel de Expertos Evaluadores de MICINN
Tipo de actividad:	Evaluación y Seguimiento de Proyectos de Investigación
Fecha:	2010 – 2011, 2015, 2016

---

Título:	Miembro del Comité Organizador del 4th International Colloids Conference, Surface and Design Engineering
Tipo de actividad:	Organización del Congreso
Fecha:	2014

## OTROS MÉRITOS O ACLARACIONES QUE SE DESEE HACER CONSTAR

### BECAS

Beca Predoctoral de Formación de Personal Investigador (FPI) del Ministerio de Educación y Ciencia. (1989-1991)  
Beca Predoctoral de Formación de Personal Investigador (FPI, Plan: Estancias Cortas en el Extranjero) del Ministerio de Educación y Ciencia. Mayo-Octubre 1990 (Canadá).  
Beca "Del Amo" para estancia post-doctoral en University of California, Irvine. Julio 1997 - Febrero 1998.  
Becas de asistencias a cursos y/o seminarios

---

### PREMIOS

**Premio Extraordinario de Licenciatura.** Curso 1987/88 (18 de Mayo de 1990, Junta de Gobierno)  
**Premio Extraordinario de Doctorado** Curso 1991/92 (14 de Septiembre de 1993, Junta de Gobierno)

---

### COLABORACIONES DE INVESTIGACIÓN

- Prof. M. Costas (México, D.F.)	<i>Fecha:</i> 1990-94
- Prof. T.M. Letcher (Natal, Sudáfrica)	<i>Fecha:</i> 1990-95
- Prof. R.E. Verrall (Saskatoon, Canada)	<i>Fecha:</i> 1990-97
- Dr. D. J. Jobe (Pinawa, Canadá)	<i>Fecha:</i> 1990-97
- Dra. S. Penadés (CSIC, Sevilla)	<i>Fecha:</i> 1994-99
- Dr.. J. Jiménez-Barbero (CSIC, Madrid)	<i>Fecha:</i> 1994-2000
- Dres. J. Laynez y M. Menéndez (CSIC, Madrid)	<i>Fecha:</i> 1994-96
- Dr. M. Martín-Pastor (CSIC, Madrid)	<i>Fecha:</i> 1998
- Profs. S. López y M. Ruiz (Univ. Polit. Madrid)	<i>Fecha:</i> 1997-cont.
- Prof. J. Nowick (UCI, California)	<i>Fecha:</i> 1997-99
- Prof. F. Mendicuti (Univ. Alcalá)	<i>Fecha:</i> 1998-99
- A. J. Carrillo (ACIA, Barcelona)	<i>Fecha:</i> 1999
- Prof. P.C. Schulz (Bahía Blanca, Argentina)	<i>Fecha:</i> 2003-cont.
- Dr. J.M. Valpuesta (CNB-CSIC, Madrid)	<i>Fecha:</i> 2003
- Dr. O. Llorca (CIB-CSIC, Madrid)	<i>Fecha:</i> 2004-cont.
- Dra. J. Boskovic (CIB-CSIC, Madrid)	<i>Fecha:</i> 2004-cont.
- Dra. M <sup>a</sup> Luz López Rodríguez (UCM-Madrid)	<i>Fecha:</i> 2007-cont.
- Dr. Alberto Martín Molina (UGR, Granada)	<i>Fecha:</i> 2008-cont.
- Dra. Aurora Nogales (CSIC, Madrid)	<i>Fecha:</i> 2010-cont.
- Prof. S. Bhattachariya (Indian Institute of Science, Bangalore, India)	<i>Fecha:</i> 2010-cont.
- Dra. M <sup>a</sup> Rosa Infante (CSIC, Barcelona)	<i>Fecha:</i> 2010-cont.
- Dra. Lourdes Pérez (CSIC, Barcelona)	<i>Fecha:</i> 2010-cont.
- Dr. Pablo Castro Hartmann (UAB, Barcelona)	<i>Fecha:</i> 2010-cont.
- Dr. Marc Malfois (ALBA, Barcelona)	<i>Fecha:</i> 2013-cont.
- Prof. J.M. Benito (USevilla, Sevilla)	<i>Fecha:</i> 2013-cont.
- Prof. C. Ortiz-Mellet (USevilla, Sevilla)	<i>Fecha:</i> 2013-cont.
- Dr. J.M. García Fernández (CSIC, Sevilla)	<i>Fecha:</i> 2013-cont.
- Prof. L. García Río (USC, Santiago de Compostela)	<i>Fecha:</i> 2012-cont.
- Prof. M.L. Moyá (USevilla, Sevilla)	<i>Fecha:</i> 2013-cont.
- Dr. A. Somoza (IMDEA-Nanociencia, Madrid)	<i>Fecha:</i> 2015-cont
- Prof. C. Tros de Ilarduya (Univ. de Navarra)	<i>Fecha:</i> 2015-cont

---

### INFORMÁTICA

<i>Lenguajes de Programación:</i>	BASIC, TURBOBASIC, QUICKBASIC, FORTRAN, INICIACION C, LAB-VIEW.
<i>Sistemas Operativos:</i>	MS-DOS, NOS, VMS
<i>Aplicaciones:</i>	Entorno DOS y entorno WINDOWS: Procesadores de Texto: Word (Office) Gráficos: Grapher, SigmaPlot, Origin, Harward Hojas de Cálculo: Lotus123, Excel Bases de Datos: DBASE III, Reflex, EndNote Presentación: PowerPoint, Harward, Corel, PhotoShop
<i>Comunicaciones:</i>	Programación de interfases IEEE-Bus, RS-232C, LabView
<i>Redes Informáticas:</i>	Internet

---

---

**OTROS MÉRITOS**

Censor de la Revista Langmuir	Fecha: 1995-con.
Censor de la Revista Journal of Solution Chemistry	Fecha: 1996-con.
Censor de la Revista Journal of Molecular Liquids	Fecha: 1996-con.
Censor de la Revista Colloids and Surfaces	Fecha: 1995-con.
Censor de la Revista Journal Colloid Interface Science	Fecha: 1995-con.
Censor de la Revista Journal Inclusion Phenomena and Molecular Recognition in Chemistry	Fecha: 1995-con.
Censor de la Revista Journal of Organic Chemistry	Fecha: 1997-con.
Censor de la Revista Journal of Physical Chemistry	Fecha: 2000-con.
Censor de la Revista Food Hydrocolloids	Fecha: 2005-con.
Censor de la Revista Applied Spectroscopy	Fecha: 2006-con.
Censor de la Revista Molecules	Fecha: 2007-con.
Censor de la Revista Carbohydrate Research	Fecha: 2008-con.
Censor de la Revista BBA Biomembranes	Fecha: 2009-con.
Censor de Journal of Pharmaceutical & Biomedical Analysis	Fecha: 2009-con.
Censor de Chemical Physics Letters	Fecha: 2009-con.
Impartición de 1 Conferencia en University of Saskatchewan (Canadá)	Fecha: 1990
Impartición de 2 Conferencias en el IQO (CSIC)	Fecha: 1994-95
Impartición de 1 Conferencia en la UCM	Fecha: 1996
Impartición de 1 Conferencia en la UCI (California)	Fecha: 1998
1 Conferencia Plenaria Invitada (Jadavpur University, Kolkata, India)	Fecha: 2008
1 Conferencia Plenaria Invitada (RICI3 GRANADA)	Fecha: 2009
1 Conferencia Plenaria Invitada (SBE, GRANADA)	Fecha: 2015
Evaluador de la ANEP	Fecha: 2007-con.
Evaluador de la ISF (Israel Science Foundation)	Fecha: 2007-con.
Evaluador de la Dirección Xeral Investigación (Xunta de Galicia)	Fecha: 2007-con.
Evaluador de la Agencia para la Calidad del Sistema Universitario de Castilla y León	Fecha: 2008-con.
Evaluador de la Agencia Andaluza de Evaluación de la Calidad y Acreditación Universitaria	Fecha: 2009-con.
Concesión de 4 Quinquenios de Docencia	Fecha: 1991-2011
Concesión de 4 Sexenios de Investigación solicitados (todos) (MEC)	Fecha: 1988-2012
Traductor de 66 patentes de Química Polimérica y Química Coloidal	Fecha: 2000- con.
<b>CURSOS/SEMINARIOS RECIBIDOS:</b>	
<i>Química Iónica (con Beca), UIMP</i>	Fecha: 1988
<i>Modelos Teóricos e Informáticos en la Química Actual, Fundación Ramón Areces</i>	Fecha: 1989
<i>Fourth Europhysics Summer School, Molecular Dynamics, Universidad de Murcia</i>	Fecha: 1989
<i>Láseres y Reacciones Químicas, Cursos Verano UCM</i>	Fecha: 1989
<i>Fusión Nuclear por Confinamiento Magnético, UIMP</i>	Fecha: 1989
<i>Sistemas Tensioactivos Emulsiones y Microemulsiones de Interés Técnico, UPV</i>	Fecha: 1992
<i>Propiedades, Caracterización y Aplicaciones de los Sistemas Coloidales, Univ. Alcalá de Henares</i>	Fecha: 1993
<i>I Jornadas de Asignaturas Piloto UCM.: La Docencia en el EEES</i>	Fecha: 2005
<i>Química de Superficies: Tensión Superficial, Ángulo de Contacto y Energía Libre, UC3M</i>	Fecha: 2006

---



---

Comisión Interministerial de Ciencia y  
Tecnología

---

## Curriculum vitae

Nombre: Otilia Mó Romero

Fecha: 10/02/2014

Research ID : A-7035-2012

Orchid Numero- 000-003-2596-5987

*Plan Nacional de I+D+I (2000-2003)*

Fecha de nacimiento :

Sexo: M

---

### Situación profesional actual

Organismo: Universidad Autónoma de Madrid

Facultad, Escuela o Instituto: Ciencias

Depto./Secc./Unidad estr.: Química

Dirección postal: Departamento de Química, C-9. Universidad Autónoma de Madrid. Cantoblanco. 28049-Madrid

Teléfono (indicar prefijo, número y extensión): 91-397-4511

Fax: 91-396-5238

Correo electrónico: otillia.mo@uam.es

Especialización (Códigos UNESCO): 2307-2210

Catedrática de Universidad

Fecha de inicio: Mayo 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.

Reactividad Intrínseca . Procesos de Interés en Química de la Atmósfera. Enlaces de Hidrógeno. Nuevos Materiales Moleculares.

---

### Formación Académica

Titulación Superior	Centro	Fecha
Licenciada en Ciencias Químicas	Univ. Santiago de Compostela	1970
Grado de Licenciatura en C. Químicas	Univ. Santiago de Compostela	1971

Doctorado	Centro	Fecha
Ciencias Químicas	Universidad Autónoma de Madrid	1974

---

### Actividades anteriores de carácter científico profesional

Puesto

Institución

Fechas

Becaria de FPI	Universidad Autónoma de Madrid	1971-73
Postdoctoral Res. Asociated	Carnegie-Mellon University	1974-76
Prof. Adjunto Interino	Universidad Autónoma de Madrid	1976-77
Prof. Adjunto Numerario	Universidad Autónoma de Madrid	1978-83
Prof. Titular de Universidad	Universidad Autónoma de Madrid	1983-00

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

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

## **PARTICIPACION EN PROYECTOS DE INVESTIGACION FINANCIADOS EN LOS ULTIMOS 10 AÑOS**

---

TITULO DEL PROYECTO: Profesores Visitantes Iberdrola.

ENTIDAD FINANCIADORA: Fundación Iberdrola.

DURACION DESDE: 1999 HASTA: 2002

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez .

---

TITULO DEL PROYECTO: Determinación experimental de la acidez y basicidad en fase gaseosa de sistemas insaturados heteroatómicos por espectrometría de masas de resonancia ciclotrónica de iones (ICR) y modelización mediante cálculos ab initio.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGES Acción Integrada Hispano-Francesa HF2000-0040

DURACION DESDE: 2000 HASTA: 2002

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad de Acidos hidroxycarboxilicos con cationes metálicos. Estudio Teórico y experimental de la formación, solvatación y reactividad de las especies organometálicas formadas.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGES Acción Integrada Hispano-Frances HF 1999-0015.

DURACION DESDE: 2000 HASTA: 2002

INVESTIGADOR PRINCIPAL: O. Mó.

---

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad iónica y clusters. Aplicaciones bioquímicas y medioambientales.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MCYT BQU2000-0245

DURACION DESDE: 2000 HASTA: 2003

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Complejación en fase gaseosa de ácidos ribonucleicos y desoxirribonucleicos con cationes  $Pb^{2+}$  en presencia de  $Mg^{2+}$ . Estudio teórico y experimental

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI-MCyT Acción Integrada Hispano-Frances HF 2001-0042.

DURACION DESDE: 2002 HASTA: 2004

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Red de excelencia en Química Teórica y Computacional.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MCYT BQU2001-5037-E

DURACION DESDE: 2003 HASTA: 2004

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Intrinsic Reactivity of New Molecular Materials.

ENTIDAD FINANCIADORA: Cost Action D26 /0014/03

DURACION DESDE: 2003 HASTA: 2007

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad intrínseca de Nuevos Materiales Moleculares.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MCYT BQU2003-00894

DURACION DESDE: 2003 HASTA: 2006

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Estructura y Dinámica en Procesos de Reactividad Química.

ENTIDAD FINANCIADORA: Proyectos de Investigación UAM-Grupo Santander Para la Cooperación con América Latina.

DURACION DESDE: 1-1-2006 HASTA: 31-12-2007

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Florentino Borondo Rodríguez

---

TITULO DEL PROYECTO: Materiales Foto- y Electroactivos para Celulas Solares Orgánicas e Híbridas. (MADRISOLAR)

ENTIDAD FINANCIADORA: Dirección General de Universidades e Investigación. Consejería de Educación. CAM. P-PPQ-000225-0505.

DURACION DESDE: 2006 HASTA: 2010

INVESTIGADOR PRINCIPAL: N. Martín.

---

TITULO DEL PROYECTO: Modelización de Materiales Moleculares y Nanoestructuras.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MEC CTQ2006-08558

DURACION DESDE: 2006 HASTA: 2009

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: International Seminar in Theoretical Chemistry and Computational Modelling.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MEC CTQ2006-28324-E

DURACION DESDE: 2007 HASTA:

INVESTIGADOR PRINCIPAL: O. Mó.

---

TITULO DEL PROYECTO: CONSOLIDER on Molecular Nanoscience.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MEC CSD 2007-00010

DURACION DESDE: 2007 HASTA: 2011

COORDINADOR: E. Coronado.

---

TITULO DEL PROYECTO: Clusters as building blocks in nanotechnology.

ENTIDAD FINANCIADORA: Acción Integrada Hispano-Francesa HF2007-0067

DURACION DESDE: 2007 HASTA: 2009

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Alcamí

---

--TITULO DEL PROYECTO: Chemistry with Ultrashort Pulses and Free-Electron Lasers: Looking for Control Strategies Through <sup>3</sup>Exact<sup>2</sup> Computations. COST action CM0702.

ENTIDAD FINANCIADORA: European Science Foundation

DURACION DESDE: 2008 HASTA: 2012

INVESTIGADOR PRINCIPAL: F. Martín

---

TITULO DEL PROYECTO: Dinámica de moléculas y clusters en fase gas y superficies.

ENTIDAD FINANCIADORA: Centro Estudios de America Latina de la UAM (CEAL-UAM) y Banco de Santander

DURACION DESDE: 2009 HASTA: 2010

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Alcamí

---

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad en fase gas. Nuevos materiales moleculares y discriminación quiral.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGPTC- MICINN CTQ2009-13129-C02-01

DURACION DESDE: 2009 HASTA: 2012

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Estudio de la Interacción de Iones de Metales Pesados con Biomoléculas.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MICINN CTQ2009-07197-E

DURACION DESDE: 2010 HASTA: 2012

INVESTIGADOR PRINCIPAL: O. Mó.

---



TITULO DEL PROYECTO: Materiales Foto- y Electroactivos para Celulas Solares Orgánicas e Híbridas. (MADRISOLAR2)

ENTIDAD FINANCIADORA: Dirección General de Universidades e Investigación. Consejería de Educación. CAM. S2009PPQ-1533.

DURACION DESDE: 2010 HASTA: 2014

INVESTIGADOR PRINCIPAL: N. Martín.

---

TITULO DEL PROYECTO: Gestión del Programa Consolider- Ingenio 2011-2012

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MICINN CTQ2011-13605-E

DURACION DESDE: 2012 HASTA: 2013

INVESTIGADOR PRINCIPAL: O. Mó.

---

TITULO DEL PROYECTO: Interacciones no-covalentes y Quiralidad en Nuevos Materiales

ENTIDAD FINANCIADORA: DGICT CTQ2012-35513-C02-01

DURACION DESDE: 2013 HASTA: 2016

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: ERASMUS MUNDUS “European Joint Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling (TCCM)”

ENTIDAD FINANCIADORA: European Commission. EACEA. Ref. EMMC FPA 2010-0147

DURACION DESDE: 2010 HASTA: 2019

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: XUV/X-ray Light and Fast ions for ultrafast chemistry. XLIC

ENTIDAD FINANCIADORA: European Science Foundation. COST Action CM 1204

DURACION DESDE: 2012 HASTA: 2016

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Alcamí

---

TITULO DEL PROYECTO: Dinámicas a diferentes escalas: desde moléculas pequeñas aisladas a nanodispositivos complejos.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI. CTQ2013-43698-P

DURACION DESDE: 2014 HASTA: 2016

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Alcamí.

---

TITULO DEL PROYECTO: Theoretical Chemistry and Computational Modelling. TCCM

ENTIDAD FINANCIADORA: European Commission. Research Executive Agency. **MSCA-ITN-EJD**. SEP-210137947

DURACION DESDE: 2015 HASTA: 2019

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Materiales Avanzados de Carbono para Fotovoltaica Molecular (FOTOCARBON)

ENTIDAD FINANCIADORA: Dirección General de Universidades e Investigación. Consejería de Educación. CAM. S2013/MIT-2841.

DURACION DESDE: 2014 HASTA: 2018

INVESTIGADOR PRINCIPAL: N. Martín

---

TITULO DEL PROYECTO: Modificación de la Reactividad y Diseño de Nuevos Materiales mediante Enlaces de Berilio y otras Interacciones No-Covalentes.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGICT CTQ2015-63997-C2-1-P

DURACION DESDE: 2016 HASTA: 2019

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

## PUBLICACIONES

---

1. AUTORES: O. Mó y M.A. Rios.  
TITULO: *Estudio Teórico de la Reactividad de Cresoles.*  
REF. REVISTA: *Afinidad* **38**, 1135 (1971). CLAVE=A
2. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J.I. Fernández Alonso.  
TITULO: *Theoretical study of charge-transfer complexes.*  
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem.*, **79**, 137 (1975). CLAVE=A
3. AUTORES: M. Yáñez, O. Mó and J.I. Fernández Alonso.  
TITULO: *A theoretical study of the electrophilic substitution on aminophenols and aminobenzenethiols.*  
REF. REVISTA: *Tetrahedron*, **31**, 245 (1977). CLAVE=A
4. AUTORES: J. Catalán, A. Macías, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Calculations on the inversion of anhydrous and hydrated aziridine.*  
REF. REVISTA: *Mol. Phys.*, **34**, 1429 (1977). CLAVE=A
5. AUTORES: O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Influence of polarization functions on molecular electrostatic potentials.*  
REF. REVISTA: *Theoret. Chim. Acta*, **47**, 263 (1978). CLAVE=A
6. AUTORES: J. Catalán, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Theoretical study of the structure of azetidine.*  
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.* **43**, 251 (1978). CLAVE=A
7. AUTORES: O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Structure and charge distribution of some alkynoyl cations. A theoretical study.*  
REF. REVISTA: *Theoret. Chim. Acta*, **53**, 337, (1979). CLAVE=A
8. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *Proton affinities and preferred protonation sites in 3- and 4- substituted pyridines. Prediction from 1s orbital energies.*  
REF. REVISTA: *J. Am. Chem. Soc.* **101**, 6520 (1979). CLAVE=A
9. AUTORES: M. Dorado, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study of the structure and charge distribution of some alkynylcarbenium ions.*  
REF. REVISTA: *J. Am. Chem. Soc.*, **102**, 947 (1980) CLAVE=A
10. AUTORES: J. Catalán, F. Escudero, J. Laso, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *The effect of substituents on the structure of dioxirane.*  
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.*, **69**, 217 (1980). CLAVE=A
11. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *Prediction of proton affinities and protonation sites using a multivariate linear correlation.*  
REF. REVISTA: *J. Chem. Soc. Perkin Trans. II*, 1409 (1982). CLAVE=A
12. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study of the structure, charge distribution and gas-phase basicity of 1H-indazole and its N-methyl derivatives.*  
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.*, **94**, 143 (1983). CLAVE=A

13. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study of the structure, charge distribution and gas-phase basicity of azaindoles.*  
REF. REVISTA: Tetrahedron, **39**, 2851 (1983). CLAVE=A
14. AUTORES: F. Escudero, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study of the charge distribution of aminopyridines, aminopyrimidines and some diazine N-oxides.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Soc. Perkin Trans. II, 1735 (1983). CLAVE=A
15. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *Theoretical study on the stable conformers of 1,3-diazetidone.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM, **106**, 251 (1984). CLAVE=A
16. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *Conformation of four-membered rings. Comparison between azetidone and 1,3-diazetidone.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM, **107**, 269 (1984). CLAVE=A
17. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *Influence of the tautomeric forms of azaindoles on their basicity in solution.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM, **107**, 263 (1984). CLAVE=A
18. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez, M. Yáñez and F. Amat-Guerri.  
TITULO: *Comparative study of the structure and properties of 1-methyl-7-azaindole and 7-methyl-7H-pyrrolo(2,3-b)pyridine, in their ground states.*  
REF. REVISTA: Nouv. J. Chim., **8**, 87 (1984). CLAVE=A
19. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, J.L.G. de Paz, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation of azanaphthalenes, azaindoles and purine bases. The "lone-pair charge" approach.*  
REF. REVISTA: Nucleic Acid Symposium Series, **14**, 105 (1984). CLAVE=A
20. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, J.L.G. de Paz, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study on the tautomer preference for 4(5)-substituted imidazoles.*  
REF. REVISTA: Nucleic Acid Symposium Series, **14**, 161 (1984). CLAVE=A
21. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, J.L.G. de Paz, P. Pérez, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *Basicity of azoles. Part 6. Calculated intrinsic basicities for methyl-substituted pyrazoles and imidazoles. Comparison to aqueous solution data: N-methylation effect.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem., **49**, 4379 (1984). CLAVE=A
22. AUTORES: F. Escudero, O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Structure and charge distribution of 4-substituted benzenediazonium ions.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **120**, 377 (1985). CLAVE=A
23. AUTORES: O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Calculation of radial couplings in the model potential and pseudopotential approaches. The NaH quasimolecule.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev., **A31**, 3977 (1985). CLAVE=A
24. AUTORES: L.F. Errea, L. Méndez, O. Mó and A. Riera.  
TITULO: *Nonadiabatic ionic-covalent transitions. Exponential model for the charge exchange and*

- neutralization reaction  $Na + H \rightarrow Na^+ + H$ .*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **84**, 147 (1985). CLAVE=A
25. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz, and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation energies and tautomerism of azoles. Basis set effects.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **90**, 5597 (1986). CLAVE=A
26. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz, and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation of azines. An ab initio molecular orbital study.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **150**, 135 (1987). CLAVE=A
27. AUTORES: R. Mendizábal, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Energies and radial couplings for the  $^1\Sigma$  and  $^3\Sigma$  states of  $NaHe^+$  quasimolecule.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **150**, 345 (1987). CLAVE=A
28. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *Binding of  $NH_4^+$  to azoles in the gas phase. A theoretical study of the  $N...H^+...N$  Ionic hydrogen bond.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem., **52**, 1713 (1987). CLAVE=A
29. AUTORES: F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Feshbach resonant energies and widths in a pseudopotential approach.*  
REF. REVISTA: Europhys. Lett. **4**, 799 (1987). CLAVE=A
30. AUTORES: F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Feshbach and pseudopotential theories. A useful analogy.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **87**, 6635 (1987). CLAVE=A
31. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation of three membered ring heterocycles. An ab initio molecular orbital study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **91**, 6484 (1987). CLAVE=A
32. AUTORES: O. Mó and A. Riera.  
TITULO: *Excitation and charge exchange in  $He^+ + Na$  collisions.*  
REF. REVISTA: J. Phys. B **21**, 119 (1988). CLAVE=A
33. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Counterpoise estimates of the BSSE in the evaluation of protonation energies.*  
REF. REVISTA: Theoret. Chim. Acta **73**, 307 (1988). CLAVE=A
34. AUTORES: F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Energies and widths of ( $1s^2 3131'$ ) resonant states of  $C^{2+}$ ,  $N^{5+}$ ,  $O^{4+}$  and  $N^{6+}$ .*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. A **38**, 1094 (1988). CLAVE=A
35. AUTORES: O. Mó, and A. Riera.  
TITULO: *Energies and Radial couplings of  $^{1,3}\Sigma$  and  $^{1,3}\Pi$  states of  $NaHe^+$ , modified with a common translation factor.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **164**, 135 (1988). CLAVE=A
36. AUTORES: A. Macías, F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Atomic and molecular autoionizing states. A theoretical approach.*

- REF. REVISTA: J. Physique **50**, C1-37 (1989). CLAVE=A
37. AUTORES: A. Macías, O. Mó, A. Riera, M. Yáñez, H. Bachau, P. Galán and F. Martín.  
TITULO: *Extension of the conventional and pseudopotential Feshbach methods to the study of "two active electrons + core" resonance states. Application to  $C^{2+}$  ( $1s^2 3131'$ ) and  $Ne^{6+}$  ( $1s^2 3131'$ ) systems.*  
REF. REVISTA: J. Physique **50**, C1-99 (1989). CLAVE=A
38. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A molecular orbital study of azole- $Li^+$  complexes.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **93**, 3929 (1989). CLAVE=A
39. AUTORES: F. Fernández-Lázaro, J. Mendoza, O. Mó, S. Rodríguez-Morgade, T. Torres, M. Yáñez, and J. Elguero.  
TITULO: *Phtalocyanine analogues. Part I. Synthesis, spectroscopy and theoretical study of 9,20-Dihydro-5,24:12,17-Diimino-7,10:19,22-dinitrilobenz (f,p)[1,2,4,9,11,12,14,19] octaazacycloicosine and MNDO calculations on its related Hückel heteroannulene.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Soc. Perkin 2, 797 (1989). CLAVE=A
40. AUTORES: L.F. Errea, L. Méndez, O. Mó and A. Riera.  
TITULO: *Molecular treatment of charge exchange in slow  $C^{+3} + H$  collisions.*  
REF. REVISTA: Phys. Scripta **T28**, 67 (1989). CLAVE=A
41. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *A MO analysis of the aromaticity of some nitrogen heterocyclic compounds.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **201**, 17 (1989). CLAVE=A
42. AUTORES: A. Macías, F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *A new method to calculate lifetimes of atomic and molecular autoionizing states.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **202**, 235 (1989). CLAVE=A
43. AUTORES: S. Osimitsch, W. Jitschin, H. Reihl, K. Kleinpoppen, H.O. Lutz, O. Mó and A. Riera.  
TITULO: *Alignment and spin exchange in the  $Na(3p)$  excitation by  $He^+$  ion impact.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. A **40**, 2958 (1989). CLAVE=A
44. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz, M. Yáñez, I. Alkorta, J. Elguero, P. Goya and I. Rozas.  
TITULO: *A molecular orbital study of the conformation (inversion and rotational barriers) and electronic properties of sulfamide.*  
REF. REVISTA: Can. J. Chem. **67**, 2227 (1989). CLAVE=A
45. AUTORES: F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *A study of core effects in quasimolecular structure.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **205**, 43 (1990). CLAVE=A
46. AUTORES: O. Mó.  
TITULO: *Etats autoionisats. Une analogie utile entre les methodes de Feshbach et du Pseudo-potentiel.*  
Capitulo del libro: "12ème Colloque sur la Physique des Collisions Atomiques et Electroniques", Vol. 2. Université de Caen et C.I.R.I.L. (1989). CLAVE:CL
47. AUTORES: O. Mó.

- TITULO: *Interacciones en estados excitados. Uso de Potenciales efectivos.*  
Capítulo del Libro: "Modelos teóricos e informáticos en la Química actual".  
Ed. A. Riera. Editorial Centro de Estudios Ramón Areces, Madrid (1989).CLAVE=L
48. AUTORES: F. Borondo, O. Mó and A. Riera.  
TITULO: *El continuo vibracional de moléculas diatómicas. Colisiones atómicas.*  
Capítulo del libro: "Nuevas Tendencias de la Química Teórica". Vol. 2. Ed. S. Fraga.  
C.S.I.C. (Madrid) 1989. CLAVE=CL
49. AUTORES: O. Mó and A. Riera.  
TITULO: *Charge exchange in  $He^+ + Na(3p)$  collisions.*  
REF. REVISTA: J. Phys. B **23**, L373 (1990). CLAVE=A
50. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Enhanced  $Li^+$  binding energies of some azines: a molecular orbital study.*  
REF. REVISTA: Theoret. Chim. Acta **77**, 1,(1990). CLAVE=A
51. AUTORES: J. Elguero, P. Goya, A. Martínez, I. Rozas, O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *On the problem of the aromaticity of 1,2,6-Thiadiazine 1,1-Dioxides.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **3**, 470 (1990). CLAVE=A
52. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, F. Anvia and R.W. Taft.  
TITULO: *An experimental and theoretical study of  $Li^+$  affinities of methyl diazoles.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **94**, 4796, (1990). CLAVE=A
53. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, J.L.M. Abboud and J. Elguero.  
TITULO: *Bond Activation by protonation in the gas phase.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **172**, 471 (1990). CLAVE=A
54. AUTORES: O. Mó  
TITULO: *Polarización e Intercambio de Spín en Colisiones Ión-Atomo.*  
REF. REVISTA: Anal. de Física A **86**, 111 (1990). CLAVE=A
55. AUTORES: L. Méndez, I.L. Cooper, A.S. Dickinson, O. Mó and A. Riera.  
TITULO: *Molecular treatment of mutual neutralization in slow  $Li^+ + H$  collisions.*  
REF. REVISTA: J. Phys. B **23**, 2797 (1990). CLAVE=A
56. AUTORES: M. Alcamí, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A topological analysis of the bond activation in  $N_2H_4X^+$  and  $H_2O_2X^+$  ( $X=H, Li, Na, Al$ ) complexes.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Res. **1**, 119, (1990). CLAVE=A
57. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez and J.L.M. Abboud.  
TITULO: *Ab initio MO study of the halogen cation basicities of some organic bases.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **4**, 177, (1991). CLAVE=A
58. AUTORES: L.F. Errea, B. Herrero, L. Méndez, O. Mó and A. Riera.  
TITULO: *Charge exchange and excitation in  $C^{+3} + H$  collisions. I Molecular calculations.*  
REF. REVISTA: J. Phys. B **24**, 4049 (1991) CLAVE=A

59. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Ab initio molecular orbital treatment of hydroxylamine- $X^+$ -water and hydroxylamine- $X^+$ -ammonia ( $X=H, Li$ ) clusters.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. **151**, 21, (1991). CLAVE=A
60. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *An ab initio molecular orbital study of the structure, energetics and bond activations of  $Al^+$  complexes.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **234**, 357 (1991). CLAVE=A
61. AUTORES: O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical approach to ion-molecule interactions in the gas-phase.*  
Capítulo del Libro: "Trends in Physical Chemistry". Vol. 3, 81 (1992) CLAVE=CL
62. AUTORES: L. F. Errea, L. Méndez, O. Mó and A. Riera.  
TITULO: *Frontiers in Atomic Collisions.*  
Capítulo del Libro: "Computational Chemistry: Structure, Interactions and Reactivity.  
Editor: S. Fraga, Ed. Elsevier, Amsterdam, 1992. CLAVE=CL
63. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Enhanced  $Al^+$  binding energies of some azoles. A theoretical study of azole- $X^+$  ( $X=Na, K, Al$ ) complexes.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **96**, 3022 (1992). CLAVE=A
64. AUTORES: O. Mó and A. Riera.  
TITULO: *On Na atom excitation in low energy  $H + Na$  collisions.*  
REF. REVISTA: J. Phys. B **25**, L101 (1992). CLAVE=A
65. AUTORES: J.L.M. Abboud, T. Cañada, H. Homán, R. Notario, C. Cativiela, M.D. Díaz de Villegas, M.C. Bordejé, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas phase basicities of  $\beta$ -Lactams and azetidines. Cyclation effects. An experimental and theoretical study.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc., **114**, 4728, (1992). CLAVE=A
66. AUTORES: A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A GI ab initio MO study of the distonic ions  $H_2C-O-Si^+$  and their isomers.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett., **197**, 581, (1992). CLAVE=A
67. AUTORES: J. Tortajada, A. Total, J.P. Morizur, M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Experimental and theoretical study of  $C_2H_4OAl^+$  complexes in the gas phase.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem., **96**, 8309, (1992). CLAVE=A
68. AUTORES: A.L. Llamas-Saiz, C. Foces-Foces, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *Nature of the hydrogen bond: crystallographic vs. theoretical description of the  $O-H...N(sp^2)$  hydrogen bond.*  
REF. REVISTA: Acta Cryst. **B48**, 700, (1992). CLAVE=A
69. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *Cooperative (nonpairwise) effects in water trimers: an ab initio molecular orbital study.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys., **97**, 6628 (1992). CLAVE=A

70. AUTORES: J.C. Madroñal, O. Mó, I.L. Cooper and A.S. Dickinson.  
TITULO: *Bonding in  $MgH^+$  Quasimolecule.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **260**, 63 (1992). CLAVE=A
71. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, A. Total, J. Tortajada and J.P. Morizur.  
TITULO: *Structures and stabilities of  $[C_2H_5NAI]^+$  molecular ions. An ab initio molecular orbital study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **97**, 5553 (1993) CLAVE=A
72. AUTORES: M.C. Bordejé, O. Mó, M. Yáñez, M. Herreros and J.L.M. Abboud.  
TITULO: *Cyclization effects on the gas-phase basicities of esters and ethers. An experimental and MO study.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **115**, 7389 (1993). CLAVE=A
73. AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *G2 ab initio Calculations on the Thermochemistry of  $[P,N,H_n]$  ( $n=0,2$ ) and  $[P,N,H_n]^+$  ( $n=0,3$ ) species and on the potential energy surfaces of  $[P,N,H_3]^+$  singlet and triplet state cations.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **97**, 6607 (1993). CLAVE=A
74. AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *High level ab initio calculations on the structures and relative stabilities of  $[O,P,H]$  systems and their cations.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Let. **209**, 557 (1993). CLAVE=A
75. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz, M. Yáñez, M. Esseffar, W. Bouab, E. Ballesteros, M. Herreros, H. Homan, C. Lopez-Mardomingo, R. Notario and J.L.M. Abboud.  
TITULO: *Thiocarbonyl vs. Carbonyl Compounds: A Comparison of Intrinsic Reactivities.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **115**, 12468 (1993) CLAVE=A
76. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Stabilization of nitrogen containing three-membered rings by  $H^+$  and  $Li^+$  association in the gas-phase.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **115**, 11074 (1993) CLAVE=A
77. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, I. Rozas and J. Elguero  
TITULO: *Structure, Vibrational Frequencies and Thermodynamic Properties of Hydrogen Peroxide Dimers. An Ab Initio Molecular Orbital Study.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **100**, 2871 (1994) CLAVE=A
78. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, I. Rozas and J. Elguero  
TITULO: *Structure, Vibrational Frequencies and Thermodynamic Properties of Hydrogen Peroxide-Water Dimers. An Ab Initio Molecular Orbital Study.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Let. **219**, 45 (1994) CLAVE=A
79. AUTORES: J.-L.G. Abboud, R. Notario, E. Ballesteros, M. Herreros, O. Mó, M. Yáñez, J. Elguero, G. Boyer and R. Claramunt.  
TITULO: *Dissociative Attachment of Protons to 1-Fluoro- and 1-Chloro-Adamantane in the Gas-phase.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **116**, 2486 (1994) CLAVE=A
80. AUTORES: A. Martínez, J. Elguero, O.Mó and M. Yáñez  
TITULO: *An ab initio study of the azoniaspiro[2.2]pentane cation (azirineaziridinium ion).*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **115**, 45 (1994) CLAVE=A



81. AUTORES: A. Luna, M. Manuel, O.Mó and M. Yáñez  
 TITULO: *G2 ab initio Calculations on the  $F^+ + OH_2$  singlet and triplet potential energy surfaces.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **98**, 6980 (1994) CLAVE=A
82. AUTORES: M. Esseffar, O.Mó and M. Yáñez  
 TITULO: *Is the Depletion of Ozone by HSO an Exothermic Process?.*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **101**, 2175 (1994) CLAVE=A
83. AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Thermochemistry of the Reactions of  $PH^+ ({}^2B_1)$  with CO. A G2 Molecular Orbital Study.*  
 REF. REVISTA: Chem. Phys. Let. **223**, 240 (1994). CLAVE=A
84. AUTORES: A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *A topological description of  $Si^+$  and  $C^+$  adducts of formaldehyde.*  
 REF. REVISTA: Anales de Física, **90**, 205 (1994). CLAVE=A
85. AUTORES: M.C. Bordejé, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Bond activation of four membered cycles by protonation in the gas phase.*  
 REF. REVISTA: Anales de Física, **90**, 209 (1994). CLAVE=A
86. AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Thermochemistry of the Reactions of  $P^+ ({}^3P)$  and  $P^+ ({}^1D)$  with Formaldehyde. A G2 Molecular Orbital Study.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **98**, 8679 (1994). CLAVE=A
87. AUTORES: A. Luna, O.Mó and M. Yáñez  
 TITULO: *Gas-Phase reactions of  $C^+ ({}^2P)$  and  $Si^+ ({}^2P)$  with oxygen bases. A G2 ab initio molecular orbital study.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **310**, 135 (1994) CLAVE=A
88. AUTORES: O.Mó, M. Yáñez and J. Elguero  
 TITULO: *Cooperative Effects in the Cyclic Trimer of Methanol. An ab initio Molecular Orbital Study.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **314**, 73 (1994) CLAVE=A
89. AUTORES: O.Mó, M. Yáñez, M. Esseffar and J.L.M. Abboud  
 TITULO: *The Topological Analysis of the Electronic Charge Densities as a Tool to Study Protonation Effects on Thiocarbonyl Compounds.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **7**, 685 (1994) CLAVE=A
90. AUTORES: J. Tortajada, E. León, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Ab initio calculations on Formamidine- $X^+$  ( $X = H, Li, Na, Mg, \text{ and } Al$ ) complexes.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **98**, 12919 (1994). CLAVE=A
91. AUTORES: A.L. Llamas, C. Foces-Foces, O.Mó, M. Yáñez E. Elguero and J. Elguero  
 TITULO: *The Geometry of Pyrazole: a test for ab initio calculations.*  
 REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **16**, 263 (1995) CLAVE=A
92. AUTORES: S. Blanco, J.C. López, J.L. Alonso, O.Mó, M. Yáñez, N. Jagerovic and J.Elguero.  
 TITULO: *Microwave Spectra and ab initio calculations of 1-Nitropyrazole.*

- REF. REVISTA: J. Mol. Struct. **344**, 241 (1995) CLAVE=A
93. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M. Eckert-Maksic and Z.B. Maksic.  
TITULO: *Bent Bonds in Bezocyclopropenes and their fluorinated derivatives.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **60**, 1638 (1995). CLAVE=A
94. AUTORES: O.Mó, M. Yáñez, A.L. Llamas-Saiz, C. Foces-Foces and J. Elguero  
TITULO: *Ab initio study of the effect of N-substituents on properties of pyrazoles.*  
REF. REVISTA: Tetrahedron **51**, 7045 (1995) CLAVE=A
95. AUTORES: M. Alcamí, I.L. Cooper, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Potential energy surfaces of the  $C_{2v}$  and  $D_{3h}$  ozone complexes with  $Li^+$ .*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **103**, 253 (1995) CLAVE=A
- 96.- AUTORES: J. Tortajada, E. León, J.P. Morizur, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Potential energy surface of protonated formamide and of formamide- $X^+$  ( $X = Li, Na, Mg, and Al$ ) complexes.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **99**, 13890 (1995). CLAVE=A
- 97.- AUTORES: F. Ijjaali, O. Mó, M. Yáñez and J.-L.G. Abboud.  
TITULO: *Hybridization effects on the intrinsic basicities of phosphorus and nitrogen containing bases.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **338**, 225 (1995). CLAVE=A
98. AUTORES: G. Boucoux, D. Drancourt, D. Leblanc, M. Yáñez and O. Mó.  
TITULO: *Gas-phase basicities of lactones.*  
REF. REVISTA: New J. Chem. **19**, 1243 (1995). CLAVE=A
- 99.- AUTORES: J.-L.G. Abboud, M. Herreros, R. Notario, M. Esseffar, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A New Bond from an Old Molecule: Formation, Stability, and Structure of  $P_4H^+$ .*  
REF. REVISTA: J. American Chem. Soc. **118**, 1126 (1996). CLAVE=A
- 100 AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *High-level ab initio calculations on  $CH_2^+(^2A_1)$  with  $PO(^2I)$  reactions.*  
REF. REVISTA: Int. J. Quant. Chem. **57**, 559 (1996). CLAVE=A
- 101.- AUTORES: A.I. González, O. Mó, M. Yáñez, E. León, J. Tortajada, J.P. Morizur, I. Leito, P.C. Maria and J.F. Gal.  
TITULO: *Basicity of Acetamidine. Experimental and Theoretical Study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **100**, 10490 (1996) CLAVE=A
- 102.- AUTORES: O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The Theory of Atoms in Molecules as a Tool to Investigate the Reactivity of Tetraphosphacubane*  
REF. REVISTA: Canadian Journal of Chem. **74**, 901 (1996) CLAVE=A
103. AUTORES: M. T. Molina, W. Bouab, M. Esseffar, M. Herreros, R. Notario, J.-L.G. Abboud, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *The Intrinsic Acidity and Basicity of 2,2,2-Trifluoroethanethiol. The First Experimental and Theoretical Study.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **61**, 5485 (1996) CLAVE=A
104. AUTORES: J.-L.G. Abboud, M. Herreros, R. Notario, O. Mó, M. Yáñez, M. Regitz and J. Elguero.

- TITULO: *Tetraphosphacubane: An unexpectedly strong base in the gas-phase.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **61**, 7813 (1996) CLAVE=A
- 105.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Modeling Intrinsic Basicities: The Use of the Electrostatic Potentials and the Atoms-in-Molecules Theory.*  
REF. REVISTA: Theoretical and Computational Chemistry Series. Vol 3. Molecular Electrostatic Potentials: Concepts and Applications. Ed. J.S. Murray and K. Sen. Elsevier Amsterdam 1996. CLAVE=CL
- 106.- AUTORES: B. Amekraz, J. Tortajada, J.P. Morizur, A.I. González, O. Mó, M. Yáñez, I. Leito, P.C. Maria and J.F. Gal.  
TITULO: *Experimental and Theoretical Study of the Basicity of Guanidine. The Performance of DFT calculations vs. high level ab initio approaches.*  
REF. REVISTA: New. J. of Chem. **20**, 1011 (1996) CLAVE=A
- 107.- AUTORES: L. González, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *Cooperative Effects in Water Trimers. The Performance of Density Functional Approaches.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **371**, 1 (1996). CLAVE=A
- 108.- AUTORES: B. Amekraz, J. Tortajada, J.P. Morizur, A.I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Acetamidine-Mg<sup>+</sup> (<sup>2</sup>S) complexes. The performance of different exchange and correlation density functionals approaches.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **371**, 313 (1996) CLAVE=A
- 109.- AUTORES: M.C. Bordejé, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Binding Energies of Metal Monocations to  $\beta$ -lactones and  $\beta$ -lactams. A theoretical Study of cyclization effects.*  
REF. REVISTA: Structural Chem. **7**, 309 (1996). CLAVE=A
- 110.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *High level ab initio calculations on the 1,2-dithioglyoxal/1,2-dithiete isomerism.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **263**, 407 (1996). CLAVE=A
- 111.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M. Esseffar, A. El-Hammadi, M. Herreros, R. Notario and J.L.G. Abboud.  
TITULO: *Role of chelation and resonance an the intrinsic acidity and basicity of tropolone.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **62**, 3200 (1997) CLAVE=A
- 112.- AUTORES: M. Manuel, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *G2 molecular orbital study of the reactions of water with Cl<sup>+</sup> (<sup>3</sup>P) and Cl<sup>+</sup> (<sup>1</sup>D).*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **101**, 1722 (1997). CLAVE=A
- 113.- AUTORES: E. Leon, B. Amekraz, J. Tortajada, J.P. Morizur, A.I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Acetamidine-X<sup>+</sup> and Guanidine-X<sup>+</sup> (X = Li, Na, Mg, Al) Complexes in the Gas-Phase. A Theoretical Study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **101**, 2489 (1997) CLAVE=A
114. AUTORES: M.T. Molina, M. Yáñez, O. Mó, R. Notario and J.-L.G. Abboud.

- TITULO: *The Thiocarbonyl Group*.  
REF. REVISTA: The chemistry of double-bonded functional groups. Supp. A3. Chapter 25  
Ed. S. Patai. J. Wiley & Sons Ltd. New York (1997) CLAVE=CL
- 115.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *High-level ab initio vs. DFT calculations on (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O complexes as prototypes of multiple hydrogen bond systems*.  
REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **18**, 1124 (1997). CLAVE=A
- 116.- AUTORES: M. Manuel, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Thermochemistry of the reactions F<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P) and F<sup>+</sup>(<sup>1</sup>D) with hydrogen sulfide. A Molecular orbital study*.  
REF. REVISTA: Mol. Phys. **91**, 503 (1997). CLAVE=A
- 117.- AUTORES: A. Luna, B. Amekraz, J. P. Morizur, J. Tortajada, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Reaction between Guanidine and Cu<sup>+</sup> in the gas phase. An Experimental and Theoretical Study*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **101**, 5931 (1997) CLAVE=A
- 118.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *Study of the methanol trimer potential energy surface*.  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **107**, 3592 (1997). CLAVE=A
- 119.- AUTORES: M. Manuel, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Structure and Stability of [H<sub>2</sub>,Cl,O]<sup>+</sup> triplet state cations. A G2 ab initio molecular orbital study*.  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. **398/399**, 417 (1997). CLAVE=A
- 120.- AUTORES: J.M. Orza, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *Vibrational Spectra of N-Methylpyrazole: An experimental and theoretical study*.  
REF. REVISTA: Spectrochimica Acta A **53**, 1383 (1997). CLAVE=A
- 121.- AUTORES: A.I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Structure and stability of [H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>]<sup>+</sup> Doublet and Quartet State Cations. An ab initio Molecular Orbital Study*.  
REF. REVISTA: Anales de Química (International Edition) **93**, 310 (1997). CLAVE=A
- 122.- AUTORES: H. Homan, M. Herreros, R. Notario, J.-L.G. Abboud, M. Esseffar, O. Mó, M. Yáñez, C. Foces-Foces, A. Ramos-Gallardo, M. Martinez-Ripoll, A. Vegas, M.T. Molina, J. Casanovas, C. Turrión, P. Jimenez, M.V. Roux,  
TITULO: *Strain effects in protonated carbonyl compounds. An experimental and ab initio, treatment of acyclic carboxamides and ketones*.  
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **62**, 8503 (1997) CLAVE=A
- 123.- AUTORES: G. Bouchoux, D. Leblanc, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Structural effects on the intrinsic basicities of  $\alpha,\beta$ -unsaturated lactones and ketones*.  
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **62**, 8439 (1997). CLAVE=A
- 124.- AUTORES: J.C. Guillemin, M. Decouzon, PC Maria, JF Gal, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas-Phase basicities and acidities of ethyl-, vinyl- and ethynylarsines. An Experimental and Theoretical Study*.  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **101**, 9525 (1997). CLAVE=A

- 125.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *High-level ab initio calculations on the intramolecular hydrogen bond in thiomalonaldehyde.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **101**, 9710 (1997). CLAVE=A
- 126.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Ionic Intrinsic Reactivities of Strained Systems*  
REF. REVISTA: **Recent Research Developments in Physical Chemistry (1997)**  
CLAVE=CL
- 127.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Proton Transfer in Dissociative Protonation Processes.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 1356 (1998). CLAVE=A
- 128.- AUTORES: A. Luna, B. Amekraz, J. Tortajada, J.P. Morizur, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Modeling the interactions between peptide functions and Cu(I): Formamide Cu<sup>+</sup> reaction in the gas-phase.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **120**, 5411 (1998) CLAVE=A
- 129.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *G2 ab initio Calculations on three-membered rings. The role of Hydrogen Atoms*  
REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **19**, 1072 (1998) CLAVE=A
- 130.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Ab initio and density functional theory calculations on the protonated species of As<sub>4</sub> clusters.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **108**, 8957 (1998) CLAVE=A
- 131.- AUTORES: A. Luna, J.P. Morizur, J. Tortajada, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The role of Cu<sup>+</sup> association on the formamide → formamidic acid → (aminohydroxy) carbene isomerization in the gas-phase.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 4652 (1998) CLAVE=A
- 132.- AUTORES: O. Mó.  
TITULO: *Modelización de Clusters por enlaces de Hidrógeno.*  
REF. REVISTA: **Temas Actuales de la Química Cuántica. Cap.8 (1998).**  
CLAVE=CL
- 133.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *High level ab initio and density functional theory studies on methanol-water dimers and cyclic methanol(water)<sub>2</sub> trimer.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **109**, 139 (1998) CLAVE=A
- 134.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Stabilization of zwitterionic forms of three-membered rings by cationization in the gas phase*  
REF. REVISTA: J. Mol Struct. (THEOCHEM) **433**, 217 (1998) CLAVE=A
- 135.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Very strong Hydrogen Bonds in Neutral Molecules: The Phosphinic Acid Dimers*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **109**, 2685 (1998) CLAVE=A
- 136.- AUTORES: J.-L.G. Abboud, M. Esseffar, M. Herreros, O. Mó, M.T. Molina, R. Notario, and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation of S<sub>4</sub>, S<sub>6</sub> and S<sub>8</sub> sulfur cycles. A Quantitative study.*

- REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 7996 (1998) CLAVE=A
- 137.-** AUTORES: O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Density Functional Theory Calculations on Hydrogen-Bonded Tropolone-(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub> Clusters.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 8174 (1998) CLAVE=A
- 138.-** AUTORES: G. Bouchoux, JF Gal, PC Maria, J.E.Szulejko, T.B. McMahon, J. Tortajada, A. Luna, M. Yáñez and O. Mó  
TITULO: *Gas-Phase Basicities of Acid Anhydrides.*  
REF. REVISTA: J. Phys.Chem. **102**, 9183 (1998). CLAVE=A
- 139.-** AUTORES: , M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, A. Luna, J. Tortajada and J.P. Morizur.  
TITULO: *Exploring the potential energy surface of the association of Cu<sup>+</sup> to oxaziridine, nitrosomethane and formaldoxime.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem., **102**, 10120 (1998) CLAVE=A
- 140.-** AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Ionic intrinsic reactivities of strained systems*  
REF. REVISTA: **Recent Res. Devel. in Physical Chemistry 2**, 827 (1998) CLAVE=CL
- 141.-** AUTORES: A. I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Exploring the Potential Energy Surfaces of the Reactions of O<sup>+</sup>(<sup>4</sup>S) and O<sup>+</sup>(<sup>2</sup>S) with ammonia*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass. Spectr. **179/180**, 77 (1998) CLAVE=A
- 142.-** AUTORES: M. Begtrup, T. Balle, R.M. Claramunt, D. Sanz, JA. Jimenez, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *GIAO ab initio calculations of nuclear shieldings of monosubstituted benzenes and n-substituted pyrazoles.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **453** 255 (1998) CLAVE=A
- 143.** AUTORES: L. Infantes, C. Foces-Foces, P. Cabildo, R.M. Claramunt, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *The Structure of Aminoazoles and its Relationship with Aromaticity: crystal and molecular structure of two polymorphic forms of 4-aminopyrazole.*  
REF. REVISTA: Heterocycles **49**, 157 (1998) CLAVE=A
- 144.-** AUTORES: M. Manuel, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *The reactions of Cl<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P) and Cl<sup>+</sup>(<sup>1</sup>D) with hydrogen sulfide. A G2 molecular orbital study.*  
REF. REVISTA: Mol. Phys. **96**, 231 (1999). CLAVE=A
- 145.-** AUTORES: Z.B. Maksic , M. Eckert-Maksic, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *The Mills-Nixon Effect: Fallacies, Facts and Chemical Relevance.*  
REF. REVISTA: **Theoretical and Computational Chemistry vol 6. Pauling's Legacy. Modern Modeling of the Chemical Bonding. Elsevier. Amsterdam (1999)** CLAVE=CL
- 146.-** AUTORES: A. I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *A gas-phase basicity scale for selenocarbonyl compounds based on high-level ab initio and density functional theory calculations*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **103**, 1662 (1999) CLAVE=A
- 147.-** AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Substituent Effects on the Strength of the Intramolecular Hydrogen Bond of Thiomalonaldehyde.*

- REF. REVISTA: J. Org. Chem. **64**, 2314 (1999) CLAVE=A
- 148.-** AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez and I.L. Cooper.  
TITULO: *An ab initio Molecular Orbital Study of  $XO_2^+$  ( $X= F, Cl, Br, I$ ) Systems.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **103**, 2793 (1999) CLAVE=A
- 149.-** AUTORES: N. Doslic, K. Sundermann, L. González, O. Mó, J. Giraud-Girard and O. Kuhn.  
TITULO: *Ultrafast photoinduced dissipative hydrogen switching dynamics in thioacetylacetonona.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **1**, 1249 (1999) CLAVE=A
- 150.-** AUTORES: G. Bouchoux, M. Yáñez and O. Mó  
TITULO: *Isomerization and Dissociation Processes of Protonated Benzene and Protonated Fulvene in the Gas-Phase.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectr. **185/186/187**, 241 (1999). CLAVE=A
- 151.-** AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M. Decouzon, PC Maria, JF Gal and J.C. Guillemin  
TITULO: *Gas-Phase basicities and acidities trends in  $\alpha,\beta$ -unsaturated amines, phosphines and arsines.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **121**, 4653 (1999). CLAVE=A
- 152.-** AUTORES: M. Alcamí, A.I. González, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Performance of Density Functional Theory methods for the treatment of metal-ligand dications.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **307**, 244 (1999) CLAVE=A
- 153.-** AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Density Functional Theory Study on Ethanol Dimers and Cyclic Ethanol Trimers.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **111**, 3855 (1999) CLAVE=A
- 154.-** AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M.V. Roux, P. Jiménez, J.Z. Dávalos, M.A.V. Ribeiro da Silva, M. Agostinha, R. Matos, L.M. Amaral, A. Sánchez-Migallón, P. Cabildo, R. Claramunt, J. Elguero and J.F. Liebman.  
TITULO: *Enthalpies of Formation of N-Substituted Pyrazoles and Imidazoles.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **103**, 9336 (1999). CLAVE=A
- 155.-** AUTORES: J.A. Jiménez, R. Claramunt, O. Mó, F. Wehrmann, G. Buntkowsky, H.H. Limbach, R. Goddard and J. Elguero.  
TITULO: *The Structure of N-Aminopyrazole in the solid state and in solution: An experimental and computational study.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **1**, 5113 (1999) CLAVE=A
- 156.-** AUTORES: J.L. Abboud, R. Notario, O. Mó, M. Yáñez, R. Flammang, N. Jagerovic, I. Alkorta and J. Elguero.  
TITULO: *4-nitropyrazole: a nitrogen or an oxygen base in the gas phase?*  
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **12**, 787 (1999) CLAVE=A
- 157.-** AUTORES: A. I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The structure and stability of  $Sb_4H^+$  clusters. The importance of non-classical structures.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **112**, 2258 (2000) CLAVE=A
- 158.-** AUTORES: O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: ENLACE QUÍMICO Y ESTRUCTURA MOLECULAR  
Editorial J.M. Bosch (Barcelona 2000) CLAVE= Libro

- 159.- AUTORES: A. Luna, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Cu<sup>+</sup> binding energies. Dramatic failure of the G2 method vs. Good performance of the B3LYP approach.*  
 REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **320**, 129 (2000) CLAVE=A
- 160.- AUTORES: M. Alcamí,, O. Mó, M. Yáñez, and I.L. Cooper.  
 TITULO: *The performance of density-functional theory in challenging cases: Halogen oxides.*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **112**, 6131 (2000) CLAVE=A
- 161.- AUTORES: A. Luna, B. Amekraz, J.P. Morizur, J. Tortajada, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Reactions of Urea with Cu<sup>+</sup> in the Gas Phase: An Experimental and Theoretical Study:*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **104**, 3132 (2000) CLAVE=A
- 162.- AUTORES: J.-L. M. Abboud, I. Alkorta, J.Z. Dávalos, J.F. Gal, M. Herreros, P.C. Maria, O. Mó, M.T. Molina, R. Notario and M. Yáñez.  
 TITULO: *The P<sub>4</sub>...Li Ion in the Gas Phase: A Planetary System.*  
 REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **122**, 4451 (2000) CLAVE=A
- 163.- AUTORES: M. Lamsabhi, M. Alcamí, O. Mó, W. Bouab, M. Esseffar, J.L.M. Abboud, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Are the Thiouracils Sulfur Bases in the Gas-phase?.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **104**, 5122 (2000) CLAVE=A
- 164.- AUTORES: G. Bouchoux, B. Gaudin, D. Leblanc, M. Yáñez and O. Mó.  
 TITULO: *Is ionized cyclopropylamine cyclic?.*  
 REF. REVISTA: Int. J. Mass. Spectrometr. Ion Chem. **199**, 59 (2000) CLAVE=A
- 165.- AUTORES: M. C. Oliveira, M.A. Almoester-Ferreira, O. Mó, M. Yáñez and H. Audier.  
 TITULO: *Exploring the potential energy surface associated with the HBr loss from 2-bromobutane radical cations.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem A, **104**, 9287 (2000) CLAVE=A
- 166.- AUTORES: A. Luna, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Cu<sup>+</sup> reactivity trends in sp, sp<sup>2</sup> and sp<sup>3</sup> nitrogen, phosphorus and arsenic containing bases.*  
 REF. REVISTA: Int. J. Mass Spect. **201**, 215 (2000) CLAVE=A
- 167.- AUTORES: F. Ijjaali, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *A Theoretical Study of the Reaction between N<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P) and Formaldehyde and Related processes in the Gas Phase.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **104**, 11132 (2000) CLAVE=A
- 168.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Protonation and Deprotonation of Thiomalonaldehyde. The role of the Intramolecular Hydrogen Bond*  
 REF. REVISTA: "Recent Theoretical and Experimental Advances in Hydrogen Bonded Clusters". Ed. S.S. Xantheas. Kluwer Academic Pub. (2000). The Netherlands. CLAVE=CL
- 169.- AUTORES: F. Ijjaali, M. El-Mouhtadi, M. Esseffar, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *The role of the spin-forbidden processes in N<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P)+ NH<sub>3</sub> reactions in the gas phase.*  
 REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **3**, 179 (2001) CLAVE=A



- 170.- AUTORES: A. Benidar, R. Le Doucen, J.C. Guillemin.O. Mó, M. Yáñez.  
TITULO: *Vibrational Spectra, DFT calculations and Assignments of the syn- and the gauche forms of vinylphosphine.*  
REVISTA: J. Mol. Spectrosc. **205**, 252 (2001) CLAVE=A
- 171.- AUTORES: F. Ijjaali, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Thermochemistry of the reactions between CN<sup>+</sup> and H<sub>2</sub>O in the gas phase.*  
REVISTA: Mol. Phys. **99**, 1129 (2001) CLAVE=A
- 172.- AUTORES: J.F. Gal, M. Decouzon, P.C. Maria, A.I. González, O. Mó, M. Yáñez, S. El Chaouch and J.C. Guillemin.  
TITULO: *Acidity trends in  $\alpha,\beta$ -Unsaturated alkanes, silanes, germanes and stannanes.*  
REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **123**, 6353 (2001) CLAVE=A
- 173.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, L. González and J. Elguero.  
TITULO: *Spontaneous Self-ionization in the Gas Phase. A Theoretical Prediction.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Chem. **7**, 465 (2001) CLAVE=A
- 174.- AUTORES: I. Alkorta, I. Rozas, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero.  
TITULO: *Hydrogen bond vs. proton transfer between neutral molecules in the gas phase*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **105**, 7481 (2001) CLAVE=A
- 175.- AUTORES: M.C. Oliveira, M.A. Almoester-Ferreira, O. Mó, M. Yáñez, and H. Audier.  
TITULO: *Reaction Mechanisms for the HBr Loss from 2-Bromobutane Radical Cations.*  
REF. REVISTA: Adv. Mass Spectrom. **15**, 753 (2001) Ed. E. Gelpi. John Wiley & Sons. New York. CLAVE=CL
- 176.- AUTORES: A. Hoz, I. Almena, C. Foces-Foces, M. Yáñez, O. Mó, M. Alcamí, N. Jagerovic and J. Elguero  
TITULO: *Synthesis, X-ray structure and properties of 2-(1'-pyridin-2'-one)benzimidazole*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. B **105**, 12759 (2001) CLAVE=A
- 177.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Computational Chemistry. A useful (some times mandatory) tool in mass spectrometry Studies.*  
REF. REVISTA: Mass Spectrom. Rev. **20**, 195-245 (2001) CLAVE=A
- 178.- AUTORES: F. Ijjaali, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *High level ab initio study of the N<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P)+ SH<sub>2</sub> reactions in the gas phase. The role of spin forbidden pathways.*  
REVISTA: Int. J. Quantum Chem. **86**, 130 (2002) CLAVE=A
- 179.- AUTORES: L. Boutreau, J. Tortajada, A. Luna, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Perturbation of the intramolecular hydrogen bonds of Glucose by Cu<sup>+</sup> association.*  
REVISTA: Int. J. Quantum Chem. **86**, 138 (2002) CLAVE=A
- 180.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Modeling Intrinsic Basicities and Acidities*  
REF. REVISTA: J. Phys Org. Chem. (Rev. Article) **15**, 174 (2002) CLAVE=A
- 181.- AUTORES: M. Alcamí, A. Luna, O. Mó, M. Yáñez, L. Boutreau and J. Tortajada  
TITULO: *An Experimental and Theoretical Investigation of the Reactions between Glucose and Cu<sup>+</sup> in the Gas Phase.*

- REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 2641 (2002) CLAVE=A
- 182.-** AUTORES: J.C.Guillemín, S. El Chaouch, J.F. Gal, P.C. Maria, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas-Phase acidity of primary  $\alpha,\beta$ -unsaturated germanes and stannanes.*  
REF. REVISTA: *Main Group Metal Chemistry*, **25**, 85 (2002). CLAVE=A
- 183.-** AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *Competition between X...H...Y intramolecular hydrogen bonds and X...Y (X=O, S; Y=Se, Te) chalcogen-chalcogen interactions.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A, **106**, 4661 (2002) CLAVE=A
- 184.-** AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, I. Alkorta and J. Elguero.  
TITULO: *Triaziridine and Tetrazetidine vs. Cyclic Water trimer and tetramer: A computational approach to the relationship between Molecular and Supramolecular Conformational Analysis.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **4**, 2123 (2002) CLAVE=A
- 185.-** AUTORES: A. Luna, M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, and J. Tortajada  
TITULO: *A theoretical study of the interaction between Ni<sup>+</sup> and small oxygen- and nitrogen-containing Bases.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom **217**, 119 (2002) CLAVE=A
- 186.-** AUTORES: O. Mó, M. Yáñez J.F. Gal, P.C. Maria and J.C.Guillemín.  
TITULO: *Vinyl and Ethynyl Silanes, Germanes and Stannanes. A new case of Dissociative Proton Attachment.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **15**, 509 (2002) CLAVE=A
- 187.-** AUTORES: G. Bouchoux, D. Defaye, T. McMahon, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Structural and energetic aspects of the protonation of phenol, catechol, resorcinol and hydroquinone.*  
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **8**, 2900 (2002) CLAVE=A
- 188.-** AUTORES: A. Benidar, R. Le Doucen, J.C.Guillemín, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Vibrational Spectra of Vinylarsine and Vinylstibine. An Experimental and Theoretical Study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 6262 (2002) CLAVE=A
- 189.-** AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The Crucial role of agostic interactions in the binding of Cu<sup>+</sup> to alkanes, silanes and germanes in the gas phase.*  
REF. REVISTA: J. Comp. Methods in Sciences and Engineering **2**, 411 (2002) CLAVE=A
- 190.-** AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *The Role of Chalcogen-chalcogen interactions on the intrinsic basicity and acidity of  $\beta$ -chalcogenovinylaldehydes, HC(=X)-CH=CH-CYH (X=O, S; Y=Se, Te).*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **8**, 3999 (2002) CLAVE=A
- 191.-** AUTORES: J.F. Gal, P.C. Maria, M. Decouzon, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas-Phase Lithium cation basicity of some benzene derivatives. An experimental and theoretical study.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom **219**, 445 (2002) CLAVE=A

- 192.-** AUTORES: L. Bouteau, P. Toulhoat, J. Tortajada, A. Luna, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Reactions between Glycolic Acid and Cu<sup>+</sup> in the Gas-phase. An experimental and theoretical study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **106**, 9359 (2002) CLAVE=A
- 193.-** AUTORES: L. Galiano, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas Phase chemistry of ethyl- and vinyl-amines, phosphines and arsines. A DFT study of the structure and stability of their Cu<sup>+</sup> complexes.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 9306 (2002) CLAVE=A
- 194.-** AUTORES: I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, M. Yáñez, and J. Del Bene.  
TITULO: *An ab initio study of the structural, energetic, bonding, and IR spectroscopic properties of complexes with dihydrogen bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **106**, 9325 (2002) CLAVE=A
- 195.-** AUTORES: J. Del Bene, S.A. Perera, R.J. Bartlett, I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *One-Bond (<sup>1</sup>dJ<sub>H-H</sub>) and Three-Bond (<sup>3</sup>dJ<sub>X-M</sub>) Spin-Spin Coupling Constants across X-H...H-M Dihydrogen Bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 9331 (2002) CLAVE=A
- 196.-** AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, J.C. Guillemin, E.H. Riague, J.F. Gal, P.C. Maria and C. Dubin-Poliart.  
TITULO: *The gas-phase acidity of HCP, CH<sub>3</sub>CP, HCAs and CH<sub>3</sub>Cas. An unexpected enhanced acidity of the methyl group.*  
REF. REVISTA: Chemistry. Eur.J. **8**, 4919 (2002) CLAVE=A
- 197.-** AUTORES: L. Bouteau, E. Leon, L. Rodriguez-Santiago, P.Toulhoat, O. Mó, and J. Tortajada.  
TITULO: *Gas-Phase Reactivity of Cu<sup>+</sup> and Ag<sup>+</sup> with Glycerol: an Experimental and Theoretical Study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **106**, 10563 (2002) CLAVE=A
- 198.-** AUTORES: M. Esseffar, E. Quintanilla, J.Z. Dávalos, J.L.M. Abboud, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Nitro derivatives of pyrrole, furan and 1H-tetrazole: ring or nitro bases?.*  
REF. REVISTA: New J. Chem. **26**, 1567 (2002) CLAVE=A
- 199.-** AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *1,8-Chalcogen-Bridged Naphthalenes. Strong Carbon Bases in the Gas Phase.*  
REF. REVISTA: New J. Chem. **26**, 1747 (2002) CLAVE=A
- 200.-** AUTORES: L. Galiano, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas-Phase Chemistry of Ethynyl-Amine, Phosphine and Arsine. Structure and stability of their Cu<sup>+</sup> and Ni<sup>+</sup> complexes.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Chem. **4**, 72 (2003) CLAVE=A
- 201.-** AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, J. Elguero, M.V. Roux, P. Jiménez, J.Z. Dávalos, M.A.V. Ribeiro da Silva, M. das D. M. C. Ribeiro da Silva, P. Cabildo, R. Claramunt.  
TITULO: *Substituent effects on enthalpies of formation. Benzene derivatives.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 366 (2003). CLAVE=A
- 202.-** AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez

- TITULO: *Structure and stability of  $[H_4, C_2, N]^+$  singlet state cations. A comparison between DFT and high-level ab initio calculations.*  
REF. REVISTA: Int. J. Quantum Chem. **91**, 438 (2003) CLAVE=A
- 203.-** AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Agostic vs.  $\pi$ -interactions in complexes of ethynyl-silanes and ethynyl-germanes with  $Cu^+$  in the gas phase.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 1370 (2003) CLAVE=A
- 204.-** AUTORES: J. Del Bene, S.A. Perera, R.J. Bartlett, M. Yáñez, O. Mó, I. Alkorta, and J. Elguero.  
TITULO: *Two-Bond F-N Spin-Spin Coupling Constants ( $^2hJ_{N-F}$ ) across FH...N Hydrogen Bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 3121 (2003) CLAVE=A
- 205.-** AUTORES: J. Del Bene, S.A. Perera, R.J. Bartlett, M. Yáñez, O. Mó, I. Alkorta, and J. Elguero.  
TITULO: *Two-Bond N-F Spin-Spin Coupling Constants ( $^2hJ_{N-F}$ ) across  $NH^+...F$  Hydrogen Bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 3126 (2003) CLAVE=A
- 206.-** AUTORES: J. Del Bene, S.A. Perera, R.J. Bartlett, M. Yáñez, O. Mó, J. Elguero, and I. Alkorta.  
TITULO: *Two-Bond  $^{13}C-^{15}N$  Spin-Spin Coupling Constants ( $^2hJ_{C-N}$ ) across C-H-N Hydrogen Bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 3222 (2003) CLAVE=A
- 207.-** AUTORES: M. Esseffar, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas-phase reactivity of lactones. Structures and stability of their  $Cu^+$  complexes.*  
REF. REVISTA: Mol. Phys. **101**, 1249 (2003) CLAVE=A
- 208.-** AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Binding energies of  $Cu^+$  to saturated and  $\alpha,\beta$ -unsaturated alkanes, silanes and germanes. The role of agostic interactions.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom. **227**, 401 (2003) CLAVE=A
- 209.-** AUTORES: A. Luna, O. Mó, M. Yáñez, J.P. Morizur, E. Leclerc, B. Desmazières, V. Haldys, J. Chamot-Rooke and J. Tortajada.  
TITULO: *Specific reactivity of alkenes with transition metal cations. 1-Pentene- and 1-Octene- $Cu^+$  reactions in the gas phase.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass. Spectrom. **228**, 359 (2003) CLAVE=A
- 210.-** AUTORES: J.F. Gal, P.C. Maria, M. Decouzon, O. Mó, M. Yáñez, and J.-L. M. Abboud.  
TITULO: *Lithium-Cation/ $\pi$  complexes of aromatic systems. The effect of increasing the number of fused rings.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **125**, 10394 (2003) CLAVE=A
- 211.-** AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *Characterization of intramolecular hydrogen bonds and other weak intramolecular interactions on the basis of the topology of the charge density.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **5**, 2942 (2003) CLAVE=A
- 212.-** AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.

- TITULO: *Cyclization triggered by deprotonation. The gas-phase acidity of 1,8-Chalcogen-bridged naphthalenes.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **4**, 830 (2003) CLAVE=A
- 213.-** AUTORES: O. Mó and M. Yáñez, J.F. Gal, P.C. Maria, M. Decouzon.  
TITULO: *Enhanced  $\text{Li}^+$  Binding energies in alkylbenzene derivatives. The scorpion effect.*  
REF. REVISTA: Chemistry European J. **9**, 4330 (2003) CLAVE=A
- 214.-** AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *Resonance Assisted Intramolecular Chalcogen-Chalcogen Interactions?*  
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **9**, 4548 (2003) CLAVE=A
- 215.-** AUTORES: M.C. Sicilia, O. Mó, M. Yáñez, J.C. Guillemin, J.F. Gal and P.C. Maria.  
TITULO: *Is Allylphosphine a Carbon or a Phosphorus base in the gas phase?.*  
REF. REVISTA: Eur. J. Mass Spectrom. **9**, 257 (2003) CLAVE=A
- 216.-** AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *The importance of agostic-type interactions on the gas- phase of saturated and  $\alpha,\beta$ -unsaturated alkanes, silanes and germanes towards  $\text{Ni}^+$ .*  
REF. REVISTA: New J. Chem. **27**, 1657 (2003) CLAVE=A
- 217.-** AUTORES: A. El Firdoussi, M. Esseffar, W. Bouab, A. Lamsabhi, J.L.M. Abboud, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Basicity of Lactones and cyclic ketones towards  $\text{I}_2$  and  $\text{ICl}$ . An experimental and theoretical study.*  
REF. REVISTA: New J. Chem. **27**, 1741 (2003) CLAVE=A
- 218.-** AUTORES: I. Corral, O. Mó, M. Yáñez, A. Scott, and L. Radom  
TITULO: *The Interaction between Neutral Molecules and  $\text{Ca}^{2+}$ : An Assessment of Theoretical Procedures.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **107**, 10456 (2003) CLAVE=A
- 219.-** AUTORES: A. M. Lamsabhi, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas-Phase Reactivity of uracil, 2-thiouracil, 4-thiouracil, and 2,4-dithiouracil towards the  $\text{Cu}^+$  cation: a DFT study.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **4**, 1011 (2003) CLAVE=A
- 220.-** AUTORES: J.-Y. Salpin, J. Tortajada,, M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Optimization of extended basis sets and assessment of different theoretical schemes for Pb containing compounds.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **383**,561 (2004) CLAVE=A
- 221.-** AUTORES: J. Del Bene, J. Elguero, I. Alkorta, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO:  *$^{19}\text{F}$ - $^{19}\text{F}$  Spin-Spin Coupling Constant surfaces for  $(\text{HF})_2$  clusters: The orientation and distance dependence of the sign and magnitude of  $J_{\text{F-F}}$ .*  
REF. REVISTA: J. Chem Phys. **120**, 3237 (2004) CLAVE=A
- 222.-** AUTORES: A. Palacios, F. Martín, O. Mó, M. Yáñez, and Z. B. Maksic

- TITULO: *Stable doubly charged positive ions formed by direct attachment of alpha particles to HCN and HNC.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. Lett. **92**, 133001 (2004) CLAVE=A
- 223.- AUTORES: M.A.V. Ribeiro da Silva, M. das D. M. C. Ribeiro da Silva, L.M.P.F. Amaral, P. Jiménez, M.V. Roux, J.Z. Dávalos, M. Temprano, P. Cabildo, R. Claramunt, J. Elguero, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Experimental thermochemical study of two 2-alkylbenzimidazole isomers (alkyl = propyl and isopropyl).*  
REF. REVISTA: J. Chem. Thermo. **36**, 533 (2004). CLAVE=A
- 224.- AUTORES: J. Tortajada, B. Amekraz, M. Alcamí, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Unimolecular reactivity of strong metal cation complexes in the gas phase. Ethylenediamine-Cu<sup>+</sup>*  
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **10**, 2927 (2004) CLAVE=A
- 225.- AUTORES: P. Jiménez, M.V. Roux, J.Z. Dávalos, M. Temprano, M.A.V. Ribeiro da Silva, M. das D. M. C. Ribeiro da Silva, L.M.P.F. Amaral, P. Cabildo, R. Claramunt, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero.  
TITULO: *Substituent and ring effects on enthalpies of formation: 2-methyl- and 2-ethyl-benzimidazol vs. benzene- and imidazole-derivatives.*  
REF. REVISTA: Mol. Phys. **102**, 711 (2004). CLAVE=A
- 226.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: ***Bonding and Bonding Perturbation in Ion-Molecule Interactions in the Gas Phase.***  
REF. REVISTA: **Encyclopedia of Computational Chemistry. Published on line**  
URL: <http://www.mrw.interscience.wiley.com/ecc/articles/cn0062/frame.html> CLAVE=CL
- 227.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *The importance of non-conventional structures in the binding of Ni<sup>+</sup> to ethynyl-silanes and ethynyl-germanes.*  
REF. REVISTA: Theoret. Chem. Accounts. **112**, 298 (2004) CLAVE=A
- 228.- AUTORES: M. Alcamí, A. Luna, O. Mó, J. Tortajada and M. Yáñez  
TITULO: *A theoretical survey of the potential energy surface of Ethylenediamine + Cu<sup>+</sup> reactions.*  
REF. REVISTA: J. Phys.Chem. A **108**, 8367 (2004) CLAVE=A
- 229.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *Theoretical survey of the potential energy surfaces associated with the N<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P,<sup>1</sup>D) + C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> reactions in the gas phase.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **108**, 9762 (2004) CLAVE=A
- 230.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, M. Yáñez, J-Y. Salpin, J. Tortajada and L. Radom  
TITULO: *Gas-Phase Reactions between Urea and Ca<sup>2+</sup>: The importance of Coulomb explosions.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **108**, 10080 (2004) CLAVE=A
- 231.- AUTORES: A. El Firdoussi, M. Esseffar, W. Bouab, J.L.M. Abboud, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Push-pull electronic effects in charge-transfer complexes. The case of N-H and N-Me lactams.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **108**, 10568 (2004) CLAVE=A
- 232.- AUTORES: A. M. Lamsabhi, M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, and J. Tortajada.  
TITULO: *Cu<sup>2+</sup> association to uracil and its thio-derivatives. A theoretical study.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Chem. **5**, 1871-78 (2004) CLAVE=A

- 233.- AUTORES: I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, M. Yáñez, and J. Del Bene.  
TITULO: *Do coupling constants and chemical shift provide evidence for the existence of Resonance Assisted Hydrogen Bonds (RAHB)?*  
REF. REVISTA: Mol. Phys. **102**, 2563 (2004) CLAVE=A
- 234.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *Li<sup>+</sup> vs. Cu<sup>+</sup> association to toluene, phenyl-silane and phenyl-germane. Conventional vs. non-conventional  $\pi$ -complexes.*  
REF. REVISTA: Eur. J. Mass Spectrom. **10**, 921 (2004) CLAVE=A
- 235.- AUTORES: E. Quintanilla, J.Z. Dávalos, J.L.M. Abboud, M. Alcamí, M.P. Cabildo, R. Claramunt, J. Elguero, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Why does pivalaldehyde (trimethylacetaldehyde) unexpectedly seem more basic than 1-adamantanecarbaldehyde in the gas-phase?. A FT-ICR and high-level ab initio study.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **11**, 1826 (2005) CLAVE=A
- 236.- AUTORES: J.C. Guillemin, E. H. Riague, J.F. Gal, P.C. Maria, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Acidity trends in  $\alpha,\beta$ -unsaturated sulfur, selenium and tellurium derivatives. Comparison with C-, Si-, Ge-, Sn-, N-, P-, As-, and Sb-containing analogs.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **11**, 2145 (2005) CLAVE=A
- 237.- AUTORES: J. Del Bene, J. Elguero, I. Alkorta, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Ab initio study of the influence of trimer formation on one and two-bond spin-spin coupling constants across X-H-Y hydrogen bonds: Complexes AH:XH:YH<sub>3</sub> for A,X = <sup>19</sup>F, <sup>35</sup>Cl and Y = <sup>15</sup>N, <sup>31</sup>P.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem A. **109**, 2350 (2005) CLAVE=A
- 238.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, and J.C. Guillemin.  
TITULO: *A theoretical study on the dimers of Aminoacrylonitrile (3-Amino-2-Propenenitrile), a compound of astrochemical interest.*  
REF. REVISTA: Arkivoc **IX**, 239 (2005) CLAVE=A
- 239.- AUTORES: O. Picazo, I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Chiral Recognition in phosphinic acids dimers.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **18**, 491 (2005) CLAVE=A
- 240.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M. Eckert-Maksic, Z.B. Maksic, I. Alkorta and J. Elguero.  
TITULO: *Periodic trends in bond dissociation energies. A theoretical study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem A **109**, 4359 (2005) CLAVE=A
- 241.- AUTORES: A. Benidar, J.C. Guillemin, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Infrared Spectra of a Species of Astrochemical Interest: Aminoacrylonitrile (3-Amino-2-Propenenitrile).*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **109**, 4705 (2005) CLAVE=A
- 242.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, J. Del Bene, I. Alkorta, and J. Elguero.  
TITULO: *Cooperativity and proton transfer in hydrogen-bonded triads.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **6**, 1411 (2005) CLAVE=A
- 243.- AUTORES: A. Palacios, I. Corral, O. Mó, F. Martín and M. Yáñez

- TITULO: *On the existence and lifetimes of Cu<sup>2+</sup> complexes with water, ammonia and hydrogen cyanide.*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **123**, 014315 (1-5) (2005) CLAVE=A
- 244.- AUTORES: J. Zevallos, A. Toro-Labbé, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *The role of Intramolecular Hydrogen Bond vs. other weak interactions on the conformation of hyponitrous acid and its mono- and dithio-derivatives.*  
 REF. REVISTA: Struct. Chem. **16**, 295 (2005) CLAVE=A
- 245.- AUTORES: M.A.V. Ribeiro da Silva, M.das D. M. C. Ribeiro da Silva, L.M.P.F. Amaral, J. Elguero, P. Jiménez, M.V. Roux, J.Z. Dávalos, M. Temprano, P. Cabildo, R. Claramunt, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Thermochemical Properties of Two Benzimidazole Derivatives: 2-Phenyl- and 2-Benzylbenzimidazole.*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Therm. **37**, 1168 (2005). CLAVE=A
- 246.- AUTORES: I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, M. Yáñez, and J. Del Bene.,  
 TITULO: *Are RAHBs "resonance assisted"? A theoretical NMR study.*  
 REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **411**, 411 (2005) CLAVE=A
- 247.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, M. Yáñez and L. Radom  
 TITULO: *Why the Ca<sup>2+</sup> and K<sup>+</sup> binding energies of formaldehyde and ammonia are reversed with respect to their proton affinities?*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **109**, 6735 (2005) CLAVE=A
- 248.- AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
 TITULO: *The NICS(Nucleus-Independent Chemical Shift) as a probe of the relative stability of  $\beta$ -Chalcogenovinylaldehydes stabilized through intramolecular chalcogen-chalcogen interactions.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **730**, 217 (2005) CLAVE=A
- 249.- AUTORES: A. El Firdoussi, M. Esseffar, W. Bouab, J.L.M. Abboud, O. Mó, M. Yáñez and M.F. Ruasse.  
 TITULO: *Density Functional Theory Study of the Hydrogen Bond Interaction Between Lactones, Lactams and Methanol.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **109**, 9141 (2005) CLAVE=A
- 250.- AUTORES: X. Solans, M. Sodupe, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero.  
 TITULO: *Hydrogen bond vs. Proton transfer in médium-size zeolitas. A Theoretical Study.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. B **109**, 19301 (2005) CLAVE=A
- 251.- AUTORES: M. Güell, J. Poater, J. M. Luis, O. Mó, M. Yáñez and M. Solà  
 TITULO: *An aromaticity analysis of Lithium-cation/ $\pi$  complexes of aromatic systems.*  
 REF. REVISTA: ChemPhysChem **6**, 2552 (2005) CLAVE=A
- 252.- AUTORES: G. Bouchoux, D. Leblanc, W. Bertrand, T.B. McMahon, J.E. Szulejko, F. Berruyer- Penaud, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Protonation thermochemistry of selected hydroxy and methoxy carbonyl molecules.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **109**, 11851 (2005) CLAVE=A
- 253.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
 TITULO: *Analysis of the bonding in XH<sub>3</sub>-Cu<sup>+</sup> (X=B,Al,Ga) complexes..*  
 REF. REVISTA: Int. J. Quantum Chem. **106**, 659 (2006) CLAVE=A



- 254.- AUTORES: A. M. Lamsabhi, M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, and J. Tortajada.  
TITULO: *On the gas-phase deprotonation of Uracil-Cu<sup>2+</sup> and Thiouracil-Cu<sup>2+</sup> Complexes.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **110**, 1943 (2006) CLAVE=A
- 255.- AUTORES: L. Infantes, O. Mó, M. Yáñez, M.V. Roux, P. Jiménez, J.Z. Dávalos, M. Temprano, M.A.V. Ribeiro da Silva, M.das D. M. C. Ribeiro da Silva, L.M.P.F. Amaral, P. Cabildo, R. Claramunt, and J. Elguero.  
TITULO: *Substituent Effects on Enthalpies of Formation of Nitrogen Heterocycles: 2-Substituted Benzimidazoles and Related Compounds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **110**, 2535 (2006). CLAVE=A
- 256.- AUTORES: C. Trujillo, A. M. Lamsabhi, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The reactions of F<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P) and F<sup>+</sup>(<sup>1</sup>D) with silicon oxide. Possibility of spin-forbidden processes.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **110**, 7130 (2006) CLAVE=A
- 257.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *Cu<sup>+</sup> association to some Ph-X (X=OH, NH<sub>2</sub>, CHO, COOH, CF<sub>3</sub>) phenyl derivatives. A comparison with Li<sup>+</sup> complexes.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass. Spectrom. **255-256**, 20 (2006) CLAVE=A
- 258.- AUTORES: J. Del Bene, J. Elguero, I. Alkorta, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *An ab initio study of <sup>15</sup>N-<sup>11</sup>B spin-spin coupling constants for borazine and selected derivatives.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **110**, 9959 (2006) CLAVE=A
- 259.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, M. Yáñez J-Y Salpin, J. Tortajada, D. Moran and L. Radom  
TITULO: *An experimental and theoretical investigation of glycine+ Ca<sup>2+</sup> reactions in the gas phase*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **12**, 6787 (2006) CLAVE=A
- 260.- AUTORES: J.F. Gal, P.C. Maria, O. Mó, M. Yáñez and D. Kuck.  
TITULO *Gaseous Complexes between Lithium Cation and Diphenylalkanes. The Pincer Effect.*  
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **12**, 7676 (2006) CLAVE=A
- 261.- AUTORES: A. Luna, O. Mó, M. Yáñez J.F. Gal, P.C. Maria, and J.C. Guillemin.  
TITULO *Gas-phase protonation and deprotonation of acrylonitrile derivatives N≡C-CH=CH-X (X=CH<sub>3</sub>, NH<sub>2</sub>, PH<sub>2</sub>, SiH<sub>3</sub>).*  
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **12**, 9254 (2006) CLAVE=A
- 262.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *On the stability of non-conventional π-complexes between Ni<sup>+</sup> and toluene, phenyl-silane and phenyl-germane*  
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **19**, 495 (2006) CLAVE=A
- 263.- AUTORES: A. M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez, J. Tortajada, and J-Y Salpin.  
TITULO *Unimolecular reactivity of Uracil-Cu<sup>2+</sup> complexes in the Gas-Phase*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **8**, 181 (2007) CLAVE=A
- 264.- AUTORES: J.Z. Dávalos, R. Herrero, J.L.M. Abboud, O. Mó, and M. Yáñez.

- TITULO: *How can a carbon atom be covalently bound to five ligands?. The case of  $\text{Si}_2(\text{CH}_3)_7^+$  or the beauty of symmetry.*  
 REF. REVISTA: *Angew. Chem. Int. Ed.* **46**, 381 (2007) CLAVE=A
- 265.- AUTORES: J. Del Bene, J. Elguero, I. Alkorta, M. Yáñez, and O. Mó.  
 TITULO: *Attacking Boron Nucleophiles: NMR Properties of 5-membered Diazaborole Rings.*  
 REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. A* **111**, 419 (2007) CLAVE=A
- 266.- AUTORES: M. Esseffar, R. Herrero, E. Quintanilla, J.Z. Dávalos, , J.L.M. Abboud, M. Yáñez, and O. Mó.  
 TITULO: *Activation of the disulfide bond and chalcogen-chalcogen interactions. An experimental (FT-ICR) and computational study .*  
 REF. REVISTA: *Chemistry Eur. J.* **13**, 1796 (2007) CLAVE=A
- 267.- AUTORES: J. Del Bene, O. Mó, M. Yáñez, I. Alkorta, and J. Elguero.  
 TITULO: *Spin-Spin Coupling Constants for Iminoboranes RBNH, HBNR, and RBNR and Comparisons with Corresponding Isoelectronic Acetylenes RCCH and RCCR, for R = H, CH<sub>3</sub>, NH<sub>2</sub>, OH, and F.*  
 REF. REVISTA: *J. Chem. Theor. Comp.* **3**, 549 (2007) CLAVE=A
- 268.- AUTORES: E. Rincón, O. Mó, A. Toro-Labbé, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Effect of Ni(II), Cu(II) and Zn(II) association on the keto-enol tautomerism of thymine.*  
 REF. REVISTA: *Phys. Chem. Chem. Phys.* **9**, 2531 (2007) CLAVE=A
- 269.- EDITORS: O. Mó, M. Yáñez.  
 TITULO: *Special Issue on "COMPUTATIONAL ORGANIC CHEMISTRY"*  
 REF. REVISTA: *J. Mol. Struct. THEOCHEM*, **811** (2007) CLAVE=L
- 270.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, J-Y Salpin, and J. Tortajada.  
 TITULO: *Thermochemistry, Bonding and Reactivity of  $\text{Ni}^+$  and  $\text{Ni}^{2+}$  in the gas phase*  
 REF. REVISTA: *Mass Spectrom. Rev.* **26**, 474-516 (2007) CLAVE=A
- 271.- AUTORES: C. Trujillo, O. Mó, M. Yáñez, J-Y Salpin, and J. Tortajada.  
 TITULO: *Gas-Phase Reactions between Thiourea and  $\text{Ca}^{2+}$ . New evidences for the formation of  $[\text{Ca}(\text{NH}_3)]^{2+}$  and other doubly charged species*  
 REF. REVISTA: *ChemPhysChem* **8**, 1330 (2007) CLAVE=A
- 272.- AUTORES: P. Sanz, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero  
 TITULO: *The structure of the enols of  $\beta$ -diketones and their nitrogen counterparts: a study on the nature of intramolecular hydrogen bonds.*  
 REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. A* **111**, 3585 (2007) CLAVE=A
- 273.- AUTORES: C. Trujillo, O. Mó, M. Yáñez.  
 TITULO: *A Theoretical Study of hydration effects on the Prototropic Tautomerism of Selenouracils.*  
 REF. REVISTA: *Org. Biomol. Chem.* **5**, 3092 (2007) CLAVE=A
- 274.- AUTORES: P. Sanz, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero  
 TITULO: *Intramolecular hydrogen bond in hydroxymethylene and aminomethylene cyclobutanones and cyclobutenones and their nitrogen counterparts. Another example of non-Resonance Assisted Hydrogen Bonding.*  
 REF. REVISTA: *ChemPhysChem* **8**, 1950 (2007) CLAVE=A

- 275.- AUTORES: O. M6, M. Y6ñez, A. Mart6n-Pend6s, I. Alkorta, J. Elguero, and J. Del Bene  
TITULO: *Unusual substituent effects on the bonding of iminoboranes.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **9**, 3970 (2007) CLAVE=A
- 276.- AUTORES: A. Luna, O. M6, M. Y6ñez, J.C. Guillemin, J.F. Gal, and P.C. Maria.  
TITULO *Cyano substituent effects on enol and enethiol acidity and basicity: the protonation and deprotonation of 3-hydroxy-2-propenenitrile and its thio analogue.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom. **267**, 125 (2007) CLAVE=A
- 277.- AUTORES: J.A. G6mez, J.C. Guillemin, O. M6, and M. Y6ñez.  
TITULO: *Strong Dissimilarities between the Gas-Phase Acidities of Saturated and  $\alpha,\beta$ -Unsaturated Boranes and the corresponding Alanes and Gallanes.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **14**, 2201 (2008) CLAVE=A
- 278.- AUTORES: A. M. Lamsabhi, O. M6, M. Y6ñez, J. Tortajada, and J-Y Salpin.  
TITULO: *Ni<sup>+</sup> reactions with aminoacetonitrile, a potential pre-biological molecule precursor of glycine.*  
REF. REVISTA: J. Mass Spectrom. **43**, 317 (2008) CLAVE=A
- 279.- AUTORES: A. Medina, C.G. Claessens, G.M. Aminur Rahman, A.M. Lamsabhi, O. M6, M. Y6ñez, D.M. Guldi and T. Torres.  
TITULO: *Accelerating charge transfer in a triphenylamine-subphthalocyanine donor-acceptor system.*  
REF. REVISTA: Chem. Comm. 1759-1761 (2008) CLAVE=A
- 280.- AUTORES: A. Cimas, J.A. G6mez, O. M6, M. Y6ñez and J-Y. Salpin.  
TITULO *Computational study on the kinetics of the reaction between Ca<sup>2+</sup> and Urea..*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **456**, 156 (2008) CLAVE=A
- 281.- AUTORES: P. Sanz, O. M6, M. Y6ñez, and J. Elguero  
TITULO: *Bonding in Tropolone, 2-Aminotropone and Aminotropoimine. No evidence of Resonance Assisted Hydrogen Bonding..*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **14**, 4225 (2008) CLAVE=A
- 282.- AUTORES: C. Trujillo, O. M6, M. Y6ñez, J. Tortajada, and J-Y Salpin.  
TITULO: *Selenourea-Ca<sup>2+</sup> Reactions in the Gas-Phase. Similarities and dissimilarities with urea and thiourea..*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. B. **112**, 5479 (2008) CLAVE=A
- 283.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, O. M6, M. Y6ñez and R. Boyd.  
TITULO: *Gas-phase Interactions of Calcium (Ca<sup>2+</sup>) with Seleno Derivatives of Uracil*  
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **4**, 1002 (2008.) CLAVE=A
- 284.- AUTORES: C. Trujillo, A.M. Lamsabhi, O. M6, and M. Y6ñez.  
TITULO *The importance of the oxidative character of doubly charged metal cations in binding neutral bases. [Urea-M]<sup>2+</sup> and [Thiourea-M]<sup>2+</sup> (M = Mg, Ca, Cu) Complexes.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **10**, 3229 (2008) CLAVE=A
- 285.- AUTORES: C. Trujillo, A. M. Lamsabhi, O. M6, M. Y6ñez, and J-Y. Salpin.

- TITULO *Interactions of  $Ca^{2+}$  with uracil and its thio derivatives in the gas phase* .  
REF. REVISTA: Org. Biomol. Chem. **6**, 3695 (2008) CLAVE=A
- 286.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez, J-Y. Salpin, V. Haldys, J. Tortajada, J.C. Guillemin.  
TITULO:  *$Ni^+$  reactions with aminoacrylonitrile, a species of astrochemical relevance*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **112**, 10509 (2008) CLAVE=A
- 287.- AUTORES: M. Yáñez, O. Mó, I. Alkorta, and J. Del Bene.,  
TITULO: *Structures, bonding, and one-bond B-N and B-h spin-spin coupling constants for a series of neutral and anionic five-membered rings containing BN bonds.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **4**, 1869 (2008) CLAVE=A
- 288.- AUTORES: C. Trujillo, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO *Why selenouracils are as basic as uracil but stronger acids in the gas phase?*.  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **9**, 1715 (2008) CLAVE=A
- 289.- AUTORES: A. Eizaguirre, O. Mó, M. Yáñez, and J.C. Guillemin.  
TITULO:  *$\alpha,\beta$ -unsaturated and saturated derivatives of Be, Mg and Ca. Are they carbon or metal acids in the gas phase?*  
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **14**, 10423 (2008) CLAVE=A
- 290.- AUTORES: C. Trujillo, O. Mó, M. Yáñez, and B. Silvi.  
TITULO *On the Bonding of selenocyanates and isoselenocyanates and their protonated derivatives.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **4**, 1593 (2008) CLAVE=A
- 291.- AUTORES: M. Hurtado, J.G. Contreras, A. Matamala, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Conformational analysis, magnetic properties and nitrogen inversion of N-substituted 1,3-oxazines.*  
REF. REVISTA: New J. Chem. **32**, 2209 (2008) CLAVE=A
- 292.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, O. Mó, S. Gutierrez-Oliva, P. Perez, A. Toro-Labbé, and M. Yáñez.  
TITULO: *The mechanism of double proton transfer in dimmers of uracyl and 2-thiouracyl The reaction force perspective.*  
REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **30**, 389 (2009) CLAVE=A
- 293.- AUTORES: P. Sanz, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero  
TITULO: *The effects of C by N replacement on the hydrogen bonding of malonaldehyde: N-formylformimidic acid, N-(hydroxymethyl) formamide and related compounds.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **11**, 762 (2009) CLAVE=A
- 294.- AUTORES: M. Hurtado, O. Mó, M. Yáñez, and J.C. Guillemin.  
TITULO: *Acidity enhancement of the cyclopentadiene cycle by  $PH_2$  and  $AsH_2$  substitution.*  
REF. REVISTA: Croatica Chimica Acta. **82**, 1 (2009) CLAVE=A
- 295.- AUTORES: J.E. del Bene, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Substituent effects on B-N bonding and coupling constants in five-membered rings  $N_3B_2H_4X$  and  $N_2B_3H_4X$  for  $X= H, F, \text{ and } Li$ .*  
REF. REVISTA: Croatica Chimica Acta. **82**, 149 (2009) CLAVE=A
- 296.- AUTORES: I. Alkorta, J. E. Del Bene, J. Elguero, O.Mó and M. Yáñez.

- TITULO: *A theoretical study of diborenes HRB=BRH for R = CO, NH<sub>3</sub>, OH<sub>2</sub> PH<sub>3</sub>, SH<sub>2</sub>, ClH: Structures, energies and spin-spin coupling constants.*  
REF. REVISTA: Theor. Chem. Acc. **124**, 186-195 (2009) CLAVE=A
- 297.-** AUTORES: P.Sanz, M. Yáñez, O.Mó, I. Alkorta, and J. Elguero.  
TITULO: *Beryllium bonds, do they exist?.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **5**, 2763-2771 (2009) CLAVE=A
- 298.-** AUTORES: M. Esseffar, A. El Firdoussi, W. Bouab, J.L.M. Abboud, O. Mo, and M. Yáñez.  
TITULO: *Combined Experimental and Theoretical Study on Hydrogen-Bonded Complexes between Cyclic Ketones, Lactones and Lactams and 3,4-Dinitrophenol*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **113**, 14711-14717 (2009) CLAVE=A
- 299.-** AUTORES: M. Hurtado, A.M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J.-C. Guillemin.  
TITULO: *Are cyclopentadienylberyllium, magnesium and calcium hydrides carbon or metal acids in the gas phase?.*  
REF. REVISTA: Dalton Trans. **39**, 4593-4601 (2010) CLAVE=A
- 300.-** AUTORES: M. Hurtado, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Homoselenocisteina. An Oxygen or a Selenium acid in the gas-phase?*  
REF. REVISTA: Can. J. Chem. **88**, 744-753 (2010) CLAVE=A
- 301.-** AUTORES: A.M. Lamsabhi, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Serine-Ca<sup>2+</sup> vs. Serine-Cu<sup>2+</sup> complexes. A theoretical perspective.*  
REF. REVISTA: Can. J. Chem. **88**, 759-768 (2010) CLAVE=A
- 302.-** AUTORES: Alvaro Cimas, Inés Corral, Otilia Mó, Manuel Yáñez and Nazario Martín.  
TITULO: *Hydrogen bonding in electronically excited states: A comparison between formic acid dimer and its mono-substituted thioderivatives.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **12**, 13037-46 (2010) CLAVE=A
- 303.-** AUTORES: José A. Gámez, Inés Corral, Otilia Mó and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Unexpected gas-phase ion chemistry results unraveled by computational chemistry.*  
REF. REVISTA: Current Org. Chem. **14**, 1600-1611 (2010) CLAVE=A
- 304.-** AUTORES: Ibon Alkorta, José Elguero, Janet E. Del Bene, Otilia Mó, and Manuel Yáñez,  
TITULO: *New insights into factors which influence B-N bonding in X: BH<sub>3-n</sub>F<sub>n</sub> and X: BH<sub>3-n</sub>Cl<sub>n</sub> for X= N<sub>2</sub>, HCN, LiCN, H<sub>2</sub>CNH, NF<sub>3</sub>, NH<sub>3</sub> and n = 0-3: The importance of deformation.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **16**, 11897-11905 (2010) CLAVE=A
- 305.-** AUTORES: A. Benidar, J-C. Guillemin, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Infrared Spectra of a Species of Potential Prebiotic and Astrochemical Interest: Cyanoethenethiol (HS-CH=CH-CN).*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **114**, 9583-9588 (2010) CLAVE=A
- 306.-** AUTORES: A. Gonzalez-Castrillo, M. Hurtado, O. Mó, M. Yáñez, and J.C. Guillemin.  
TITULO: *The role of hyperconjugative  $\pi$ -aromaticity on the enhanced acidity of CpXH<sub>3</sub> (X= C, Si, Ge) derivatives.*  
REF. REVISTA: Mol. Phys. **108**, 2467-2476 (2010) CLAVE=A
- 307.-** AUTORES: Janet E. Del Bene, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez,

- TITULO: *Structural and Electronic Effects on One-bond Spin-spin Coupling Constants  $^1J(B-N)$ ,  $^1J(B-H)$ ,  $^1J(B-F)$  for Complexes of Nitrogen Bases with  $BH_3$  and its Fluoro-substituted Derivatives.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **114**, 12775-12779 (2010) CLAVE=A
- 308.-** AUTORES: A. Eizaguirre, O.Mó, M. Yáñez and R.J. Boyd  
 TITULO: *Effect of  $Sr^{2+}$  association on the tautomerization processes of uracil and its dithio- and diseleno-derivatives.*  
 REF. REVISTA: Org. Biomol. Chem. **9**, 423-431 (2011) CLAVE=A
- 309.-** AUTORES: Otilia Mó and Manuel Yáñez.  
 TITULO: *La Química Computacional en la Nueva Frontera.*  
 REF. REVISTA: Arbor **187**, 143-155 (2011) CLAVE=A
- 310.-** AUTORES: A. Eizaguirre, A.M. Lamsabhi, O.Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Assisted Intramolecular Proton Transfer in  $(uracil)_2Ca^{2+}$  complexes*  
 REF. REVISTA: Theor. Chem. Acc. **128**, 457-464 (2011) CLAVE=A
- 311.-** AUTORES: Otilia Mó and Manuel Yáñez.  
 TITULO: *La Química Cuántica o la larga travesía del desierto*  
 REF. REVISTA: Gaceta de la RSEM **14**, 229-246 (2011) CLAVE=A
- 312.-** AUTORES: C. Trujillo, A. M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J.-Y. Salpin.  
 TITULO: *Unimolecular Reactivity upon collision of Uracil- $Ca^{2+}$  complexes in Gas Phase: Comparison with uracil- $M^+$  ( $M= H$ , alkali metals) and uracil- $M^{2+}$  ( $M=Cu, Pb$ ) systems..*  
 REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom. **306**, 27-36 (2011). CLAVE=A
- 313.-** AUTORES: A. Eizaguirre, O.Mó, M. Yáñez and J-Y. Salpin.  
 TITULO: *Modeling the interaction between peptide functions and  $Sr^{2+}$ : Formamide-  $Sr^{2+}$  reactions in the gas phase*  
 REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **13**, 18409 (2011) CLAVE=A
- 314.-** AUTORES: M. Hurtado, A-M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J-C. Guillemin .  
 TITULO: *Stability trends and tautomerization of chalcocyclopentadienes. The role of aromaticity.*  
 REF. REVISTA: New J. of Chem. **35**, 2713-2719 (2011) CLAVE=A
- 315.-** AUTORES: A-M. Lamsabhi, M. Yáñez, O. Mó, C. Trujillo, F. Blanco, I. Alkorta, J. Elguero, E. Caballero, M.S. Rodríguez-Morgade, CG. Claessens and T. Torres.  
 TITULO: *TDDFT study of the UV-vis spectra of subporphyrazines and subphthalocyanines*  
 REF. REVISTA: Journal of Porphyrins and Phthalocyanines **15**, 1220-1230 (2011) CLAVE=A
- 316.-** AUTORES:, I. Corral, A.M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Infrared spectra of charge-solvated vs. salt-bridge conformations of glycine-, serine- and cisteine- $Ca^{2+}$  complexes.*  
 REF. REVISTA: Int. J. Quant. Chem. **112**, 2126-2134 (2012) CLAVE=A
- 317.-** AUTORES: M. Hurtado, A-M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J-C. Guillemin.  
 TITULO: *On the origin of the enhanced acidity of chalcocyclopentadienes(cyclopentadiene-chalcogenols) in the gas phase.*  
 REF. REVISTA: ChemPhysChem **13**, 1167-1172 (2012), Inside cover, VIP, CLAVE=A

- 318.-** AUTORES: Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, José Elguero.  
TITULO: *Modulating the strength of hydrogen bonds through beryllium bonds.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **8**, 2293-2300 (2012) CLAVE=A
- 319.-** AUTORES: Goar Sanchez-Sanz, Ibon Alkorta, José Elguero, Manuel Yáñez, Otilia Mó.  
TITULO: *Strong interactions between copper halides and unsaturated systems: new metallocycles? or the importance of deformation.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **14**, 11468-11477 (2012) CLAVE=A
- 320.-** AUTORES: A. Eizaguirre, O.Mó, M. Yáñez, J-Y. Salpin and J. Tortajada.  
TITULO: *Modelling peptide-metal dication interactions: Formamide-Ca<sup>2+</sup> reactions in the Gas Phase.*  
REF. REVISTA: Org. Biomol. Chem. **10**, 7552-7561 (2012) CLAVE = A
- 321.-** AUTORES: A. Martin-Somer, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Unexpected Acidity Enhancement Triggered by ALH3 Association to Phosphines.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem A. **116**, 6950-6954 (2012) CLAVE=A
- 322.-** AUTORES: A. Martin-Somer, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *The importance of deformation on the strength of berillium bonds.*  
REF. REVISTA: Comp and Theoret. Chem. **998**, 74-79 (2012) CLAVE=A
- 323.-** AUTORES: Laura Albrecht, Russell J. Boyd, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Cooperativity between Hydrogen bonds and beryllium bonds in (H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>BeX<sub>2</sub> (n =1-3, X = H, F) complexes. A new perspective.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **14**, 14540-14547 (2012) CLAVE=A
- 324.-** AUTORES: M. M. Vallejos, A-M. Lamsabhi\*, N. M. Peruchena, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Microsolvation of Morpholine, a bidentate base. The importance of cooperativity*  
REF. REVISTA: J.Phys. Org. Chem. **25**, 1380-1390 (2012) CLAVE=A
- 325.-** AUTORES: M. Montero-Campillo, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Alkyl Mercury Compounds: An Assessment of DFT Methods.*  
REF. REVISTA: Theoret. Chem. Acc. **132**, 1328-8 (2013) CLAVE=A
- 326.-** AUTORES: R. Verzeni, O. Mó, A. Cimas, I. Corral and M. Yáñez  
TITULO: *MS-CASPT2 study of the low-lying electronic excited states of di-thiosubstituted formic acid dimers.*  
REF. REVISTA: Theoret. Chem. Acc. **132**, 1338-8 (2013) CLAVE=A
- 327.-** AUTORES: Gavin S. Heverly-Coulson, Russell J. Boyd, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Revealing unexpected mechanisms for nucleophilic attack on S-S and Se-Se bridges.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **19**, 3629-3638 (2013) CLAVE=A
- 328.-** AUTORES: A. Eizaguirre, O.Mó, M. Yáñez and J-Y. Salpin.  
TITULO: *Unimolecular reactivity of the [Urea-Sr]<sup>2+</sup> complex, a metastable dication in the gas phase: An experimental and theoretical perspective.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. B **117**, 2088-2095 (2013) CLAVE=A
- 329.-** AUTORES: M. Montero-Campillo, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *UV-Vis Spectra Of Subporphyrazines And Subphthalocyanines With Aluminum*

*And Gallium: A Time Dependent-DFT Study.*

REF. REVISTA: ChemPhysChem. **14**, 915-922 (2013) CLAVE=A

- 330.-** AUTORES: Oriana Brea, Manuel Yáñez, Otilia Mó, and Al Mokhtar Lamsabhi.  
TITULO: *On the stability of [(uracil)<sub>2</sub>-Cu]<sup>2+</sup> complexes in the gas phase. Different pathways for the formation of [(uracil-H)(uracil)-Cu]<sup>+</sup> monocations.*  
REF. REVISTA: Org. Biomol. Chem., **11**, 3862-3870 (2013) CLAVE=A
- 331.-** AUTORES: Cristina Trujillo, Goar Sánchez-Sanz, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez,  
TITULO: *Resonance assisted hydrogen bonds in open-chain and cyclic structures of malonaldehyde enol: A theoretical study.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. **1048**, 138-151 (2013) CLAVE=A
- 332.-** AUTORES: M. Montero-Campillo, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Modulating weak intramolecular interactions through the formation of beryllium bonds: complexes between squaric acid and BeH<sub>2</sub>.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Mod. **19**, 2759-2766 (2013) CLAVE=A
- 333.-** AUTORES: Manuel Yáñez, Otilia Mó, Ibon Alkorta, José Elguero.  
TITULO: *Can conventional Bases and Unsaturated Hydrocarbons be converted into gas-phase Superacids that are stronger than most of the known Oxyacids? The role of Beryllium Bonds.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **19**, 11637-11643 (2013) CLAVE=A
- 334.-** AUTORES: M. Hurtado, M. Monte-Caballero, A-M. Lamsabhi, M. Yáñez, O. Mó and J-Y Salpin.  
TITULO: *Modelling interactions between an amino acid and a metal dication: cysteine-Ca(II) reactions in the gas phase.*  
REF. REVISTA: ChemPlusChem **78**, 1124-1133 (2013), CLAVE=A
- 335.-** AUTORES: Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, and José Elguero.  
TITULO: *Enhancing and modulating the intrinsic acidity of imidazole and pyrazol through Beryllium bonds.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Mod. **19**, 4139-4145 (2013) CLAVE=A
- 336.-** AUTORES: Gavin S. Heverly-Coulson, Russell J. Boyd, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Dramatic substituent effects on the mechanisms of nucleophilic attacks on Se-S bridges.*  
REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **34**, 2537-2547 (2013) CLAVE=A
- 337.-** AUTORES: D. Nieto, S. Bruña, M. Montero-Campillo, J. Méndez, A.M. González-Vadillo, J. Perles, O. Mó and I. Cuadrado.  
TITULO: *Unexpected mechanochemical and silica gel-mediated formation of the highly electro-poor 1-cyanocarbonylferrocene.*  
REF. REVISTA: Chem. Comm. **49**, 9785-87 (2013) CLAVE=A
- 338.-** AUTORES: A-M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J-C. Guillemin.  
TITULO: *Conformational preferences of RCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CN (R= CH<sub>3</sub>, F, Cl) cyanides and their corresponding isocyanides.*  
REF. REVISTA: Struct. Chem. **24**, 1789-1798 (2013), CLAVE=A
- 339.-** AUTORES: A. Benidar, R. Georges, J-C. Guillemin O. Mó and M. Yáñez.



- TITULO: *Infrared Spectra of Cyanoacetaldehyde (NCCH<sub>2</sub>CHO), a Potential Prebiotic compound of Astrochemical Interest.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **14**, 2764-2771 (2013), CLAVE=A
- 340.-** AUTORES: Manuel Yáñez, Otilia Mó, Ibon Alkorta, and José Elguero.  
TITULO: *Spontaneous ion-pair formation in the gas phase induced by Beryllium bonds*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **590**, 22-26 (2013) CLAVE=A
- 341.-** AUTORES: M. Hurtado, A-M. Lamsabhi, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *Complexation of Ca<sup>2+</sup> with Selenocysteine and its effects on its intrinsic acidity*  
REF. REVISTA: Arkivoc **ii**, 207-223 (2014), CLAVE=A
- 342.-** AUTORES: Ibon Alkorta, José Elguero, Manuel Yáñez, and Otilia Mó.  
TITULO: *Cooperativity in Beryllium Bonds*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **16**, 4305-4312 (2014) CLAVE=A
- 343.-** AUTORES: A. Benidar, M. Montero-Campillo, A-M. Lamsabhi, O. Mó, J-C. Guillemin and M. Yáñez.  
TITULO: *On the Structures, lifetimes, and Infrared Spectra of Alkyl Mercury Hydrides.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **15**, 530-541 (2014), CLAVE=A
- 344.-** AUTORES: Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, and José Elguero.  
TITULO: *Spontaneous proton transfers induced by Beryllium bonds*  
REF. REVISTA: Mol. Phys. **112**, 592-600 (2014) CLAVE=A
- 345.-** AUTORES: F. Aguilar-Galindo, M. Montero-Campillo, M. Yáñez, and O. Mó  
TITULO: *On the Stability of [Pb(Proline)]<sup>2+</sup> Complexes. Reconciling Theory with Experiment.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **598**, 91-95 (2014) CLAVE=A
- 346.-** AUTORES: M. Montero-Campillo, M. Yáñez, A-M. Lamsabhi, and O. Mó  
TITULO: *Spontaneous H<sub>2</sub> Loss through the Interaction of Squaric Acid Derivatives and BeH<sub>2</sub>.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **20**, 5309-5316 (2014) CLAVE=A
- 347.-** AUTORES: Laura Albrecht, Russell J. Boyd, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Changing weak halogen bonds into strong ones through cooperativity with beryllium bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **118**, 4205-4213 (2014) CLAVE=A
- 348.-** AUTORES: K. Lemishko, M. Montero-Campillo, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The Behavior of Carboxylic Acids Upon Complexation With Beryllium Compounds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **118**, 5720-5726 (2014) CLAVE=A
- 349.-** AUTORES: A. Martin-Somer, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Are Boryl radicals from amine- and phosphine-boranes the most stable radicals?.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **15**, 2288-2294 (2014) CLAVE=A
- 350.-** AUTORES: E. Fernandez Villanueva, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *On the existence and Characteristics of  $\pi$ -Berilium bonds.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **16**, 17531-17536 (2014) CLAVE=A
- 351.-** AUTORES: M. Hurtado, O. Mó, M. Yáñez, B. Herrera, and A-M. Lamsabhi.  
TITULO: *New insights into the gas-phase unimolecular fragmentations of [Cysteine-Ca]<sup>2+</sup>*

- complexes*  
REF. REVISTA: Comp. Theor. Chem. **1047**, 38-46 (2014) CLAVE=A
- 352.-** AUTORES: A. Martin-Somer, M.M. Montero-Campillo, O. Mó, M. Yáñez, I. Alkorta and J. Elguero.  
TITULO: *Some Interesting Features of Non-Covalent Interactions*  
REF. REVISTA: Croat Chem.Acta. **87**,291-306 (2014) CLAVE=A
- 353.-** AUTORES: Kathy J. Chen, Otilia Mó, Manuel Yáñez, and Inés Corral  
TITULO: *Can transition metals and group II mono- and dications discriminate between homo- and heterochiral XXXX' dimers (X,X'=H,Me; Y=O,S,Se)?*  
REF. REVISTA: Croat Chem.Acta. **87**,481-493 (2014) CLAVE=A
- 354.-** AUTORES: Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, Manuel Yáñez, and Janet E. Del Bene.  
TITULO: *Using Beryllium Bonds to Change Halogen Bonds From Traditional to Chlorine-shared to Ion-pair.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **17**, 2259-2267 (2015) CLAVE=A
- 355.-** AUTORES: A. Martin-Somer, O. Mó, M. Yáñez and JC Guillemin.  
TITULO: *Acidity enhancement of unsaturated bases of the group 15 by association with borane and beryllium dihydride. Unexpected boron and beryllium Bronsted acids.*  
REF. REVISTA: Dalton Trans. **44**, 1193-1202 (2015) DOI: 10.1039/c4dt02292k CLAVE=A
- 356.-** AUTORES: M.M. Montero-Campillo, S. Bruña, I. Cuadrado, and O. Mó  
TITULO: *Intervaleance Charge Transfer Across Non Covalent Interactions On Vinyl Silyl Biferrocenyl Compounds.*  
REF. REVISTA: Comp. Theor. Chem. **1053**, 281-288 (2015)
- 357.-** AUTORES: Marta Marín-Luna, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Interplay in BeR<sub>2</sub>:C<sub>6</sub>X<sub>6</sub>:Y(-) complexes (R=H, F and Cl, X=H and F, and Y=Cl and Br).*  
REF. REVISTA: Molecules **20**, 9961-9976 (2015) CLAVE=A
- 358.-** AUTORES: Oriana Brea, Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, José Elguero.  
TITULO: *Creating  $\sigma$ -holes trough the formation of berillium bonds.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **21**, 12676-12682 (2015) CLAVE=A
- 359.-** AUTORES: J-F. Gal, M. Yáñez, O. Mó,  
TITULO: *The aluminum mono-cation basicity and affinity scales.*  
REF. REVISTA: Eur. J. Mass Spectr. **21**, 517-532 (2015) CLAVE=A
- 360.-** AUTORES: Marta Marín-Luna, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Simultaneous Aromatic-Beryllium Bonds and Aromatic-Anion Interactions: Naphthalene and Pyrene as Models of Fullerenes, Carbon Single-Walled Nanotubes (SWNTs) and Graphene.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **16**, 2680-2686 (2015) CLAVE=A
- 361.-** AUTORES: A-M. Lamsabhi, S. Gutierrez-Oliva, O. Mó, A. Toro-Labbé and M. Yáñez  
TITULO: *Effects of the Ionization in the Tautomerism of Uracil: A Reaction Electronic Flux Perspective.*  
REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **36**, 2135-2145 (2015) CLAVE=A

- 362.-** AUTORES: Oriana Brea, Manuel Yáñez, Otilia Mó, and Al Mokhtar Lamsabhi.  
TITULO: *Why is the spontaneous deprotonation of [(Uracil)<sub>2</sub>Cu]<sup>2+</sup> Complexes accompanied by an enolization of the system?*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **16**, 2375-2382 (2015) CLAVE=A
- 363.-** AUTORES: Oriana Brea, Otilia Mó, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Ga<sup>+</sup> Basicity and Affinity Scales Based on High-Level Ab Initio Calculations.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **16**, 3206-3213 (2015) CLAVE=A
- 364.-** AUTORES: S. Bruña, I. Martínez –Montero, A.M. González-Vadillo, C. Martín-Fernández, M.M. Montero-Campillo, O. Mó, and I. Cuadrado.  
TITULO: *Ferrocene and Silicon-Containing Oxathiacrown Macrocycles and Linear Oligo-Oxathioethers obtained via Thiol-Ene Chemistry of a Redox-Active Bifunctional Vinylsiloxane.*  
REF. REVISTA: Macromolecules **48**, 6955-6969 (2015) CLAVE=A
- 365.-** AUTORES: Marta Marín-Luna, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Fullerene and corannulene derivatives acting as insulators of Cl and BeH<sub>2</sub>.*  
REF. REVISTA: PhysChemChemPhys **18**, 6059-6068 (2016) CLAVE=A
- 366.-** AUTORES: M.Merced Montero-Campillo, Otilia Mó, Manuel Yáñez, Abdessamad Benidar, Cedric Rouxel, Nicolas Kerisit, Y. Trolez and Jean Claude Guillemin  
TITULO: *Gas Phase Infrared Spectroscopy of Substituted Cyanobutadiynes. The Role Played by Bromine Atom and Methyl Group as Substituents.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **17**, 1018-1024 (2016) CLAVE=A
- 367.-** AUTORES: Al Mokhtar Lamsabhi, Margarita M. Vallejos, Barbara Herrera, Otilia Mó, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Effect of beryllium bonds on the keto-enol tautomerism of formamide derivatives. A subtle basicity-acidity balance.*  
REF. REVISTA: Theor. Chem. Acc. **135**, 147 (9 pg.) (2016) CLAVE=A
- 368.-** AUTORES: Oriana Brea, Ibon Alkorta, Otilia Mó, Manuel Yáñez, José Elguero, Inés Corral.  
TITULO: *Exergonic and spontaneous production of radicals through beryllium bonds.*  
REF. REVISTA: Angew. Chem. Int. Ed., **55**, 8736-8739 (2016) CLAVE=A
- 369.-** AUTORES: M.Merced. Montero-Campillo, Al Mokhtar Lamsabhi, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *On the Photochemical Behavior of Beryllium Complexes With Subporphyrazines and Subphthalocyanines.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **120**, 4845-4852 (2016) DOI: 10.1021/acs.jpca.5b12374
- 370.-** AUTORES: Elena Kusevska, M.Merced. Montero-Campillo, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Boron-Boron One Electron Sigma Bonds vs. B-X-B bridge structures.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **22**, 13697-13704 (2016) CLAVE=A
- 371.-** AUTORES: Oriana Brea, Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, José Elguero.  
TITULO: *On the existence of intramolecular one-electron Be-Be bonds.*  
REF. REVISTA: Chem.Comm. **52**, 9656-9659 (2016), DOI: 10.1039/C6CC04350J CLAVE=A
- 372.-** AUTORES: S. Bruña, A. Garrido-Castro, J. Perles, M.M. Montero-Campillo, O. Mó, A.E. Kaifer and I. Cuadrado.  
TITULO: *Multi-Ferrocene-Containing Silanols as New Redox-Active Anion Receptors.*

REF. REVISTA: Organometallics (in press)

CLAVE=A

**373.- AUTORES: Oriana Brea, Ibon Alkorta, Inés Corral, Otilia Mó, Manuel Yáñez, José Elguero.**  
**TITULO: *Intramolecular beryllium bonds. Further insights into resonance assistance phenomena.***

**REF. REVISTA: Intermolecular Interactions in Crystals: Fundamentals of Crystal Engineering. Ed J. J. Novoa. (in press)**

**CLAVE=CL**

**374.- AUTORES: M.Merced. Montero-Campillo, Otilia Mó and Manuel Yáñez**

**TITULO: *Beryllium Subphthalocyanines Self-Assembling Properties.***

**REF. REVISTA: Can. J. Chem. (in press)**

**CLAVE=A**

**375.- AUTORES: Oriana Brea, Ines Corral, Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, José Elguero.**

**TITULO: *Beryllium-based Anion sponges close relatives of proton sponges.***

**REF. REVISTA: Chem. Eur. J. (in press) DOI: 10.1002/chem.201604325**

**CLAVE=A**

**ESTANCIAS EN CENTROS EXTRANJEROS**  
**(superiores a cuatro semanas)**

---

CENTRO: Carnegie- Mellon University

LOCALIDAD: Pittsburgh      PAIS: EEUU      AÑO: 1974-76      DURACION: 2 años

TEMA: Estancia postdoctoral con el Prof. Pople

---

CENTRO: Sydney University

LOCALIDAD: Sydney      PAIS: Australia      AÑO: 2003      DURACION: 3 meses

TEMA: Visiting Professor en el grupo del Profesor Leo Radom

---

CENTRO: Université d'Evry val d'Essonne

LOCALIDAD: Evry      PAIS: Francia      AÑO: 2004      DURACION: 1 mes

TEMA: Visiting Professor en el grupo de la Profesora Jeanine Tortajada

---

CENTRO: Université d'Evry val d'Essonne

LOCALIDAD: Evry      PAIS: Francia      AÑO: 2012      DURACION: 3 meses

TEMA: Sabatico en el grupo de la Profesora Jeanine Tortajada

---

CENTRO: Dalhousie University

LOCALIDAD: Dalhousie      PAIS: Canada      AÑO: 2012      DURACION: 3 meses

TEMA: Visiting Professor en el grupo del Profesor Russell Boyd

---

## CONGRESOS

- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicacion Invitada  
CONGRESO: Euchem Conference on Ion Chemistry. Gaseous vs. Solvated Ions  
LUGAR DE CELEBRACION: Lido di Ostia AÑO: 1982
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicacion Invitada  
CONGRESO: Symposium on the Chemistry of Heterocyclic Compounds (VIIIth) and of Nucleic Acid Components  
LUGAR DE CELEBRACION: Praga (Checoslovaquia) AÑO: 1984
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Miembro del Comité Organizador  
CONGRESO: First Europhysics Summer School on Chemical Physics  
LUGAR DE CELEBRACION: Santander (España) AÑO: 1986
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 12<sup>eme</sup> Colloque sur la Physique des Collisions Atomiques et Electroniques.  
LUGAR DE CELEBRACION: Caen (Francia) AÑO: 1988
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Miembro del Comité Organizador  
CONGRESO: Third Europhysics Summer School on Chemical Physics  
LUGAR DE CELEBRACION: Santander (España) AÑO: 1988
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada.  
CONGRESO: Second Euchem Conference on the Gas Phase Ion Chemistry. Structure and Stereochemistry.  
LUGAR DE CELEBRACION: Frascati-Roma (Italia) AÑO: 1989
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Forty Years of Quantum Chemistry. An International Conference in Honor of Prof. J.A. Pople.  
LUGAR DE CELEBRACION: Athens, Georgia (U.S.A.) AÑO: 1989
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: XIX Congreso Internazionale dei Chimici Teorici dei Paesi di Espressione Latina.  
LUGAR DE CELEBRACION: Roma (Italia) AÑO: 1990
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de la Sesión de Clausura.  
CONGRESO: I South European Conference of the Atomic and Molecular Physics.  
LUGAR DE CELEBRACION: Gandia (España) AÑO: 1992
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: XX Congreso de Químicos Teóricos de los Países de expresión Latina.  
LUGAR DE CELEBRACION: Mérida (Venezuela) AÑO: 1992
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: The Third World Congress of Theoretical Organic Chemists (WATOC'93)  
LUGAR DE CELEBRACION: Toyohashi (Japón) AÑO: 1993
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 8th International Congress of Quantum Chemistry  
LUGAR DE CELEBRACION: Praga (Republica Checa, junio de 1994) AÑO: 1994
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada

CONGRESO: The 5th European Symposium on Organic Reactivity. ESOR-V  
LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Compostela (España) AÑO: 1995

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Recent Theoretical and Experimental Advances in Hydrogen-Bonded Clusters  
LUGAR DE CELEBRACION: Elounda Creta junio de 1994) AÑO:1997

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Hydrogen Transfer: Experiment and Theory  
LUGAR DE CELEBRACION: Berlin (Alemania) AÑO: 1997

---

TIPO DE PARTICIPACION: Secretary of the Organizing Committee  
CONGRESO: Workshop on Computational Chemistry  
LUGAR DE CELEBRACION: Miraflores de la Sierra, Madrid (España) AÑO: 1998

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: XXIV QUITEL  
LUGAR DE CELEBRACION: Puebla de los Angeles (Mexico) AÑO: 1998

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: International Symposium on Gas-Phase Ion Chemistry and Physics  
LUGAR DE CELEBRACION: Rome (Italy) AÑO: 1998

---

TIPO DE PARTICIPACION: Profesora Invitada  
CONGRESO: International Conference in Honor John A. Pople.  
LUGAR DE CELEBRACION: Amelia Island Florida (USA) AÑO: 1999

---

TIPO DE PARTICIPACION: Secretary of the Organizing Committee  
CONGRESO: International Symposium on Physical Organic Chemistry  
LUGAR DE CELEBRACION: Miraflores de la Sierra, Madrid (España) AÑO: 1999

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 5<sup>th</sup> World Congress of Theoretically Oriented Chemists.  
LUGAR DE CELEBRACION: Londres (Reino Unido) AÑO: 1999

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: X<sup>th</sup> International Congress of Quantum Chemistry.  
LUGAR DE CELEBRACION: Menton (Francia) AÑO: 2000

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 15<sup>th</sup> International Mass Spectrometry Conference.  
LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (España) AÑO: 2000

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Third European Conference on Computational Chemistry EUCCO-CC3.  
LUGAR DE CELEBRACION: Budapest (Hungria) AÑO: 2000

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: International Conference on: Electronic Structure: Prediction and Applications.  
LUGAR DE CELEBRACION: San Sebastián (España) AÑO: 2000

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 8<sup>th</sup> European Symposium on Organic Reactivity.  
LUGAR DE CELEBRACION: Cavtat (Dubrovnik) (Croatia) AÑO: 2001

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Electronic Structure and Chemical Reactivity.  
LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (España) AÑO: 2001

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 4<sup>th</sup> European Conference on Computational Chemistry.  
LUGAR DE CELEBRACION: Assisi (Italia) AÑO: 2002

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Electronic Structure Principles and Applications (ESPA2002).  
LUGAR DE CELEBRACION: Sevilla (España) AÑO: 2002

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: HALCHEM Internacional Meeting  
LUGAR DE CELEBRACION: Cerdeña (Italia) AÑO: 2002

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Gordon Research Conference: Gaseous Ions: Structures, Energetics & Reactions  
LUGAR DE CELEBRACION: Ventura, California (USA) AÑO: 2003

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitadas  
CONGRESO: Modelling Chemical Reactivity: from gas phase to solution and enzymes.  
LUGAR DE CELEBRACION: Nancy (Francia) AÑO: 2003

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: XIth Internacional Congreso of Quantum Chemistry 2003  
LUGAR DE CELEBRACION: Bonn (Alemania) AÑO: 2003

---

TIPO DE PARTICIPACION: Miembro del Comité Científico  
CONGRESO: 29th Congres Internacional des Chimistes Theoriciens d'Expression Latine  
LUGAR DE CELEBRACION: Marrakech (Marruecos) AÑO: 2003

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairperson de Sesión  
CONGRESO: 5th European Conference on Computacional Chemistry (EUCOCC5)  
LUGAR DE CELEBRACION: La Londe les Maures (Francia) AÑO: 2004

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Molecular Quantum Mechanics: The No Nonsense Path to Progress  
LUGAR DE CELEBRACION: Cambridge (Inglaterra) AÑO: 2004

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: XXX Congreso Internacional de Quimicos Teóricos de Expresión Latina  
LUGAR DE CELEBRACION: Oporto (Portugal) AÑO: 2004

---

TIPO DE PARTICIPACION: Plenary Lecture  
CONGRESO: Electronic Structure, Principles and Applications (ESPA2004)  
LUGAR DE CELEBRACION: Valladolid (España) AÑO: 2004



---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 7th Congreso of the World Association of Theoretical Oriented Chemists (WATOC 2005)  
LUGAR DE CELEBRACION: Ciudad del Cabo (Sudáfrica) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Symposium in Honor of J.A. Pople. 229<sup>th</sup> ACS National Meeting  
LUGAR DE CELEBRACION: San Diego, CA (USA) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 10th European Symposium on Organic Reactivity  
LUGAR DE CELEBRACION: Roma (Italia) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: International Chemical Congress of Pacific basin Societies (Pacifichem2005)  
LUGAR DE CELEBRACION: Honolulu (USA) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 89th Canadian Chemistry Conference  
LUGAR DE CELEBRACION: Halifax (Canada) AÑO: 2006

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Electronic Structure, Principles and Applications (ESPA2006)  
LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Compostela (España) AÑO: 2006

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación invitada  
CONGRESO: 6th European Conference on Computacional Chemistry (EUCCOC6)  
LUGAR DE CELEBRACION: Tale (Eslovaquia) AÑO: 2006

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación invitada  
CONGRESO: 9th European Conference on Atoms Molecules & Photons (ECAMP IX)  
LUGAR DE CELEBRACION: Hersonissos, Creta (Grecia) AÑO: 2007

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación invitada  
CONGRESO: Molecular Quantum Mechanics: Analytic Gradients and Beyond  
LUGAR DE CELEBRACION: Budapest (Hungria) AÑO: 2007

---

TIPO DE PARTICIPACION: Presidenta de Sesión  
CONGRESO: 3rd Symposium on Theoretical Biophysics (TheoBio-07)  
LUGAR DE CELEBRACION: Cetraro, Calabria (Italia) AÑO: 2007

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia invitada  
CONGRESO: XXXI Reunión Bienal de la RSEQ  
LUGAR DE CELEBRACION: Toledo (España) AÑO: 2007

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación invitada  
CONGRESO: Isolated Biomolecules and Biomolecular Interactions (IBBI08)  
LUGAR DE CELEBRACION: Valladolid (España) AÑO: 2008

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación invitada  
CONGRESO: XXV QUITEL

LUGAR DE CELEBRACION: S. Andrés (Colombia)

AÑO: 2009

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada

CONGRESO: Molecular Quantum Mechanics 2010. In honor of H.F. Schaefer

LUGAR DE CELEBRACION: Berkeley, California (EEUU)

AÑO: 2010

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesion

CONGRESO: ESPA-2010. Electronic Structure Principles and Applications.

LUGAR DE CELEBRACION: Oviedo (Spain)

AÑO: 2010

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesion

CONGRESO: ECAMP 2010. European Conference in Atoms, Molecules and Photons.

LUGAR DE CELEBRACION: Salamanca (Spain)

AÑO: 2010

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada

CONGRESO: Canadian Society of Chemistry (CSC 2011) Conference

LUGAR DE CELEBRACION: Montreal (Canada)

AÑO: 2011

---

TIPO DE PARTICIPACION: Co-presidente del Comité Organizador

CONGRESO: World Association of Theoretical and Computational Chemists. (WATOC-2011)

LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Compostela (Spain)

AÑO: 2011

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada.

CONGRESO: Modeling Interactions in Biomolecules V.

LUGAR DE CELEBRACION: Kutná Hora (Republica Checa)

AÑO: 2011

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada.

CONGRESO: 4th Annual Meeting of the COST action CUSPEL.

LUGAR DE CELEBRACION: Cluj-Napoca (Rumania)

AÑO: 2012

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicacion Invitada

CONGRESO: Canadian Society of Chemistry (CSC 2012) Conference

LUGAR DE CELEBRACION: Calgary (Canada)

AÑO: 2012

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada

CONGRESO: ESPA-2012. Electronic Structure Principles and Applications.

LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (Spain)

AÑO: 2012

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairperson of session

CONGRESO: Quantum Chemistry in the Solid State: Magnetic Coupling and Excited States. Symposium in honor of Ria Broer.

LUGAR DE CELEBRACION: Groningen (The Netherlands)

AÑO: 2012

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada

CONGRESO: Modeling and Design of Molecular Materials 2012.

LUGAR DE CELEBRACION: Wroclaw (Poland)

AÑO: 2012

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada

CONGRESO: Theoretical Chemistry in Spain told by women. .

LUGAR DE CELEBRACION: Tarragona (Spain)

AÑO: 2013

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada

CONGRESO: 7th Molecular Quantum Mechanics.

LUGAR DE CELEBRACION: Lugano (Suiza)

AÑO: 2013

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairperson of session

CONGRESO: XXIX-QUITEL-2013.

LUGAR DE CELEBRACION: Granada (España)

AÑO: 2013

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada

CONGRESO: XVIII Workshop in "Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology

LUGAR DE CELEBRACION: Paraty, Rio de Janeiro (Brasil)

AÑO: 2013

---

TIPO DE PARTICIPACION: Cairperson of session CONGRESO: 9º ESPA- Electronic Structure Principles and Applications LUGAR DE CELEBRACION: Badajoz (Spain)	AÑO: 2014
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: 97th Canadian Chemistry Conference 2014 LUGAR DE CELEBRACION: Vancouver (Canada)	AÑO: 2014
TIPO DE PARTICIPACION: Chairwoman de Sesión CONGRESO: Xth WATOC LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Chile (Chile)	AÑO: 2014
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: 15 <sup>th</sup> Int. Congress of Quantum Chemistry (ICQC) LUGAR DE CELEBRACION: Pekin (China)	AÑO: 2015
TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada CONGRESO: The Chemical Bonds at the 21 <sup>th</sup> Century LUGAR DE CELEBRACION: Xiamen (China)	AÑO: 2015
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: ICPEAC 2015 LUGAR DE CELEBRACION: Toledo (Spain)	AÑO: 2015
TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada CONGRESO: PACIFICHEM 2015 (The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015) LUGAR DE CELEBRACION: Honolulu, Hawai (EEUU)	AÑO: 2015
TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada CONGRESO: 26th Austin Symposium on Molecular Structure and Dynamics LUGAR DE CELEBRACION: Dallas, Texas (EEUU)	AÑO: 2016
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: ESPA 2016 LUGAR DE CELEBRACION: Castellón (Spain)	AÑO: 2016
TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Plenaria Invitada CONGRESO: European Symposium in Chemical Bond (ESCB1) LUGAR DE CELEBRACION: Rouen (Francia)	AÑO: 2016

## TESIS DOCTORALES DIRIGIDAS

---

TITULO: Caracterización de Enlaces de Hidrógeno Inter e Intramoleculares. Estudio Teórico de Casos Significativos  
DOCTORANDA: Leticia González Herrero  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
AÑO: 1998

FACULTAD: Ciencias  
CALIFICACION: Apto cum Laude por Unanimidad

---

TITULO: Química en Fase Gas de los Cationes Halógeno: Estudio Teórico de las Reacciones  $F^+(^3P, ^1D)$  y  $Cl^+(^3P, ^1D)$  con  $H_2O$  y con  $H_2S$ .  
DOCTORANDA: Mercedes Manuel García  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
AÑO: 1998

FACULTAD: Ciencias  
CALIFICACION: Apto cum Laude por Unanimidad

---

TITULO: Contribution a l'étude theorique par les méthodes ab initio des mecanismes reactionnels de processus interstellaires.  
DOCTORANDO: Fatima Ijjaali  
UNIVERSIDAD: Cadi Ayyad  
AÑO: 2002

FACULTAD: Sciences  
CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude por Unanimidad

---

TITULO: Una Aproximación Teórica a la Química de los Calcógenos  
DOCTORANDO: Pablo Sanz Mercado  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
AÑO: 2003

FACULTAD: Ciencias  
CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude por Unanimidad

---

## TESIS DOCTORALES DE LAS QUE HA SIDO TUTORA

---

TITULO: Estudio de reacciones de transferencia protonica por resonancia ciclotronica de iones con transformada de Fourier  
DOCTORANDA: Marta Herreros Portolés  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
AÑO: 1996

FACULTAD: Ciencias  
CALIFICACION: Apto cum Laude por Unanimidad

---

TITULO: Estructura Molecular de Pirazoles-NH monocíclicos: Métodos mecanocuánticos y cristalográficos. Modos de empaquetamiento cristalino.  
DOCTORANDA: Lourdes Infantes San Mateo  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
AÑO: 2000

FACULTAD: Ciencias  
CALIFICACION: Apto cum Laude por Unanimidad

---

TITULO: Espectroscopia Raman de Rotación-vibración de algunas moléculas de interés:  $H_2O$ ,  $D_2O$ ,  $HDO$ ,  $(CO_2)_2$  y  $(N_2)_2$ .  
DOCTORANDA: Gustavo Avila Blanco  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
AÑO: 2004

FACULTAD: Ciencias  
CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude

---

TITULO: Estudio por RCI con TF (FT-ICR) de relaciones entre la estructura, reactividad y estabilidad termodinámica de especies iónicas y neutras en fase gaseosa.

DOCTORANDA: Esther Quintanilla Luján

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 2005

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude

---

TITULO: Estudio teórico de sistemas de relevancia atmosférica: espectroscopia IR de cristales de ácido nítrico y sus hidratos.

DOCTORANDA: Delia Fernandez Torre

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 2005

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude y mencion europea

---

TITULO: Estudio teórico del Proceso de Protonación de la Piridina en Clusters de Moléculas de Agua.

DOCTORANDA: M<sup>a</sup> del Carmen Sicilia Aparicio

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 2005

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude

---

TITULO: Modelización del proceso de interacción de los analgésicos nicotínicos frente al subtipo  $\alpha 4\beta 2$  del receptor nAChR.

DOCTORANDA: M<sup>a</sup> Magdalena Mora Salazar

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 2008

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude

---

TITULO: Estudio ab initio espectroscópico de cadenas de Carbono: C4, C5 y C6.

DOCTORANDA: Helena Massó González

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 2008

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude y mencion europea

---

TITULO: Una Aproximación Metaheurística para la Construcción Óptima de Hamiltonianos Rovibracionales Anarmónicos.

DOCTORANDA: María Eugenia Castro Sánchez

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 2010

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude

---

## GRANDES EQUIPOS QUE UTILIZA O HA UTILIZADO

EQUIPO: Univac 1108

FECHA: 1971-76 CLAVE: UA

EQUIPO: IBM 4341, 4381, 3090 VM/CMS

FECHA: desde 1976 CLAVE: UA

EQUIPO: DEC VAX 11/750, 11/780 VMS

FECHA: desde 1982 CLAVE: UA

EQUIPO: IBM RISC 6000

FECHA: desde 1990 CLAVE: UA

---

## OTROS MERITOS O ACLARACIONES QUE DESEA HACER CONSTAR

---

1. Premio Extraordinario de Licenciatura en Ciencias Químicas.

Universidad de Santiago de Compostela.

Julio de 1970.

2. Premio Extraordinario de Doctorado.

Universidad Autónoma de Madrid.

Enero de 1975.

### 3) Asociaciones a las que pertenece:

- Miembro de la Sociedad Europea de Física desde Enero de 1987.
- Miembro de la Real Sociedad Española de Física desde Enero de 1988.
- Miembro del Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular desde su fundación.
- Miembro de la Real Sociedad Española de Química desde 2000

### 4) Revistas de las que es referee:

- Journal of Molecular Structure (THEOCHEM).
- Journal of the American Chemical Society.
- Journal of Physical Chemistry B
- Journal of Physical Chemistry A
- New J. of Chem
- Journal of Physics B.
- Chemical Physics Research.
- Chemical Physics Letters.
- ChemPhysChem
- European Journal of Organic Chemistry.
- Journal of Physical Organic Chemistry

### 5) Puestos Académicos Desempeñados:

- Secretaria del Instituto Universitario de Estudios de la Mujer de la Universidad Autónoma de Madrid (I.U.E.M.) desde Enero de 1990 a Mayo de 1991.
- Directora del Instituto Universitario de Estudios de la Mujer de la Universidad Autónoma de Madrid (I.U.E.M.) 1991-95
- Vicedecana de Estudiantes. Facultad de Ciencias UAM. desde 1996.
- Responsable del Programa de Doctorado "Química Teórica y Computacional" con mención de calidad MCD2003-00675. Cursos 2000 hasta 2006.
- Responsable del Master Europeo "European Master on Theoretical Chemistry and Computational Modelling" desde el curso 2006-2007. Con Eurolabel de la ECTNA (Certificate number :EM0701 de 14/10/2007). En estos momentos este es un master ERASMUS MUNDUS 2009-2013 coordinado por el Prof. Manuel Yáñez del Departamento de Química UAM.
- Presidenta de la Sección de Madrid de la Real Sociedad Española de Química desde mayo del 2002-2008
- Directora del Departamento de Química de la UAM desde abril de 2004 hasta abril de 2008. Reelegida Desde el 1 de agosto de 2014-
- Directora General de Programas y Transferencia de Conocimiento de la Secretaría de Estado de Universidades del Ministerio de Ciencia e Innovación desde el 1 de mayo de 2008 al 25 de abril de 2009.
- Coordinadora Científica del Programa Consolider-Ingenio 2010.

### 6) Evaluaciones de Investigación y Docencia

- 7 tramos de Investigación evaluados positivamente (periodo 1970-2012)
- 8 tramos de Docencia evaluados positivamente (periodo 1970-2011)



### **7) Comités Científicos de los que forma parte**

- Comisión de Evaluación de las Universidades Gallegas
- Comisión de Evaluación del Profesorado Universitario de la ANECA
- Miembro de la Comisión Técnica de Evaluación del Programa Campus de Excelencia Internacional, así como del programa Innocampus.
- Presidenta del Comité de evaluación del Programa Consolider.
- Miembro del Label Committee de la ECTNA (European Chemistry Thematic Network Association).
- Vicepresidenta de la Asociación ECTNA
- Comisión de Evaluación de la Academia Finlandesa en Ciencias.

<b>Parte A. DATOS PERSONALES</b>		<b>Fecha del CVA</b>	15-11-2016
Nombre y apellidos	Miguel Paniagua Caparrós		
DNI/NIE/pasaporte		Edad	
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	A-1751-2008	
	Código Orcid	0000-0003-2573-6826	

**A.1. Situación profesional actual**

Organismo	Universidad Autónoma de Madrid		
Dpto./Centro	Departamento de Química Física Aplicada		
Dirección	Ciudad Universitaria de Cantoblanco, Madrid 28049.		
Teléfono	914974449	correo electrónico	miguel.paniagua@uam.es
Categoría profesional	Catedrático de universidad	Fecha inicio	12/01/2010
Espec. cód. UNESCO	2307, 2210 (221003, 221091), 2206 (220605, 220607, 220608)		
Palabras clave	Química Física, Superficies de Energía Potencial, ajuste de superficies "ab initio", Nubes estratosféricas polares.		

**A.2. Formación académica (título, institución, fecha)**

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciado con grado en Ciencias Químicas	Universidad Autónoma de Madrid	1979
Doctor en Ciencias Químicas (Sobresaliente <i>Cum Laude</i> )	Universidad Autónoma de Madrid	1983

**A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica (véanse instrucciones)**

-No. de sexenios de investigación: 6

-No. de tesis doctorales dirigidas en los últimos 10 años: 2

Total de Pub. Q1: 32 - Total de Pub. Q1: 30 (ISI) - Total de Pub. Q1: 27 (Scimago)  
 Total de Pub. Q1 (últimos 10 años): 8 - Total de Pub. Q1 (últimos 10 años): 7 (ISI) -  
 Total de Pub. Q1 (últimos 10 años): 8 (Scimago)

**Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM (máximo 3500 caracteres, incluyendo espacios en blanco)**

M. Paniagua ha dedicado la mayor parte de su actividad investigadora al **estudio teórico de Superficies de Energía Potencial para la realización de estudios dinámicos de reacciones relevantes en química atmosférica y procesos de combustión**. En total ha publicado 103 artículos de investigación, libros y capítulos de libros.

En este ámbito, se han estudiado superficies de energía potencial para los siguientes **tipos de reacciones en fase gas**: (a) reacciones de interés atmosférico; (b) reacciones de interés en combustión; (c) reacciones ión-molécula; (d) otras reacciones de interés; (e) procesos electrónicamente no adiabáticos. En estos trabajos no se ha pretendido únicamente profundizar de forma detallada en el cómo y por qué de las reacciones químicas, sino que también se ha procurado seleccionar reacciones relevantes, de manera que la información dinámica y cinética obtenida sea susceptible de ayudar a **mejorar los modelos de comportamiento químico** que se emplean en **química de la atmósfera**, procesos de **combustión**, etc.

Por otro lado, también hemos realizados estudios DFT para sistemas más grandes de interés atmosférico como es el caso de los agregados de ácidos en nubes estratosféricas polares.

## Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (ordenados por tipología)

### C.1. Publicaciones

- Artículo: Verdes, M.(1); Paniagua, M.(2); Facet shapes and thermo-stabilities of H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>·HNO<sub>3</sub> hydrates involved in polar stratospheric clouds. JOURNAL OF MOLECULAR MODELING. ISSN/ISBN: 09485023. 2015, vol.: 21 nº 9. (238) pg 9. DOI 10.1007/s00894-015-2782-2.
- Artículo: Verdes, M.(1); Paniagua, M.(2); Relative stabilities of HCl·H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>·HNO<sub>3</sub> aggregates in polar stratospheric clouds JOURNAL OF MOLECULAR MODELING. ISSN/ISBN: 09485023. 2015, vol.: 21 nº: 4. (78) pg 22. DOI:10.1007/s00894-015-2611-7.
- Artículo: Paniagua, M.(1); Martínez, R.(2); Gamallo, P.(3); González, M.(4);. Potential energy surfaces and quasiclassical trajectory study of the O + H<sub>2</sub> -> OH+ + H, OH + H+ proton and hydrogen atom transfer reactions and isotopic variants (D<sub>2</sub><sup>+</sup>, HD<sup>+</sup>) PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. ISSN/ISBN: 14639076. 2014, vol.: 16 nº: 43. pg: 23594 -23603. DOI:10.1039/c4cp02631d. .
- Artículo: Verdes, M.(1); Paniagua, M.(2); . Quantum chemical study of atmospheric aggregates: HCl·HNO<sub>3</sub>·H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> JOURNAL OF MOLECULAR MODELING. ISSN/ISBN: 09485023. 2014, vol.: 20 nº: 6. (2232) pg: 19. DOI:10.1007/s00894-014-2232-6. .
- Artículo: Vilà, A.(1); González, M.(2); Mayol, R.(3); Paniagua, M.(4);. Theoretical approach to the structure, energy and electronic spectroscopy of O@(4He)<sub>N</sub> doped nanodroplets RSC ADVANCES. ISSN/ISBN: 20462069. 2014, vol.: 4 nº: 85. pg: 44972 -44979. DOI:10.1039/c4ra09023c.
- Artículo: Sanz-Sanz, C.(1); Roncero, O.(2); Paniagua, M.(3); Aguado, A.(4);. Full dimensional potential energy surface for the ground state of H-4(+) system based on triatomic-in-molecules formalism JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. ISSN/ISBN: 00219606. 2013, vol.: 138 nº: 18. pg: -. DOI:10.1063/1.4827640. Physics, Atomic, Molecular & Chemical: IF 3.122 | Rank 8/33 | 193241 | Q1 (WoS (ISI JCR)); ; .
- Artículo: Velilla, L.(1); Paniagua, M.(2); Aguado, A.(3); . Basis Set Convergence of Potential Energy Surfaces: Ground Electronic State of H-2 and H-3(+) INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. ISSN/ISBN: 00207608. 2011, vol.: 111 nº: 2. pg: 387 -399. DOI:10.1002/qua.22588. Chemistry, Physical: IF 1.357 | Rank 91/134 | 7311 | Q3 (WoS (ISI JCR)); , Mathematics, Interdisciplinary Applications: IF 1.357 | Rank 24/92 | 7311 | Q1 (WoS (ISI JCR)); , Physics, Atomic, Molecular & Chemical: IF 1.357 | Rank 23/32 | 7311 | Q3 (WoS (ISI JCR)); ; .
- Artículo: Zanchet, A.(1); Roncero, O.(2); Omar, S.(3); Paniagua, M.(4); Aguado, A.(5); . Potential energy surface and reactive collisions for the Au+H-2 system JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. ISSN/ISBN: 00219606. 2010, vol.: 132 nº: 3. pg: 0 -0. DOI:10.1063/1.3290950. Physics, Atomic, Molecular & Chemical: IF 2.921 | Rank 7/33 | 168550 | Q1 (WoS (ISI JCR)); ; .
- Artículo: Zanchet, A.(1); Dorta-Urra, A.(2); Roncero, O.(3); Flores, F.(4); Tablero, C.(5); Paniagua, M.(6); Aguado, A.(7); . Mechanism of molecular hydrogen dissociation on gold chains and clusters as model prototypes of nanostructures PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. ISSN/ISBN: 14639076. 2009, vol.: 11 nº: 43. pg: 10122 -10131. DOI:10.1039/b910200k. chemistry physical: IF 4.116 | Rank 21/121 | 20798 | Q1 (WoS (ISI JCR)); , Physics, Atomic, Molecular & Chemical: IF 4.116 | Rank 3/33 | 20798 | Q1 (WoS (ISI JCR)); ; .
- Artículo: Velilla, L.(1); Lepetit, B.(2); Aguado, A.(3); Beswick, J.A.(4); Paniagua, M.(5); . The H(3)(+) rovibrational spectrum revisited with a global electronic potential energy surface

JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. ISSN/ISBN: 00219606. 2008, vol.: 129 nº: 8. pg: 0 -0. DOI:10.1063/1.2973629. Physics, Atomic, Molecular & Chemical: IF 3.149 | Rank 5/31 | 164492 | Q1 (WoS (ISI JCR)); ; .

- Artículo: Roncero, O.(1); de Lara-Castells, P.(2); Villarreal, P.(3); Flores, F.(4); Ortega, J.(5); Paniagua, M.(6); Aguado, A.(7); . An inversion technique for the calculation of embedding potentials JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. ISSN/ISBN: 00219606. 2008, vol.: 129 nº: 18. pg: 0 -0. DOI:10.1063/1.3007987. Physics, Atomic, Molecular & Chemical: IF 3.149 | Rank 5/31 | 164492 | Q1 (WoS (ISI JCR)); ; .

- Artículo: Gómez-Carrasco, S.(1); Aguado, A.(2); Paniagua, M.(3); Roncero, O.(4); . Transition state spectroscopy of open shell systems: Angle-resolved photodetachment spectra for the adiabatic singlet states of OHF JOURNAL OF PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY A: CHEMISTRY. ISSN/ISBN: 10106030. 2007, vol.: 190 nº: 0. pg: 145 - 160. DOI:10.1016/j.jphotochem.2007.01.027. Chemistry, Physical: IF 1.911 | Rank 51/111 | 8267 | Q2 (WoS (ISI JCR)); ; .

- Artículo: Gómez-Carrasco, S.(1); Aguado, A.(2); Paniagua, M.(3); Roncero, O.(4); . Coupled diabatic potential energy surfaces for studying the nonadiabatic dynamics at conical intersections in angular resolved photodetachment simulations of OHF--> OHF+e(-) JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. ISSN/ISBN: 00219606. 2006, vol.: 125 nº: 16. pg: 0 - 0. DOI:10.1063/1.2363988. PHYSICS, ATOMIC, MOLECULARCHEMICAL: IF 3.166 | Rank 3/31 | 157334 | Q1 (WoS (ISI JCR)); ; .

## C.2. Proyectos

1. Proyecto (Programa: Comunidad Autónoma de Madrid. Desarrollado en: UAM. FACULTAD DE CIENCIAS. FÍSICA TEÓRICA DE LA MATERÍA CONDENSADA. Ref: ). Nanoobjetos Desde átomos hasta virus. Equipo: ABAD GONZALEZ, ENRIQUE (Participante); , AGUADO GOMEZ, ALFREDO (Investigador, Becario colaborador); , BARBARA PIECZYRAK (Investigador, Becario colaborador); , FLORES SINTAS, FERNANDO (Investigador, Becario colaborador); , GONZALEZ TRABADA, DANIEL (Participante); , LARA GARRIDO, MANUEL (Participante); , LORENTE PALACIOS, NICOLAS (Participante); , MARTINEZ RUIZ, JOSE IGNACIO (Investigador, Becario colaborador); , ORTEGA MATEO, JOSE (Investigador principal); , PANIAGUA CAPARROS, MIGUEL (Investigador principal); , VELILLA DE ANDRES, LUIS ALEJANDRO (Investigador, Becario colaborador); . Duración: 01-01-2010 - 12-31-2013. Financiación: 38424.00

2. Proyecto (Programa: Ministerio de Educación y Ciencia. Desarrollado en: UAM. FACULTAD DE CIENCIAS. QUÍMICA FÍSICA APLICADA. Ref: CTQ2007-63332). Estructura electrónica molécula. Equipo: AGUADO GOMEZ, ALFREDO (Investigador, Becario colaborador); , EMA LOPEZ, IGNACIO DE (Investigador, Becario colaborador); , FERNANDEZ RICO, JAIME (Investigador, Becario colaborador); , FERRO FERNANDEZ, VICTOR ROBERTO (Investigador, Becario colaborador); , GARCIA DE LA VEGA, JOSE MANUEL (Investigador principal); , GONZALEZ-JONTE CRUZ, RAUL HERMIN (Investigador, Becario colaborador); , LOPEZ FERNANDEZ, RAFAEL (Investigador, Becario colaborador); , PANIAGUA CAPARROS, MIGUEL (Investigador, Becario colaborador); , RAMIREZ MORENO, GUILLERMO (Investigador, Becario colaborador); , VELILLA DE ANDRES, LUIS ALEJANDRO (Investigador, Becario colaborador); . Duración: 01-10-2007 - 09-30-2010. Financiación: 95590.00

3. Proyecto (Programa: Comunidad Autónoma de Madrid. Desarrollado en: UAM. FACULTAD DE CIENCIAS. QUÍMICA FÍSICA APLICADA. Ref: S-0505/MAT/0303). Propiedades mecánicas, eléctricas y catalíticas de nanoobjetos: síntesis, caracterización y modelización SIQC. Equipo: AGUADO GOMEZ, ALFREDO (Investigador, Becario colaborador); , PANIAGUA CAPARROS, MIGUEL (Investigador principal); , SANZ SANZ, CRISTINA (Investigador, Becario colaborador); , VELILLA DE ANDRES, LUIS ALEJANDRO

(Investigador, Becario colaborador); . Duración: 01-01-2006 - 12-31-2009. Financiación: 100048.00€

### **C.3. Contratos, méritos tecnológicos o de transferencia**

1. Contrato con empresa APRIM (Alta Precisión Industrial Mecánica) a través de la Fundación de la UAM (proyecto nº 084101). “Diseño y construcción de un equipo de centrifugación gaseosa aplicado a la separación de gases de combustión”. Duración: 01-10-2015 – 01-10-2017. Equipo: PANIAGUA CAPARRÓS, MIGUEL (Investigador principal); MARÍA CONCEPCIÓN MONTEMAYOR DURÁN (Investigadora); ARNAU VILÀ CASANOVAS (Investigador contratado). Proyecto concedido por CDTI. Financiación: 30250.00 € (IVA incl).

2. Contrato con empresa CiRTA EMISSIONS S.L. a través de la Fundación de la UAM (proyecto nº 084100). “Dinámica de colisiones no reactivas entre CO<sub>2</sub> y N<sub>2</sub>” Duración: 01-07-2011 – 01-07-2013. Equipo: PANIAGUA CAPARRÓS, MIGUEL (Investigador principal); AGUADO GÓMEZ, ALFREDO (Investigador); RONCERO VILLA, OCTAVIO (Investigador colaborador CSIC). Financiación: 32000.00 € +IVA.

### **C.4. Patentes** (no procede en este caso)

### **C.5, C.6, C.7...**

- 6 tesis doctorales dirigidas
- alrededor de 100 contribuciones en congresos de carácter internacional
- Referee en las revistas científicas J. Chem. Phys., J. Phys. Chem., Phys. Chem. Chem. Phys., Chem. Phys., y otras
- Evaluador de proyectos para diversas agencias de investigación españolas y extranjeras.

# **CURRICULUM VITAE**

**Luis M. Sesé Sánchez**

**Catedrático de Química Física**

Departamento de Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas

Facultad de Ciencias

Universidad Nacional de Educación a Distancia

Madrid

Noviembre, 2016

# 1. HISTORIAL

## 1.1 TITULOS ACADEMICOS

Clase	Universidad Y Centro	Organismo y fecha de expedición	Calificación
Licenciado	U. Complutense C.C. Químicas	30-03-1979	Sobresaliente
	Premio Extraordinario	16-03-1980	
Doctor	U. Complutense C.C. Químicas	17-10-1983	Sobresaliente "cum Laude"

## 1.2 PUESTO DOCENTE ACTUAL

Categoría	Universidad	Régimen de dedicación	Fecha de nombramiento	Fecha de terminación
Catedrático	Universidad UNED	Completa	5-01-2010	-----

## 1.3 TESINA DE LICENCIATURA Y TESIS DOCTORAL

### ***Tesina:***

*Estudio Teórico de la Banda de Tensión CO del Espectro Infrarrojo del Fluoroacetato de Etilo*; Director: Manuel Fernández Núñez; Fecha: 2 de Diciembre de 1978;  
Calificación: *Sobresaliente*. Facultad de CC Químicas, Universidad Complutense.

### ***Tesis Doctoral:***

*Teoría de la Influencia del Disolvente sobre los Espectros de Vibración Moleculares*;  
Director Manuel Fernández Núñez; Fecha: 17 de Junio de 1983; Calificación:  
*Sobresaliente Cum Laude*. Facultad de CC. Químicas, Universidad Complutense.

#### 1.4 ACTIVIDAD DOCENTE DESEMPEÑADA

-Prf.Asignatura **Métodos Teóricos de la Química Física –1ª parte-** (5 Curso

Licenciatura en Química, especialidad de Química Física):

UNED 1-10-90/30-09-2016

-Prf.Asignatura **Termodinámica Química Molecular** (5 Curso Licenciatura en

Química, especialidad de Química Física):

UNED 1-10-90/30-09-13

-Prf. Curso **Métodos Matemáticos en Química Teórica** (Tercer Cielo CC.Químicas, especialidad de Química Física + continuación en el Máster de Ciencia y Tecnología

Química – Coordinador-):

UNED 1-10-92/-----

-Prf. Curso **Termodinámica Estadística y de No Equilibrio** (Máster de Ciencia y

Tecnología Química – Coordinador-):

UNED 1-10-08/-----

-Prf. **Cálculo Numérico y Estadística Aplicada** (2º Grado en Química, -Coordinador-):

UNED 1-10-11/ -----

-Prf. **Termodinámica Química** (2º Grado en Química):

UNED 1-10-11/ -----

#### 1.5 TRAMOS DOCENTES Y DE INVESTIGACIÓN CONCEDIDOS

DOCENCIA: **6 tramos** (01.10.78 – 15.11.84 / 16.11.84 – 15.11.89 / 16.11.89 –

15.11.94 / 16.11.94 – 15.11.99 / 16.11.99 – 15.11.04 / 16.11.04 – 15.11.09)

INVESTIGACIÓN: **5 tramos** (1983 – 1988 / 1989 – 1994 / 1995 – 2000 / 2001 – 2006 / 2007 - 2012).



## 1.6 COMUNICACIONES EN CONGRESOS

1. E.Gálvez, M.Fernández, F.Sueiro y L.M.Sesé (1982)  
Mapas moleculares de compuestos de acción farmacológica, II Congreso Nacional de Química Terapéutica, Madrid 24-27 de Mayo de 1982.
2. L.Sesé y M.Fernández (1983)  
Estudio teórico a partir de métodos de simulación de la banda de tensión CO de la acetona en CS<sub>2</sub>, IX Reunión Nacional de Espectroscopía, Coimbra-Salamanca 3-7 de Octubre de 1983.
3. L.Sesé y M.Fernández (1984)  
Molecular properties of CS pure liquid through a FOPIM-like iterative procedure  
XV Congreso Internacional de Químicos teóricos de expresión Latina, Viana do Castelo, 3-6 de Septiembre de 1984.
4. P.Gómez y L.M.Sesé (1986)  
Calculation and analysis of solvent effects on the internal rotation potential of CH<sub>3</sub>-CO-CH<sub>3</sub>, Congreso Internacional: Molecules en Physique, Chemie et Biologie, París 15-21 de Junio de 1986.
5. J.Tortajada, M.Fernández y L.M.Sesé (1986)  
Effects of the environment on the UV spectrum of benzene molecule, Congreso Internacional: Molecules en Physique, Chemie et Biologie, París 15-21, de Junio de 1986.
6. L.M.Sesé y M.Fernández (1987)  
Integrales de solapamiento y memoria en procesos iterativos de perturbaciones estacionarias para estudiar líquidos puros, XVII Congreso internacional de Químicos teóricos de expresión latina. Peñíscola, España, 20-25 de Septiembre de 1987.

7. L. E. Bailey y L. M. Sesé (2006)

Some structural features in the fluid-solid transition of quantum hard-spheres.

2 Septiembre 2006, 8th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics

(IBER-2006), Aranjuez, España (29 Agosto – 4 Septiembre 2006).

### 1.7 DIRECCION DE TESIS DOCTORALES

- Ricardo Ledesma Rubio

"Estudio del sistema cuántico de esferas rígidas por simulación Monte Carlo con integración de caminos"

Fecha de lectura: 16 de Septiembre de 1997

Calificación: APTO CUM LAUDE (por unanimidad)

## **2. PROYECTOS DE INVESTIGACION FINANCIADOS**

-Colaborador de Investigación

"Aplicación de la metodología químico cuántica en espectroscopía infrarroja"

CAICYT n 4241/79.

Director: Jesús Morcillo Rubio (UCM).

-Colaborador de Investigación (32 horas)

"Dinámica de sistemas moleculares no rígidos. Aplicaciones a la Espectroscopía, Biología y Farmacología Molecular, CAYCIT PB 87-0259; 1988/1990.

Director: Y.G.Smeyers (CSIC).

-Colaborador de Investigación (16 horas)

"Simetría y propiedades dinámicas de moléculas no rígidas. Aplicaciones a la Espectroscopía de sistemas moleculares con dos y tres grados de libertad; CAYCIT.

PB 90-0167; 1991/1993.

Director: Y.G.Smeyers (CSIC).

-Colaborador de Investigación (16 horas)

"Hipersuperficies de energía potencial. Aplicación a sistemas moleculares de interés espectroscópico, químico-físico y biológico"; CAYCIT PB 90-0279; 1991 / 1993.

Director: A.Hernández-Laguna (CSIC).

- Ayudas a la Investigación del Vicerrectorado de Investigación de la UNED para la línea "Efectos cuánticos en sistemas de muchos cuerpos"

Convocatorias de Infraestructura de Investigación 1996 y 1997

Importe total concedido: 1.774.208 ptas.

Convocatoria de Infraestructura de Investigación 2000.

Importe concedido: 716.450 ptas.

- Investigador

“Efectos anarmónicos en las propiedades estructurales y dinámicas de sistemas cuánticos ”; CICYT / BFM2000-1318; Programa General de Promoción del Conocimiento (Física y Matemáticas); 2001 / 2003.

Investigador Responsable: Carlos Herrero Aisa (CSIC).

Importe Concedido: 4.547.200 Ptas.

- Investigador Responsable Grupo UNED.

“Modelización y Simulación de Sistemas no Homogéneos” (MOSSNOHO)

CAM – 2005 / S-0505/ESP/0299; 2006/2009 (Coordinador General: Guillermo Navascués, UAM).

Importes concedidos: Grupo UNED ..... 6.000 Euros (año 2006); 2.000 Euros (año 2007); 6.000 Euros (año 2008); 5.000 Euros (año 2009).

- Investigador Responsable Grupo UNED

“Modelización y Simulación de Sistemas Complejos” (MODELICO-P2009/ESP1691)

Coordinador General: Enrique Lomba García (CSIC, Instituto de Química Física Rocasolano).

Importe Total: 816.500 Euros.

### **3. PUBLICACIONES**

#### 3.1 ARTICULOS DE INVESTIGACION / REVISIONES (CAPITULOS) EN SERIES

1. L.M.Sesé, A.Bañón y M.Fernández (1983)  
Liquid phase effects on molecular properties, *J.Mol.Struct. (Theochem)*, **92**: 231-238
2. L.M.Sesé y M.Fernández (1983)  
Molecular Properties in liquid phase, *J.Mol.Struct. (Theochem)*, **93**: 261-264.
3. M.Fernández, L.Sesé y V.Botella (1983)  
Un nuevo potencial intermolecular para el estudio de líquidos puros y disoluciones, *Revista de la R.A.C.C. Ex.Fis.Nat. Madrid*, **57**: 643-646.
4. L.M.Sesé y M.Fernández (1984)  
Molecular properties of acetone in carbon disulphide solution (1:124), *J.Mol.Struct. (Theochem)*, **107**: 101-104.
5. L.M.Sesé y M.Fernández (1984)  
MC simulation on acetone-carbon disulphide (1:124) with a quantum mechanical intermolecular potential, *J.Mol.Liquids*, **28**: 73-85.
6. L.M.Sesé (1985)  
A molecular quantum mechanics approach to evaluate molecular properties in liquid phase using statistical mechanics, *J.Mol.Liquids*, **30**: 185-208.
7. L.M.Sesé (1985)  
Some remarks on symmetry in molecular liquids, *J.Mol.Liquids*, **30**: 209-214.

8. M.Fernández y L.Sesé (1986)  
Potencial intermolecular en estado líquido, Cuadernos de posgrado Química Teórica II, UNAM (México), **23**: 155-163.
9. P.Gómez, M.Fernández, L.Sesé y V.Botella (1986)  
Topological and symmetry features of internal rotation potential in molecules with two rotors, J.Mol.Struct, **142**: 315-318.
10. L.M.Sesé, V.Botella, P.C.Gómez y M.Fernández (1986)  
Liquid phase effects on benzene UV spectra, J.Mol.Struct, **142**: 327-330.
11. L.M.Sesé, P.C.Gómez y F.Sueiro (1986)  
An application of quantum chemical methodology to liquid phase studies: Monte Carlo simulation of nonrigid acetone dissolved in carbon disulphide, J.Mol.Liquids, **32**: 235-258.
12. L.M.Sesé, P.C.Gómez y V.Botella (1986)  
Nonrigid molecules in solution: Internal potential energy surface for acetone dissolved in carbon disulphide, J.Mol.Liquids, **32**: 259-278.
13. L.M.Sesé (1988)  
Molecular electronic states in liquid phase: Configuration Interaction states, J.Mol.Liquids, **37**: 45-57.
14. L.M.Sesé, M.Fernández y J.Morcillo (1988)  
Estudio químico cuántico del efecto del disolvente sobre las frecuencias fundamentales de vibración, An.Quím., **84**: 137-140.
15. L.M.Sesé y M.Fernández (1988)  
Overlap integrals and memory in stationary perturbation iterative processes for the study of pure liquids, J.Mol.Struct. (Theochem), **166**: 397-402.

- 16.** M.C.Duro, J.A. Martín-Pereda y L.M.Sesé (1988)  
Monte Carlo simulation on a system of hard cylinders at a very high packing fraction  
Phys. Rev. A, **37**: 284-286.
- 17.** L.M.Sesé (1988)  
Theoretical studies on liquid phase: molecular properties of pure liquids.  
Application to carbon tetrachloride; J.Mol.Liquids, **39**: 69-91.
- 18.** M.Fernández, J.Tortajada y L.M.Sesé (1988)  
A theoretical analysis of the ultraviolet spectrum (180-260 nm) of pure liquid  
benzene: Gas-liquid spectral shifts explained through a statistically perturbed  
CNDO/S framework, Z.Phys.D (Atoms, molecules and clusters), **9**: 243-251.
- 19.** L.M.Sesé (1990)  
Environmental effects on molecules immersed in liquids. Z.Phys.D (Atoms,  
molecules and clusters), **17**: 195-202.
- 20.** M.Fernández y L.M.Sesé (1991)  
Líquidos moleculares y simulación Monte Carlo, en Nuevas Tendencias en Química  
Teórica (CSIC, Madrid, Editor S.Fraga), Vol.3: pp.203-222; ISBN 84-00-07131-X
- 21.** L.M.Sesé (1991)  
Path-integral and effective potential Monte Carlo simulations of liquid nitrogen.  
Hard-sphere and Lennard-Jones potentials, Molec.Phys., **74**: 177-189.
- 22.** L.M.Sesé (1992)  
A quantum Monte Carlo study of liquid Lennard-Jones methane, path-integral  
and effective potentials, Molec.Phys., **76**: 1335-1346.
- 23.** L.M.Sesé (1992)  
Quantum topics in pure liquids at equilibrium, en Computational Chemistry:  
Structure, interactions and reactivity (Editor S.Fraga); Studies in physical and

theoretical chemistry, Vol. 77(B), Elsevier, pp.283-310; ISBN 0-444-88512-9.

**24.** L.M.Sesé (1993)

Feynman-Hibbs quantum effective potentials for Monte Carlo simulations of liquid neon. *Molec.Phys.*, **78**: 1167-1177.

**25.** L.M.Sesé (1994)

Study of the Feynman-Hibbs effective potential against the path-integral formalism for Monte Carlo simulations of quantum many-body Lennard-Jones systems, *Molec.Phys.*, **81**: 1297-1312.

**26.** L.M.Sesé and R.Ledesma (1995)

Path-integral Monte Carlo energy and structure of the hard-sphere system using efficient propagators, *J.Chem.Phys.*, **102**: 3776-3786.

**27.** L.M.Sesé (1995)

Feynman-Hibbs potentials and path-integrals for quantum Lennard-Jones systems: theory and Monte Carlo simulations, *Molec. Phys.*, **85**: 931-947.

**28.** L.M.Sesé (1996)

Determination of the quantum static structure factor of liquid neon within the Feynman-Hibbs picture, *Molec. Phys.* **89**: 1783-1802.

**29.** L.M.Sesé and R.Ledesma (1997)

Computation of the static structure factor of the path-integral quantum hard-sphere fluid, *J. Chem. Phys.*, **106**: 1134-1147.

**30.** L.M.Sesé (1997)

Quantum computation of the static structure factor of deuterium gas, *Chem.Phys.Letters*, **266**: 130-134.

**31.** L.M.Sesé (1997)

Quantum effects on the static structure factor of Lennard-Jones fluids,

- Molec.Phys. **92**: 693-703.
- 32.** L.M.Sesé (1998)  
Thermodynamic and structural properties of the path-integral quantum hard sphere fluid. J.Chem.Phys. **108**: 9086-9097.
- 33.** L.M.Sesé (1999)  
An application of the self-consistent variational effective potential against the path-integral to compute equilibrium properties of quantum simple fluids, Mol.Phys. **97**: 881-896.
- 34.** B.Serrano, J. Baselga, J.Bravo, F. Mikes, L. Sesé, I. Esteban and I.F. Piérola (2000)  
Chemical imaging of phase separated polymer blends by fluorescence microscopy, J. Fluorescence **10**: 135-139.
- 35.** L. M. Sesé (2001)  
Path-integral Monte Carlo study of the structural and mechanical properties of quantum fcc and bcc hard-sphere solids, J. Chem. Phys. **114**: 1732-1744
- 36.** L.M. Sesé (2001)  
On the calculation of the static structure factor of path-integral quantum simple fluids far from exchange, Mol. Phys. **99**: 585-606.
- 37.** L. E. Bailey y L. M. Sesé (2001)  
The asymptotic decay of pair correlations in the path-integral quantum hard-sphere fluid, J. Chem. Phys. **115**: 6557-6568.
- 38.** L. M. Sesé (2002)  
Structural and response functions at equilibrium in path-integral quantum simple fluids, Mol. Phys. **100**: 927-940.



- 39.** L. M. Sesé (2002)  
Properties of the path-integral quantum hard-sphere fluid in **k**-space.  
J. Chem. Phys. **116**: 8492-8503.
- 40.** L. M. Sesé (2003)  
The compressibility theorem for quantum simple fluids at equilibrium.  
Molec. Phys. **101**: 1455-1468.
- 41.** B. Serrano, J. Baselga, I. Esteban, L. Sesé e I. F. Piérola (2003)  
Morphology of phase separated blends of poly-(cyclohexylmethacrylate) with poly-(vinylacetate).  
J. Appl. Polymer Sci. **89**: 1284-1290.
- 42.** L. M. Sesé y L. E. Bailey (2003)  
A simulation study of the quantum hard-sphere Yukawa fluid.  
J. Chem. Phys. **119**, 10256-10267.
- 43.** L. M. Sesé (2004)  
Computation of the equation of state of the quantum hard-sphere fluid utilizing several path-integral strategies.  
J. Chem. Phys. **121**, 3702-3709.
- 44.** L. E. Bailey y L. M. Sesé (2004)  
The decay of pair correlations in quantum hard-sphere fluids  
J. Chem. Phys. **121**, 10076-10087.
- 45.** L. M. Sesé (2005)  
Triplet correlations in the quantum hard-sphere fluid  
J. Chem. Phys. **123**, 104507 – 1 / 12.
- 46.** L. M. Sesé (2007)  
Computational study of the melting-freezing transition in the quantum hard-sphere

- system for intermediate densities (I): Thermodynamic results  
J. Chem. Phys. **126**, 164508 – 1 / 13.
- 47.** L. M. Sesé y L. E . Bailey (2007)  
Computational study of the melting-freezing transition in the quantum hard-sphere system for intermediate densities (II): Structural features  
J. Chem. Phys. **126**, 164509 – 1 /11; Erratum **127**, 049901.
- 48.** L. M. Sesé (2008)  
Computational study of the structures of gaseous helium-3 at low temperature.  
J. Phys. Chem. B, **112**, 10241-10254.
- 49.** L. M. Sesé (2009)  
A study of the pair and triplet structures of the quantum hard-sphere Yukawa fluid  
J. Chem. Phys. **130**, 074504 - 1/13.
- 50.** C. McBride, C. Vega, E. G. Noya, R. Ramírez y L. M. Sesé (2009)  
Quantum contributions in the ice phases: the path to a new empirical model for water – TIP4PQ/2005  
J. Chem. Phys. **131**, 024506 - 1/13.
- 51.** E. G. Noya, C. Vega, L. M. Sesé y R. Ramírez (2009)  
Quantum effects on the maximum in density of water as described by the TIP4PQ/2005 model.  
J. Chem. Phys. **131**, 124518 – 1/5.
- 52.** C. Vega, M. M. Conde, C. McBride, J. L. F. Abascal, E. G. Noya, R. Ramírez y L. M. Sesé (2010)  
Heat capacity of water: A signature of nuclear quantum effects  
J. Chem. Phys. **132**, 046101 – 1/2
- 53.** M. M. Conde, C. Vega, C. McBride, E. G. Noya, R. Ramírez y L. M. Sesé (2010)

Can gas hydrate structures be described using classical simulations?

J. Chem. Phys. **132**, 114503 – 1/11

**54.** B. S. González, E. G. Noya, C. Vega y L. M. Sesé (2010)

Nuclear quantum effects in water clusters: The role of the molecular flexibility

J. Phys. Chem. B. **114**, 2484 – 2492

**55.** E. G. Noya, L. M. Sesé, R. Ramírez, M. M. Conde, C. Vega, C. McBride (2011)

Path-integral Monte Carlo simulations of rigid rotors and their application to water

Mol. Phys. **109**, 149-168, first Published on: 18. Nov. 2010

**56.** L. M. Sesé (2012)

On the accurate direct computation of isothermal compressibilities for normal

quantum simple fluids: Application to quantum hard spheres, J. Chem. Phys. **136**,

244504-1/15.

**57.** L. M. Sesé (2013)

Path integral Monte Carlo study of quantum hard-sphere solids, J. Chem. Phys.

**139**, 044502-1/13.

**58.** L. M. Sesé (2013)

Erratum: “Path integral Monte Carlo study of quantum hard-sphere solids, J. Chem.

Phys. **139**, 044502 (2013)”, **139**, 189901 (2013).

**59.** L. M. Sesé (2016)

Path-integral and Ornstein-Zernike study of quantum fluid structures on the crystallization line, J. Chem. Phys. **144**, 094505-1/16

**60.** L. M. Sesé (2016)

Path integrals and effective potentials in the study of quantum monatomic fluids at equilibrium. Adv. Chem. Phys. **160**, 49 – 158.

### 3.2 LIBROS / MATERIAL PARA CURSOS VIRTUALES

1. L.M.Sesé (1990, 1994)

*Métodos Teóricos de la Química Física (Vol.1)*; Universidad Nacional de Educación a Distancia, Madrid; 1ª Edición, Septiembre 1990; 1 Reimpresión (revisada), Julio 1994.

ISBN: 978 – 84 – 362 – 2544 – 0.

2. L.M.Sesé y M.Criado (1990)

*Termodinámica Química Molecular*, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Madrid, 1 Edición, Diciembre 1990.

ISBN: 978 – 84 – 362 – 2577 – 8 (Obra completa, 2 Vols.).

3. A.Hernanz y L.M.Sesé (1990)

*Relaciones y Tablas Matemáticas*, Métodos Teóricos de la Química Física, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Madrid, 1 Edición, Septiembre 1990. Depósito legal: M-36682-1990.

4. L. M. Sesé, L. E. Bailey y M. Criado-Sancho (2008)

Material para el curso virtual del Postgrado Ciencia y Tecnología Química (UNED)

*Métodos de Cálculo en Química Teórica.*

5. L. M. Sesé, M. Criado-Sancho y L. E. Bailey (2008)

Material para el curso virtual del Postgrado Ciencia y Tecnología Química (UNED)

*Termodinámica Estadística y de No Equilibrio.*

6. L. M. Sesé (2011)

*Cálculo Numérico y Estadística Aplicada*, Universidad Nacional de Educación a Distancia (colección Grado), Madrid, 1ª Edición, Agosto 2011.

ISBN: 978 – 84 – 362 – 6168 – 4

7. L. M. Sesé (2013)

*Cálculo Numérico y Estadística Aplicada*, Universidad Nacional de Educación a Distancia (colección Grado), Madrid, Edición Digital, Mayo 2013.

ISBN electrónico: 978 – 84 – 362 – 6654-2

3.3 OTRAS PUBLICACIONES (colaboraciones en textos, tesis, revistas de divulgación, guías didácticas, etc.)

1. L.M.Sesé (1983)

Fuerzas intermoleculares

En Addenda de Química Física, UNED, Madrid, 1985, 1988; pp.159-191.

2. L.M.Sesé (1985)

Teoría de la influencia del disolvente sobre los espectros de vibración moleculares

Tesis Doctoral, presentada el 17-6-83 y editada por la Universidad Complutense de Madrid.

3.L.M. Sesé (1999)

Efemérides 99: El descubrimiento del actinio y su particular prueba del (noventa y) nueve, *100cias@uned*, **2**, 78-80.

4. J.E. Alvarellos y L.M. Sesé (1999)

Los Premios Nobel de Química 1998; *100cias@uned*, **2**, 69-73.

5. L.M. Sesé (2000)

La ley de las proporciones definidas de Proust, *100cias@uned*, **3**, 108-114.

6. L. M. Sesé and L. E. Bailey (2001)

Fases de la materia, átomos y deslocalización cuántica, *A Distancia (UNED)*, **19** (1), 41-50.

7. L. M. Sesé (2002, 2003)

Guía Didáctica para el video “*Quince minutos en la vida del electrón*”, UNED, Madrid, 1ª Edición 2002, 1ª Reimpresión (revisada) 2003.

8. L.M. Sesé (2002)

Noticias de Química 2002: Química y Computación, 100cias@uned, **5**, 101-102.

9. L. M. Sesé (2002)

Recensión del Texto “Curso Práctico de Termodinámica”, por M. Criado-Sancho, Colección Varia, UNED, Madrid, 100cias@uned, **5**, 171-172.

10. L. M. Sesé (2003)

Novedades científicas en Química en el año 2003, 100cias@uned, **6**, 70 –71.

11. L. M. Sesé (2003)

Efemérides en Química, partes 1ª y 2ª: “Elementos químicos” y “Algunos hechos científicos destacables sucedidos en ‘años 3’ desde el siglo XVII”, 100cias@uned, **6**, 81 –84.

12. L. M. Sesé (2003)

Recensión del libro “Evolución histórica de los principios de la Química”, por M.C. Izquierdo, F. Peral, M. A. de la Plaza y D. Troitiño. Colección Aula Abierta, UNED, Madrid (2003), 100cias@uned, **6**, 130-131

13. A. Williard y L. M. Sesé (2011)

Efemérides: Bicentenario del Yodo (1811-2011), 100cias@uned **4** (Nueva época), pp. 104-108.

#### 3.4 EMISIONES RADIOFÓNICAS (UNED)

- RNE, Radio 3 FM

Espacios de 30 mtos. de duración, Disponibles en la web <http://www.canal.uned.es>

- 1) “Espacio de la Facultad de Ciencias“ (I. Fernández y L.M. Sesé), 12 Enero 1998.
- 2) “El agua desde una perspectiva químico-física” (C. Sánchez, F. Peral y L.M. Sesé), 4 Mayo 2002.
- 3) “El agua desde una perspectiva químico-física (II)” (L. M. Sesé), 22 Febrero 2003.
- 4) “El agua desde una perspectiva químico-física (III)” (L. M. Sesé), 3 Abril 2004.
- 5) “Fenómenos extraños, la Mecánica Cuántica” (L. M. Sesé), 3 Mayo 2005.
- 6) “Parque Cuántico IP” (L. M. Sesé), 22 Noviembre 2005.
- 7) “Parque Cuántico IIP” (L. M. Sesé), 9 Mayo 2006.
- 8) “Parque Cuántico IV”,(L. M. Sesé), 9 Enero 2007.
- 9) “Parque Cuántico V: ¿muchos parques cuánticos?” (L. M. Sesé),1 Mayo 2007.
- 10) “Parque Cuántico VI: El montaje de los actores” (L. M. Sesé), 6 Mayo 2008.
- 11) “Moléculas en el Espacio Exterior P” (L. M. Sesé), 14 Abril 2009.
- 12) ”Moléculas en el Espacio Exterior IP” (L. M. Sesé),
- 13 ) ”Moléculas en el Espacio Exterior IIP” (L. M. Sesé), 12 Abril 2011
- 14) “Moléculas en el Espacio Exterior IV” (L. M. Sesé), 14 Abril 2012.
- 15) ” Niels Bohr y el centenario (1913 -2013) del primer modelo modelo cuántico de la estructura de los átomos”, 17 Diciembre 2013.
- 16) “Max Born (1882-1970) o el valor del estudio” (L. M. Sesé). 21 Abril 2015.
- 17) “Alphas, Rutherford, Gamow” (L. M. Sesé), 19 Abril 2016.

### 3.5 VIDEOS EDUCATIVOS Y PROYECTOS MULTIMEDIA

#### **A) *Quince minutos en la vida del electrón***

(Acompaña al video la correspondiente guía didáctica mencionada en 3.3)

Guión: Luis M. Sesé

Realización: José A. Tarazaga

Producción: Vicerrectorado de Medios y Tecnología, UNED, Madrid, 1ª Edición 2002, 1ª Reimpresión (revisada) 2003.

Depósito Legal: M – 20997 – 2002; ISBN: 978 – 84 – 362 – 4706 – 0.

**B) *Quince minutos en la vida del electrón: Una mirada en detalle (2009)***

*Proyecto multimedia* consistente de: el video *A*), una nueva Guía Didáctica más extensa, la serie de cinco entrevistas (formato TV) con científicos “*A Hombros de Hombres*” en la que se comentan las vidas y hechos de científicos relevantes en la historia del descubrimiento del electrón y de sus propiedades, y el serial radiofónico “*Parque Cuántico*” (los 6 episodios mencionados en 1.9.6).

Puede encontrarse en las direcciones URL:

<http://www.canal.uned.es/> e introduciendo en el buscador el término: electron

Depósito Legal: M – 26352 – 2009; ISBN: 978 – 84 – 362 – 5635 – 2.



## 4. *CONFERENCIAS INVITADAS*

1- L.M.Sesé (1983)

Un nuevo potencial intermolecular para el estudio de líquidos puros y disoluciones.  
Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales de Madrid, 9 de Febrero de 1983

2- L.M. Sesé (1991)

Simulaciones cuánticas por el método de Monte Carlo del nitrógeno líquido.  
Departamento de Física Fundamental, UNED, 22 Mayo 1991

3- L.M. Sesé (1999)

Separación de fases de mezclas de polímeros en dominios ordenados en 2D.  
Caracterización del orden.  
Departamento de Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas, UNED, 11 Mayo 1999

4- L.M. Sesé (2002)

Presentación por invitación de la Real Sociedad Española de Física del Proyecto de Divulgación Científica “*Quince minutos en la vida del electrón*”, Física en Acción 2002, La Coruña, España, 28 Septiembre 2002

### CONGRESOS INTERNACIONALES:

5- L. M. Sesé (1987)

Conferencia Plenaria: 45 m.  
Estudios en fase líquida: el problema de los efectos del medio sobre las propiedades Moleculares, XVII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Peñíscola, España. Fecha: 25 de Septiembre de 1987.

6- L. M. Sesé (2006)

Comunicación Oral: 25 m.  
Quantum static structural functions in condensed matter, a fortunate complexity.

8th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER-2006).

Aranjuez, España (29 Agosto – 4 Septiembre 2006). Fecha: 3 Septiembre 2006.

7- L. M. Sesé (2012)

Lección: 1h. 30 m.

Path-integral Monte Carlo and static structures in condensed matter, PIMD Spring School (CECAM), Toulouse, Francia (4 – 8 Junio 2012). Fecha: 8 de Junio de 2012.

Publicación: <http://congres.insa-toulouse.fr/PIMD/lectures.htm>, Julio 2012.

**Parte A. DATOS PERSONALES**
**Fecha del CVA 11-11-2016**

Nombre y apellidos	Mariona Sodupe Roure		
DNI/NIE/pasaporte		Edad	
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	<a href="#">E-9352-2013</a>	
	Código Orcid	<a href="#">0000-0003-0276-0524</a>	

**A.1. Situación profesional actual**

Organismo	Universidad Autónoma de Barcelona		
Dpto./Centro	Facultad de Ciencias		
Dirección	Edificio C		
Teléfono	935813031	correo electrónico	<a href="mailto:Mariona.Sodupe@uab.cat">Mariona.Sodupe@uab.cat</a>
Categoría profesional	Catedrática de Universidad	Fecha inicio	Nov 2008
Espec. cód. UNESCO			
Palabras clave			

**A.2. Formación académica (título, institución, fecha)**

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciada Ciencias Químicas	Universidad Autónoma de Barcelona	1985
Doctora Ciencias Químicas	Universidad Autónoma Barcelona	1990

**A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica (véanse instrucciones)**

Sexenios de investigación: 5 (último sexenio:2010-2015)

Tesis dirigidas en los últimos 10 años: 9 dirigidas y defendidas y tres en curso

Publicaciones: 180 artículos

Citas totales: 5100

Índice h: 41

Media de citas por artículo= 27.5

Promedio citas/año durante últimos 5 años: 350

**Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM (máximo 3500 caracteres, incluyendo espacios en blanco)**

Mariona Sodupe se licenció en Ciencias Químicas por la Universidad Autónoma de Barcelona (UAB) en el año 1985. Durante los años 1986-1990 realizó la tesis doctoral bajo la dirección de José Maria Lluch y Antonio Oliva. La tesis se centró en el estudio computacional de la estructura de complejos con metales de transición y con ella se inició una nueva línea de investigación en el grupo de química teórica de la UAB. Posteriormente, Mariona Sodupe realizó una estancia postdoctoral de dos años (1990-1992), como becaria Fulbright, en el centro de investigación de la NASA Ames Research Center (California) con el Prof. C.W. Bauschlicher, donde profundizó en la aplicación de métodos altamente correlacionados para estudiar sistemas metal-ligando con una estructura electrónica compleja. En 1992, se reincorporó a la UAB como Titular de Escuela Universitaria Interina y en 1996 obtuvo una plaza de Titular de Universidad en el Departamento de Química de la UAB. Desde 2008 ocupa una plaza de Catedrática de Universidad en el mismo Departamento. Durante todos esos años, además de continuar trabajando en el campo de los sistemas metal ligando, inició nuevas líneas de investigación, en particular, una relacionada con la reactividad de los sistemas biológicos radicalarios (en colaboración con el profesor J. Bertrán) y otra más reciente sobre la adsorción de biomoléculas en superficies silíceas. M. Sodupe ha sido galardonada con la Distinción de la Generalitat de Catalunya para la Promoción de la Investigación en la Universidad (2001) y el premio ICREA Academia (2011). Es coautora de 180 artículos en revistas internacionales (h=41, citas=5100) y 6 capítulos de libro. Ha supervisado 12 tesis doctorales y ha sido editora invitada en números especiales de las revistas Chem. Soc. Rev. y

Theoret. Chem. Acc. Actualmente los intereses de investigación de M. Sodupe se centran en el estudio computacional de la estructura y reactividad de: i) sistemas biológicos interaccionando con cationes metálicos, con especial atención a su papel en enfermedades neurodegenerativas, ii) adsorción y reactividad de biomoléculas en superficies silíceas en el contexto de la química prebiótica y iii) catálisis.

## **Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES** (ordenados por tipología)

### **C.1. PUBLICACIONES**

#### **10 publicaciones de los 10 últimos años**

1. L. Yin-Bandur, P.J. Sanz Miguel, L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe, M. Berghaus, B. Lippert, Multiple Condensation Reactions Involving Pt-II/Pd-II-OH<sub>2</sub>, Pt-NH<sub>3</sub>, and Cytosine-NH<sub>2</sub> Groups: New Twists in Cisplatin-Nucleobase Chemistry *Chem- Eur. J.* **2016**, *22*, 13653-13668.
2. J. Navarro, P. Ugliengo, M. Sodupe, A. Rimola, Does Fe<sup>2+</sup> in olivine-based interstellar grains play any role in the formation of H-2? Atomistic insights from DFT periodic simulations *Chem. Comm.* **2015**, *52*, 6873-6878.
3. F. M. Albertí, L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe, A. Mirats, H. Kaitsiotou, P. Sanz Miguel, B. Lippert, Mixed Adenine/Guanine Quartets with Three trans-a<sub>2</sub>PtII (a= NH<sub>3</sub> or MeNH<sub>2</sub>) Cross-Links: Linkage and Rotational Isomerism, Base Pairing, and Loss of NH<sub>3</sub>, *Chem. - Eur. J.* **2014**, *20* (12), 3394-3407
4. F. Nunez-Zarur, X. Solans-Monfort, L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe, Exo/endo Selectivity of the Ring-Closing Enyne Methathesis Catalyzed by Second Generation Ru-Based Catalysts. Influence of Reactant Substituents. *ACS Catal* **2013**, *3* (2), 206-218.
5. A. Rimola, D. Costa, M. Sodupe, J.F. Lambert, P. Ugliengo, Silica Surface Features and Their Role in the Adsorption of Biomolecules: Computational Modeling and Experiments. *Chem Rev* **2013**, *113* (6), 4216-4313.
6. J. Ali-Torres, J.-D. Marechal, L. Rodríguez-Santiago, and M. Sodupe, Three Dimensional Models of Cu<sup>2+</sup>-Abeta(1-16) Complexes from Computational Approaches. *J. Am. Chem. Soc.*, **2011** *133*(38): p. 15008-15014.
7. C. Rodríguez-Rodríguez, A. Rimola, L. Rodríguez-Santiago, P. Ugliengo, A. Alvarez-Larena, H. Gutierrez-de-Teran, M. Sodupe, and P. Gonzalez-Duarte, *Crystal structure of thioflavin-T and its binding to amyloid fibrils: insights at the molecular level. Chem. Comm.*, **2010**. *46*(7): p. 1156-1158
8. C. Rodríguez-Rodríguez, N. Sánchez de Groot, A. Rimola, Á. Álvarez-Larena, V. Lloveres, J. Vidal-Gancedo, S. Ventura, J. Vendrell, M. Sodupe, P. González- Duarte: Design, selection and characterization of thioflavin-based intercalation compounds with metal chelating properties for application in Alzheimer's disease. *J. Am. Chem. Soc.*, **2009**, *131* 1436-1451.
9. P. Ugliengo, M. Sodupe, F. Musso, I. J. Bush, R. Orlando, R. Dovesi: Realistic Models of Hydroxylated Amorphous Silica Surfaces and MCM-41 Mesoporous Material Simulated by Large-scale Periodic B3LYP Calculations, *Adv. Mater.* **2008**, *451*, 4579-4583.
10. A. Rimola, M. Sodupe, P. Ugliengo: Aluminosilicate Surfaces as Promoters for Peptide Bond Formation: An Assessment of Bernal's Hypothesis by ab Initio Methods. *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, *129*, 8333-8344.

### **C.2. Proyectos I+D**

Miembro del equipo de investigación en 20 proyectos. Investigadora principal en 11.

1. Una perspectiva atomística de la detección, toxicidad y agregación del péptido beta-amiloide mediante simulaciones computacionales. MINECO CTQ2014-59544-P, 118000 €, IP: M. Sodupe
2. Estudios computacionales de estructura y reactividad química. Aplicación a sistemas de interés biológico. MICINN CTQ2011-24847/BQU, 2012-2015, 116000 €, IP: M. Sodupe
3. ICREA Academia, 2011, ICREA, Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats 2011-2015, 200000 €, IP: M. Sodupe

4. Silica surface properties and their influence in adsorption processes from computational simulations, MEC. SAB2011-0033, 2012, 9500 €, Investigador responsable del grupo receptor: M. Sodupe, Investigador extranjero: P. Ugliengo
5. Grupo de Activación de Biomoléculas, DURSI 2008-SGR-00638, 2009-2013, 42640 € IP:M. Sodupe
6. Activación de biomoléculas por cationes de metales de transición y por superficies silíceas, MICINN, CTQ2008-06381/BQU, 2009-2011, 149314 €, IP:M. Sodupe
7. Activación de biomoléculas, 2005-SGR-00244, 2005-2008, 41200 €, IP: M. Sodupe
8. Grupo de Activación de biomoléculas. Estudios computacionales y de espectrometría de masas, MEC CTQ2005-08797-C02-02, 2006-2008, 85680 €, IP: M. Sodupe
9. Convocatoria de profesores e investigadores visitantes, Generalitat de Catalunya 2005PIV2-13, 4930 €, IP:M. Sodupe
10. Ionización y activación por cationes metálicos de sistemas de interés bioquímico. Estudios teóricos y de espectrometría de masas. MCyT, BQU2002-04112-C02-01, 2003-2005, 114825 € IP:M. Sodupe
11. Cationización e ionización de aminoácidos y péptidos Distinción de la “Generalitat de Catalunya” DURSI, 2001-2005, 120000 €, IP:M. Sodupe

### **C.3 Conferencias**

30 conferencias invitadas

#### **10 conferencias seleccionadas de los 10 últimos años**

1. M. Sodupe “Fluorescent markers for amyloid- $\beta$  fibril detection. Insights from computational approaches.” ICCMSE, Athens, 2016.
2. M. Sodupe, “Insights on amyloid- $\beta$  detection by fluorescence markers and metal induced toxicity from computational simulations”, Conferencia plenaria, CHITEL, Torino, 2015
3. M. Sodupe Fluorescence markers for amyloid detection. Modelling Interactions in Biomolecules MIB 15., Pruhonice, (Czech republic) 2015
4. M. Sodupe Insights on copper amyloid and copper chelating complexes from computational approaches Symposium “Advances in Amyloid Research. Bridging Theory and Experiment” in CSC 2014, Vancouver, 2014
5. M. Sodupe Photophysics of fluorescence markers for amyloid detection. WATOC “World association of Theoretical Oriented Chemistry” Santiago de Chile, 2014
6. M. Sodupe, Computational models of Cu<sup>2+</sup> complexes relevant to the Alzheimer disease. Molecular Interactions in Biomolecules V, Kutna Hora (Czech Republic) 2011
7. M. Sodupe, Computational simulations of prebiotic processes, NIS Colloquium, First chemical steps towards the origin of life”, Torino, 2010
8. M. Sodupe, Interaction of Biomolecules with silica derived materials. Adsorption of nucleobases on Na<sup>+</sup>-montmorillonite, Roscoff (France) 2009
9. M. Sodupe, “Polymerization on the Rocks. Aluminosilicate surfaces as promoters for the peptide bond formation”, Theoretical Biophysics symposium, Cetraro (Italia) 2007
10. M. Sodupe, “Peptide Bond formation Activated by transition metal Cations?” 11th International Conference on Theoretical Aspects of Catalysis, Berlin, 2006

### **C.4 Premios**

- Premio extraordinario de Licenciatura (Curso 1984-1985), Universidad Autónoma de Barcelona, 28-10-1987
- Premio Extraordinario de Doctorado (Curso 1989-1990), Universidad Autónoma de Barcelona, 5-2-1993
- Premio “Distinción de la Generalitat de Cataluña para la promoción de la Investigación Universitaria” (Categoría Joven Investigador) 7-6-2001
- Premio “ICREA Academia 2011”

### **C.5. Organización de actividades de I+D**

1. ESCR Electronic Structure and Chemical Reactivity, an International Symposium in honor of Prof. J. Bertran, (Secretaria), 2001

2. “II Summer School of the Reference Network in Theoretical and Computational Chemistry, Directora de la escuela “Prebiotic Chemistry”, 2008
3. “XXVI Reunió de la Xarxa de Química Teórica, Presidenta del comité organizador, 2010
4. “WATOC 2011 Satellite Meeting. Theoretical modelling of materials” Miembro del comité organizador, 2011
5. XXXVI Bienal XXXVI Reunión BIENAL de la Real Sociedad Española de QUÍMICA, 2017 Sitges (Barcelona) Vicecoordinadora

### **C.6 Participación en comités**

- Miembro del Editorial Board de la revista Computational & Theoretical Chemistry 2011-
- Editora Invitada de la revista Theoretical Chemistry Accounts para el número especial “Theoretical and Computational Chemistry in Spain”, 2011,
- Editora Invitada de la revista Chem. Soc. Rev. para el número especial “Prebiotic Chemistry” 2012
- Miembro del comité científico del congreso “Electronic Structure Principles and Applications”, ESPA. Barcelona (2011), Badajoz (2014), Castellón (2016)

### **C.7. Actividades de divulgación científica**

#### **Proyectos**

1. Researcher’s Night, FP7-PEOPLE-NIGHT (No 228736). 2008, 12189 €, IP: M. Sodupe
2. Viaje al interior de las moléculas. Simulaciones para entender la química. ACDC, Generalitat de Catalunya 2007, 4000 €, M. Sodupe

#### **Artículos**

1. F. Peccati, X. Solas-Monfort, M. Sodupe”La química computacional aplicada al disseny de marcadors fluorescents per a la diagnosi de la malatia d’Alzheimer, Revista de la Societat Catalana de Química, 15, 2016
2. M. Sodupe, A. Rimola, P. Ugliengo, Adsorción y polimerización de aminoácidos en superficies de minerales. Simulaciones computacionales de procesos prebióticos. Anales de Química (2011), 2, 137-146
3. C. Rodríguez-Rodríguez, A. Rimola, J. Alí-Torres, P. González-Duarte, M. Sodupe. “Estrategias in silico para el diseño y selección de compuestos con potencial aplicación en la enfermedad de Alzheimer”. Lifescienceslab, Noviembre/Diciembre10, 66-68.
4. M. Sodupe, Avenços en química prebiòtica, Síntesi de proteïnes en superfícies de minerals per conèixer sobre l’origen de la vida. TERAFLOR 93 Juliol 2007

### **C.8 Experiencia de gestión de I+D**

- Miembro del panel P04 ERC-Advanced Grant, 2014-
- Miembro del equipo gestor del programa de Plan Nacional de Ciencias y Tecnología Químicas, Subprograma de Química Básica BQU. (2008-2012)
- Miembro del panel de evaluación del programa Nacional de Ciencias y Tecnología Químicas, Subprograma de Química Básica BQU. (2013- )
- Miembro de la comisión de acreditación de Colaboradores y Lectores del área de Ciencias de la Agencia Catalana de la Calidad Universitaria. (AQU) (2008-)
- Miembro del comité de acceso del Barcelona Supercomputing Center/Red Española de Supercomputación. Área de Química y Ciencias de Materiales. (2007-2012)
- Miembro del Consejo de Dirección de la “Xarxa de Referencia Química Teòrica i Computacional” de Cataluña (2008-2012)
- Evaluadora de proyectos de investigación para la Agencia Andaluza de Evaluación (AGAE), Xunta de Galicia y Gobierno de Aragón (2005-2009)



---

Comisión Interministerial de Ciencia y  
Tecnología

---

## Curriculum vitae

Nombre: Manuel Yáñez Montero

Fecha: 23/03/2010

Research ID : A-7100-2012

*Plan Nacional de I+D+I*

Apellidos: Yáñez Montero  
DNI:

Fecha de nacimiento

Nombre: Manuel  
Sexo: V

---

### Situación profesional actual

Organismo: Universidad Autónoma de Madrid

Facultad, Escuela o Instituto: Ciencias

Depto./Secc./Unidad estr.: Química

Dirección postal: Departamento de Química, C-9. Universidad Autónoma de Madrid. Cantoblanco. 28049-Madrid

Teléfono (indicar prefijo, número y extensión): 91-397-4953

Fax: 91-396-5238

Correo electrónico: manuel.yanez@uam.es

Especialización (Códigos UNESCO): 2307-2210

Catedrático de Universidad

Fecha de inicio: 1983

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.

Nuevos Materiales Moleculares. Reactividad Intrínseca . Química Iónica en fase gas. Enlaces de Hidrógeno.

---

### Formación Académica

Titulación Superior	Centro	Fecha
Licenciado en Ciencias Químicas	Univ. Santiago de Compostela	1970
Grado de Licenciado en C. Químicas	Univ. Santiago de Compostela	1971

Doctorado	Centro	Fecha
Ciencias Químicas	Universidad Autónoma de Madrid	1973



### Actividades anteriores de carácter científico profesional

---

Puesto	Institución	Fechas
Becaria de FPI	Universidad Autónoma de Madrid	1971-73
Postdoctoral Res. Asociated	Carnegie-Mellon University	1974-76
Prof. Adjunto Interino	Universidad Autónoma de Madrid	1976-77
Prof. Adjunto Numerario	Universidad Autónoma de Madrid	1978-80
Prof. Agregado de Universidad	Universidad Autónoma de Madrid	1980-83

---

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

Idioma	Habla	Lee	Escribe
Inglés	C	C	C
Francés	C	C	B
Gallego	C	C	B
Portugués	B	C	B

**.- Coordinador General** del “**European Master on Theoretical Chemistry and Computational Modelling**” proyecto Europeo que involucra a 47 Universidades Europeas de 8 países distintos. Este master ha recibido el EUROLABEL de la European Chemistry Thematic Network (C.N. EM0701). En estos momentos este es un master **ERASMUS MUNDUS 2009-2013**. Por lo tanto la UAM es la Institución coordinadora del mismo.

Coordinador de la ITN European Joint Doctorate on Theoretical Chemistry and Computational Modelling. TCCM European Commission. Research Executive Agency. **MSCA-ITN-EJD**. SEP-210137947

Con fecha 29 de abril de 2015 el Profesor Yáñez ha sido nombrado **Académico Correspondiente Nacional de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales**.

## **Conferencias Invitadas** (sin ser en Congresos)

Laboratoire des Collisions Atomiques (Burdeos, Francia)...	Octubre 1986
Universidade de Lisboa (Portugal).....	Noviembre 1995
Universidad de Oviedo.....	Abril 1996
Universidad de Santiago de Compostela.....	Octubre 1996
Université Pierre et Marie Curie (Paris, Francia).....	Noviembre 1996. Mayo 2004 Mayo 2009 Marzo 2012 Abril 2016
Université Paris-Saclay (Paris, Francia)	Abril 2016
Universidad de Valladolid.....	Mayo 1997 Mayo 2002 Julio 2010 Abril 2013
Université Cadi-Ayyad (Marrakech, Marruecos).....	Abril 1997
Instituto Rocasolano, CSIC (Madrid).....	Mayo 1997
Université Sophia Antipolis (Niza, Francia).....	Septiembre 1997
Universidad del País Vasco (San Sebastián).....	Marzo 1998
Université de Rennes (Francia).....	Mayo 1998 Abril 2002 Mayo 2006 Mayo 2009 Junio 2010

Marzo 2012

Frei Universität (Berlin, Alemania).....Mayo 1999  
Marzo 2004

Universidad Rovira i Virgili (Tarragona).....Junio 2000

Universidad Complutense de Madrid.....Marzo 2003

University of Sydney (Australia).....Mayo 2003

Université d'Evry val d'Essonne (Francia).....Mayo 2004  
Junio 2006  
Mayo 2009  
Marzo 2012  
Abril 2016

Technischen Universität (Berlin, Alemania).....Marzo 2004

Université de Nancy (Francia).....Abril 2004  
Mayo 2009

Université d'Estrasburgh (Francia).....Mayo 2004

Université de Montpellier (Francia).....Septiembre 2005

Purdue University (Indianápolis, USA).....Octubre 2005

Pontifia Universidad Catolica de Chile (Chile).....Enero 2007  
Enero 2008  
Enero 2010  
Abril 2013

Università di Palermo (Italia)..... Abril 2007

Université Cäen (Francia)..... Junio 2010

Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Madrid.. .Noviembre 2011.

Université de Lorraine at Nancy (Francia).....Abril 2012

University of Dalhousie, Halifax (Canada)..... Mayo 2012

Université Paul Sabatier, Toulouse (Francia).....Septiembre 2012

**PARTICIPACION EN PROYECTOS DE INVESTIGACION FINANCIADOS EN LOS  
ULTIMOS 10 AÑOS -**

---

TITULO DEL PROYECTO: Mecanismo de Acción de Fármacos.  
ENTIDAD FINANCIADORA: C. A. M. Equipamiento para la Investigación.  
DURACION DESDE: 1992 HASTA: 1994  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: Cationización de Compuestos Bifuncionales. Modelización de Modificaciones Estructurales de las Bases del ADN y de Aminoácidos.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGYCIT Acción Integrada Hispano-Francesa no. 102 B.  
DURACION DESDE: 1994 HASTA: 1995  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: O. Mó

---

TITULO DEL PROYECTO: Estudio teórico-experimental de procesos de fragmentación iónica del ácido acidoacético y del 2-bromo-butano e isoclorobutano.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGYCIT Acción Integrada Hispano-Potuguesa no. 31 B.  
DURACION DESDE: 1994 HASTA: 1995  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: Clusters y Reactividad Iónica en Fase Gas.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGYCIT PB93-0289-C02  
DURACION DESDE: 1994 HASTA:  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL ACCION: Gestión de Red Internet del Departamento de Química.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGYCIT APC95-0048  
DURACION DESDE: 1995 HASTA: 1996  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: Activación en fase Gaseosa de Amino Acidos por cationes metálicos. Estudio Teórico y Experimental.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGYCIT Acción Integrada Hispano-Francesa no. 57 B  
DURACION DESDE: 1996 HASTA: 1997  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL ACCION: Reactividad Intrínseca de Lactamas y Lactonas Saturadas e Insaturadas  
ENTIDAD FINANCIADORA: CAM -Plan Regional de Investigación, Acciones Especiales Po. no. AE00192/95  
DURACION DESDE: 1996 HASTA: 1997  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: Aspectos Teóricos y Experimentales de la Química Física Actual.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGYCIT Ayudas para Programas de Doctorado de Calidad  
DURACION DESDE: 1996 HASTA: 1997  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: Computational Study of the Role of Halogen Ions in Ozone Depletion  
ENTIDAD FINANCIADORA: Instituto de Estudios Avanzados de la NATO  
DURACION DESDE: 1996 HASTA: 1998  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: I. Cooper

---

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad iónica intrínseca, sistemas de interés en química de la atmósfera y clusters  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGES (Dirección General de Enseñanza Superior). PB96-0067  
DURACION DESDE: 1997 HASTA: 2000  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: Protección de la red informática del departamento de Química  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGES (Dirección General de Enseñanza Superior). APC1997-0152  
DURACION DESDE: 1997 HASTA: 1998  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: Complexation of metal cations by hydroxycarboxylic acids: experimental and theoretical study  
ENTIDAD FINANCIADORA: Instituto de Estudios Avanzados de la NATO  
DURACION DESDE: 1998 HASTA: 1999  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: J. Tortajada.

---

TITULO DEL PROYECTO: Determinación experimental de la acidez y basicidad en fase gaseosa de sistemas insaturados heteroatómicos por espectrometría de masas de resonancia ciclotrónica de iones (ICR) y modelización mediante cálculos ab initio.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGES Acción Integrada Hispano-Francesa HF1998-0016  
DURACION DESDE: 1999 HASTA: 2000  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: Química Iónica en Fase Gas  
ENTIDAD FINANCIADORA: Agencia Española de Cooperación Internacional. Programa de Cooperación Interuniversitaria España-Marruecos.  
DURACION DESDE: 1998 HASTA: 1999  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Workshop on Computational Chemistry.  
ENTIDAD FINANCIADORA: M.E.C. DGES (CO97-0061)  
DURACION DESDE: 1998 HASTA: 1998  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Workshop on Computational Chemistry.  
ENTIDAD FINANCIADORA: Comunidad de Madrid. Dirección General de Investigación.  
DURACION DESDE: 1998 HASTA: 1998  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: International Symposium of Physical Organic Chemistry.  
ENTIDAD FINANCIADORA: MEC DGES (CO99-0040).  
DURACION DESDE: 1999 HASTA: 1999  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Determinación experimental de la acidez y basicidad en fase gaseosa de sistemas insaturados heteroatómicos por espectrometría de masas de resonancia ciclotrónica de iones (ICR) y modelización mediante cálculos ab initio.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGES Acción Integrada Hispano-Francesa HF2000-0040

DURACION DESDE: 2000 HASTA: 2002  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: Profesores Visitantes Iberdrola.  
ENTIDAD FINANCIADORA: Fundación Iberdrola.  
DURACION DESDE: 1999 HASTA: 2002  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez .

---

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad de Acidos hidroxycarboxilicos con cationes metálicos. Estudio Teórico y experimental de la formación, solvatación y reactividad de las especies organometálicas formadas.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGEA Acción Integrada Hispano-Frances HF 1999-0015.  
DURACION DESDE: 2000 HASTA: 2002  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: O. Mó.

---

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad iónica y clusters. Aplicaciones bioquímicas y medioambientales.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MCYT BQU2000-0245  
DURACION DESDE: 2000 HASTA: 2003  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Complejación en fase gaseosa de ácidos ribonucleicos y desoxirribonucleicos con cationes  $Pb^{2+}$  en presencia de  $Mg^{2+}$ . Estudio teórico y experimental  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGI-McyT Acción Integrada Hispano-Frances HF 2001-0042.  
DURACION DESDE: 2002 HASTA: 2004  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Red de excelencia en Química Teórica y Computacional.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MCYT BQU2001-5037-E  
DURACION DESDE: 2002 HASTA: 2003  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Intrinsic Reactivity of New Molecular Materials.  
ENTIDAD FINANCIADORA: Cost Action D26 /0014/03  
DURACION DESDE: 2003 HASTA: 2007  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad intrínseca de Nuevos Materiales Moleculares.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MCYT BQU2003-00894  
DURACION DESDE: 2003 HASTA: 2006  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Estructura y Dinámica en Procesos de Reactividad Química.  
ENTIDAD FINANCIADORA: Proyectos de Investigación UAM-Grupo Santander Para la Cooperación con América Latina.  
DURACION DESDE: 1-1-2006 HASTA: 31-12-2007  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Florentino Borondo Rodríguez

---

TITULO DEL PROYECTO: Materiales Foto- y Electroactivos para Celulas Solares Orgánicas e Híbridas. (MADRISOLAR)  
ENTIDAD FINANCIADORA: Dirección General de Universidades e Investigación. Consejería de Educación. CAM.

P-PPQ-000225-0505.

DURACION DESDE: 2006 HASTA: 2010

INVESTIGADOR PRINCIPAL: N. Martín.

---

TITULO DEL PROYECTO: Modelización de Materiales Moleculares y Nanoestructuras.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MEC CTQ2006-08558

DURACION DESDE: 2006 HASTA: 2009

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: International Seminar in Theoretical Chemistry and Computational Modelling.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MEC CTQ2006-28324-E

DURACION DESDE: 2007 HASTA:

INVESTIGADOR PRINCIPAL: O. Mó.

---

TITULO DEL PROYECTO: CONSOLIDER on Molecular Nanoscience.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MEC CSD 2007-00010

DURACION DESDE: 2007 HASTA: 2011

COORDINADOR: E. Coronado.

---

TITULO DEL PROYECTO: Clusters as building blocks in nanotechnology.

ENTIDAD FINANCIADORA: Acción Integrada Hispano-Francesa HF2007-0067

DURACION DESDE: 2007 HASTA: 2009

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Alcamí

---

-TITULO DEL PROYECTO: Chemistry with Ultrashort Pulses and Free-Electron Lasers: Looking for Control Strategies Through <sup>3</sup>Exact<sup>2</sup> Computations. COST action CM0702.

ENTIDAD FINANCIADORA: European Science Foundation

DURACION DESDE: 2008 HASTA: 2012

INVESTIGADOR PRINCIPAL: F. Martín

---

TITULO DEL PROYECTO: Dinámica de moléculas y clusters en fase gas y superficies.

ENTIDAD FINANCIADORA: Centro Estudios de America Latina de la UAM (CEAL-UAM) y Banco de Santander

DURACION DESDE: 2009 HASTA: 2010

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Alcamí

---

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad en fase gas. Nuevos materiales moleculares y discriminación quiral.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGPTC- MICINN CTQ2009-13129-C02-01

DURACION DESDE: 2009 HASTA: 2012

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Materiales Foto- y Electroactivos para Celulas Solares Orgánicas e Híbridas. (MADRISOLAR2)

ENTIDAD FINANCIADORA: Dirección General de Universidades e Investigación. Consejería de Educación. CAM. S2009PPQ-1533.

DURACION DESDE: 2010 HASTA: 2014

INVESTIGADOR PRINCIPAL: N. Martín.

---

TITULO DEL PROYECTO: WATOC-2011. Nith triennial Congress of the World Association of the Theoretical and Computational Chemist.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGPTC- MICINN CTQ2010-09769-E  
DURACION DESDE: 2010 HASTA: 2011  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Interacciones no-covalentes y Quiralidad en Nuevos Materiales  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGICT CTQ2012-35513-C02-01  
DURACION DESDE: 2013 HASTA: 2016  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: ERASMUS MUNDUS “European Joint Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling (TCCM)”  
ENTIDAD FINANCIADORA: European Commission. EACEA. Ref. EMMC FPA 2010-0147  
DURACION DESDE: 2010 HASTA: 2019  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: XUV/X-ray Light and Fast ions for ultrafast chemistry. XLIC  
ENTIDAD FINANCIADORA: European Science Foundation. COST Action CM 1204  
DURACION DESDE: 2012 HASTA: 2016  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Alcamí

---

TITULO DEL PROYECTO: Theoretical Chemistry and Computational Modelling. TCCM  
ENTIDAD FINANCIADORA: European Commission. Research Executive Agency. **MSCA-ITN-EJD**. SEP-210137947  
DURACION DESDE: 2015 HASTA: 2019  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Materiales Avanzados de Carbono para Fotovoltaica Molecular (FOTOCARBON)  
ENTIDAD FINANCIADORA: Dirección General de Universidades e Investigación. Consejería de Educación. CAM. S2013/MIT-2841.  
DURACION DESDE: 2014 HASTA: 2018  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: N. Martín.

---

TITULO DEL PROYECTO: Modificación de la Reactividad y Diseño de Nuevos Materiales mediante Enlaces de Berilio y otras Interacciones No-Covalentes.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGICT CTQ2015-63997-C2-1-P  
DURACION DESDE: 2016 HASTA: 2019  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.



## PUBLICACIONES

---

1. AUTORES: M. Yáñez y J.I. Fernández Alonso.  
TITULO: *Contribución al estudio teórico de la reactividad química por el método de Klopman.*  
REF. REVISTA: *Afinidad* **38**, 1123 (1971). CLAVE=A
2. AUTORES: M. Yáñez, A. Macías and J.I. Fernández-Alonso.  
TITULO: *Study of the influence of the attacking-ion on the reactivity of conjugated systems.*  
REF. REVISTA: *Chem. Phys. Lett.*, **17**, 63 (1972). CLAVE=A
3. AUTORES: M. Yáñez and J.I. Fernández Alonso.  
TITULO: *Study of the influence of attacking-ions and dipoles on the reactivity of conjugated systems.*  
REF. REVISTA: *Chemical and Biochemical Reactivity*, **VI**, 431 (1974). CLAVE=A
4. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J.I. Fernández Alonso.  
TITULO: *Theoretical study of charge-transfer complexes.*  
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem.*, **79**, 137 (1975). CLAVE=A
5. AUTORES: M. Yáñez, O. Mó and J.I. Fernández Alonso.  
TITULO: *A theoretical study of the electrophilic substitution on aminophenols and aminobenzenethiols.*  
REF. REVISTA: *Tetrahedron*, **31**, 245 (1977). CLAVE=A
6. AUTORES: J. Catalán, A. Macías, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Calculations on the inversion of anhydrous and hydrated aziridine.*  
REF. REVISTA: *Mol. Phys.*, **34**, 1429 (1977). CLAVE=A
7. AUTORES: O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Influence of polarization functions on molecular electrostatic potentials.*  
REF. REVISTA: *Theoret. Chim. Acta*, **47**, 263 (1978). CLAVE=A
8. AUTORES: J. Catalán, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Theoretical study of the structure of azetidene.*  
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.* **43**, 251 (1978). CLAVE=A
9. AUTORES: J. Catalán and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study of proton addition to oxirane, aziridine and 2-azirene.*  
REF. REVISTA: *J. Am. Chem. Soc.*, **100**, 1398 (1978). CLAVE=A
10. AUTORES: M. Yáñez, R.F. Stewart and J.A. Pople.  
TITULO: *The projection of molecular charge density into spherical atoms. I. Density basis functions for first row atoms.*  
REF. REVISTA: *Acta Cryst.* **A34**, 641 (1978). CLAVE=A
11. AUTORES: M. Yáñez and R.F. Stewart.  
TITULO: *The projection of molecular charge density into spherical atoms. II. An Application to X-Ray Diffraction Data.*  
REF. REVISTA: *Acta Cryst.* **A34**, 648 (1978). CLAVE=A

12. AUTORES: V. López, A. Macías, R.D. Piacentini, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Molecular treatment of elastic and double charge-exchange He<sup>2+</sup>-He collisions.*  
REF. REVISTA: J. Phys. B, Atom. Molec. Phys., **11**, 2889 (1978). CLAVE=A
13. AUTORES: J. Catalán, M. Yáñez and J.I. Fernández Alonso.  
TITULO: *A theoretical study of hydrogen bonding in malonaldehyde.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc., **100**, 6917 (1978). CLAVE=A
14. AUTORES: J. Catalán and M. Yáñez.  
TITULO: *Correlation between ring-proton affinities and C<sub>1s</sub> binding energies. Application to Monosubstituted benzenes.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett., **60**, 499 (1979). CLAVE=A
15. AUTORES: J. Catalán and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation and Proton Affinities of monosubstituted benzenes. A theoretical study.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Soc. Perkin Trans. II, 741 (1979). CLAVE=A
16. AUTORES: J. Catalán and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation and proton affinity of anisole. A theoretical study.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc., **101**, 3490 (1979). CLAVE=A
17. AUTORES: J. Catalán and M. Yáñez.  
TITULO: *Prediction of proton affinities and preferred protonation sites in benzene derivatives, from 1s Orbital energies.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Soc. Perkin Trans. II, 1627 (1979) CLAVE=A
18. AUTORES: O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Structure and charge distribution of some alkynoyl cations. A theoretical study.*  
REF. REVISTA: Theoret. Chim. Acta, **53**, 337, (1979). CLAVE=A
19. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *Proton affinities and preferred protonation sites in 3- and 4- substituted pyridines. Prediction from 1s orbital energies.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **101**, 6520 (1979). CLAVE=A
20. AUTORES: M. Dorado, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study of the structure and charge distribution of some alkynylcarbenium ions.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc., **102**, 947 (1980) CLAVE=A
21. AUTORES: J. Catalán and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study of the protonation of benzamide.*  
REF. REVISTA: Tetrahedron, **36**, 665 (1980). CLAVE=A
22. AUTORES: J. Catalán, F. Escudero, J. Laso, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *The effect of substituents on the structure of dioxirane.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct., **69**, 217 (1980). CLAVE=A
23. AUTORES: A. Macías, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Molecular treatment of the He<sup>+</sup> + H collisions.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev., **A23**, 2941 (1981). CLAVE=A

24. AUTORES: F. Escudero and M. Yáñez.  
TITULO: *Atoms in molecules. Density basis functions for second row atoms.*  
REF. REVISTA: Mol. Phys., **45**, 617 (1982). CLAVE=A
25. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *Prediction of proton affinities and protonation sites using a multivariate linear correlation.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Soc. Perkin Trans. II, 1409 (1982). CLAVE=A
26. AUTORES: J. Catalán, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study of the protonation of methylindole derivatives.*  
REF. REVISTA: Tetrahedron, **38**, 3693 (1982). CLAVE=A
27. AUTORES: A. Macías, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Molecular states of HeH<sup>+</sup>. Energies and dynamical couplings.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev., **A27**, 206 (1983). CLAVE=A
28. AUTORES: A. Macías, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Excitation and charge transfer in He<sup>+</sup> - H collisions. A study of the origin dependence of calculated cross sections.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev., **A27**, 213 (1983). CLAVE=A
29. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study of the structure, charge distribution and gas-phase basicity of 1H-indazole and its N-methyl derivatives.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct., **94**, 143 (1983). CLAVE=A
30. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study of the structure, charge distribution and gas-phase basicity of azaindoles.*  
REF. REVISTA: Tetrahedron, **39**, 2851 (1983). CLAVE=A
31. AUTORES: F. Escudero, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study of the charge distribution of aminopyridines, aminopyrimidines and some Diazine N-oxides.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Soc. Perkin Trans. II, 1735 (1983). CLAVE=A
32. AUTORES: J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Ring functions, as polarization functions, for ab initio calculations of small rings. Dioxirane.*  
REF. REVISTA: Theoret. Chim. Acta, **64**, 57 (1983). CLAVE=A
33. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *Theoretical study on the stable conformers of 1,3-diazetidene.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM, **106**, 251 (1984). CLAVE=A
34. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *Conformation of four-membered rings. Comparison between azetidene and 1,3-diazetidene.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM, **107**, 269 (1984). CLAVE=A
35. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *Influence of the tautomeric forms of azaindoles on their basicity in solution.*

- REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM, **107**, 263 (1984). CLAVE=A
36. AUTORES: J. Catalán, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Very strong bases. A theoretical determination of their gas-phase proton-affinities.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **107**, 257 (1984). CLAVE=A
37. AUTORES: J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *On the use of bond functions, as polarization functions, in ab initio calculations.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **107**, 59 (1984). CLAVE=A
38. AUTORES: A. Macías, R. Mendizábal, F. Pelayo, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *A stabilization treatment of an infinitely excited quasimolecule. LiHe<sup>3+</sup>.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **107**, 245 (1984). CLAVE=A
39. AUTORES: J. Catalán and M. Yáñez.  
TITULO: *Alfa vs. beta protonation of pyrrole and indole.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc., **106**, 421 (1984). CLAVE=A
40. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez, M. Yáñez and F. Amat-Guerri.  
TITULO: *Comparative study of the structure and properties of 1-methyl-7-azaindole and 7-methyl-7H-pyrrolo(2,3-b)pyridine, in their ground states.*  
REF. REVISTA: Nouv. J. Chim., **8**, 87 (1984). CLAVE=A
41. AUTORES: J. Catalán, J.L.G. de Paz, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *The problem of the relationship between proton affinity (intrinsic basicity) and the charge on the basic centre.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **108**, 161 (1984). CLAVE=A
42. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, J.L.G. de Paz, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation of azanaphthalenes, azaindoles and purine bases. The "lone-pair charge" approach.*  
REF. REVISTA: Nucleic Acid Symposium Series, **14**, 105 (1984). CLAVE=A
43. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, J.L.G. de Paz, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study on the tautomer preference for 4(5)-substituted imidazoles.*  
REF. REVISTA: Nucleic Acid Symposium Series, **14**, 161 (1984). CLAVE=A
44. AUTORES: J. Catalán, J.L.G. de Paz, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *The Azoles. A theoretical study.*  
REF. REVISTA: Chemica Scripta, **24**, 84 (1984). CLAVE=A
45. AUTORES: J. Catalán, J.L.G. de Paz, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *The relationship between substituent-induced energy and charge effects in proton transfer equilibria involving heteroaromatic nitrogen systems. The "lone-pair charge" approach.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc., **106**, 6552 (1984). CLAVE=A
46. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, J.L.G. de Paz, P. Pérez, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *Basicity of azoles. Part 6. Calculated intrinsic basicities for methyl-substituted pyrazoles and imidazoles. Comparison to aqueous solution data: N-methylation effect.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem., **49**, 4379 (1984). CLAVE=A

47. AUTORES: F. Escudero, O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Structure and charge distribution of 4-substituted benzenediazonium ions.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **120**, 377 (1985). CLAVE=A
48. AUTORES: O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Calculation of radial couplings in the model potential and pseudopotential approaches. The NaH quasimolecule.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev., **A31**, 3977 (1985). CLAVE=A
49. AUTORES: L.F. Errea, L. Méndez, A. Riera, M. Yáñez, J. Hanssen, C. Harel and A. Salin.  
TITULO: *The  $LiH^{2+}$  quasimolecule. A comparison between the configuration interaction and the OEDM approaches.*  
REF. REVISTA: J. Physique, **46**, 709 (1985). CLAVE=A
50. AUTORES: L.F. Errea, L. Méndez, A. Riera, M. Yáñez, J. Hanssen, C. Harel and A. Salin.  
TITULO: *Charge exchange in  $Li^{2+} (1s) + H (1s)$  collisions. A molecular approach including two-electron translation factors.*  
REF. REVISTA: J. Physique, **46**, 719 (1985). CLAVE=A
51. AUTORES: F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Calcul de sections de choc entre particules lourdes avec des fonctions d'onde moléculaires obtenues par la méthode de Feshbach.*  
"11<sup>eme</sup> Colloque Col. At. et Elect. Vol. 2 (Conferences)", pag. 68.  
Ed. U.E.R. Sciences Exactes et Naturelles (Metz) (1986). CLAVE=CL
52. AUTORES: A. Macías, R. Mendizábal, F. Pelayo, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Application of the stabilization method to the molecular states of  $LiHe^{3+}$ . Energies and radial couplings.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev., **A33**, 242 (1986). CLAVE=A
53. AUTORES: F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Molecular (Feshbach) treatment of charge exchange  $Li^{3+} + He$  collisions. I. Energies and couplings.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys., **84**, 5412 (1986). CLAVE=A
54. AUTORES: L.F. Errea, F. Martín, L. Méndez, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Molecular (Feshbach) treatment of charge exchange  $Li^{3+} + He$  collisions. II. Cross sections.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys., **84**, 5422 (1986). CLAVE=A
55. AUTORES: J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Polarization effects in small rings containing sulfur. A theoretical study of the structure of thiete.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM, **138**, 311 (1986). CLAVE=A
56. AUTORES: A. del Pozo, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Galilean invariance in the exponential model of atomic collisions.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. **A34**, 3723 (1986). CLAVE=A
57. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz, and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation energies and tautomerism of azoles. Basis set effects.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **90**, 5597 (1986). CLAVE=A

58. AUTORES: F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Single and double charge exchange transfer in  $Be^{4+} + He$  collisions. A molecular (Feshbach) approach.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. A **34**, 4675 (1986) CLAVE=A
59. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz, and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation of azines. An ab initio molecular orbital study.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **150**, 135 (1987). CLAVE=A
60. AUTORES: F. Borondo, F. Martín and M. Yáñez.  
TITULO: *Molecular treatment of the ion-pair formation reaction in  $H(1s) + H(1s)$  collisions.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. A, **35**, 60 (1987). CLAVE=A
61. AUTORES: R. Mendizábal, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Energies and radial couplings for the  $^1\Sigma$  and  $^3\Sigma$  states of  $NaHe^+$  quasimolecule.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **150**, 345 (1987). CLAVE=A
62. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *Binding of  $NH_4^+$  to azoles in the gas phase. A theoretical study of the  $N...H^+...N$  Ionic hydrogen bond.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem., **52**, 1713 (1987). CLAVE=A
63. AUTORES: F. Borondo, F. Martín and M. Yáñez.  
TITULO: *Adiabatic energies and radial couplings of the  $^3\Sigma_u^+$  states of  $H_2$ .*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **86**, 4982 (1987). CLAVE=A
64. AUTORES: F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Feshbach-type calculation of autoionizing states of the  $BeHe^{4+}$  quasimolecule.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys., **86**, 6927 (1987). CLAVE=A
65. AUTORES: M. Attinà, F. Cacace and M. Yáñez.  
TITULO: *Electrophilic aromatic nitration in the gas phase.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **109**, 5092 (1987). CLAVE=A
66. AUTORES: F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Feshbach resonant energies and widths in a pseudopotential approach.*  
REF. REVISTA: Europhys. Lett. **4**, 799 (1987). CLAVE=A
67. AUTORES: F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Feshbach and pseudopotential theories. A useful analogy.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **87**, 6635 (1987). CLAVE=A
68. AUTORES: F. Borondo, F. Martín and M. Yáñez.  
TITULO: *A molecular mechanism for hydrogen-hydrogen excitation collisions.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. A, **36**, 3630 (1987). CLAVE=A
69. AUTORES: A. Macías, F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Simple discretization method for autoionization widths. I. Theory.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. A **36**, 4179 (1987). CLAVE=A

70. AUTORES: A. Macías, F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Simple discretization method for autoionization widths. II. Atoms.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. A **36**, 4187 (1987). CLAVE=A
71. AUTORES: A. Macías, F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Simple discretization method for autoionization widths. III. Molecules.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. A **36**, 4203 (1987). CLAVE=A
72. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation of three membered ring heterocycles. An ab initio molecular orbital study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **91**, 6484 (1987). CLAVE=A
73. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Counterpoise estimates of the BSSE in the evaluation of protonation energies.*  
REF. REVISTA: Theoret. Chim. Acta **73**, 307 (1988). CLAVE=A
74. AUTORES: M. Alcamí, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Study of polarization effects in three-membered ring heterocycles.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **165**, 99 (1988). CLAVE=A
75. AUTORES: A. Macías, F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *A practical solution to the "Unknown normalization" problem.*  
REF. REVISTA: Int. J. Quant. Chem. **XXXIII**, 279 (1988). CLAVE=A
76. AUTORES: J. Catalán, J.L.G. de Paz, M. Yáñez, F. Amat-Guerri, R. Houriet, E. Rolli, R. Zehringer, P. Oelhafen, R.W. Taft, F. Anvia and J.H. Qian.  
TITULO: *Study of the gas-phase basicity of 1-methyl-azaindole, 7-methyl-7H-pyrrolo(2,3-b) pyridine and related compounds.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **110**, 2699 (1988). CLAVE=A
77. AUTORES: F. Martín, A. Riera, M. Yáñez and H. Bachau.  
TITULO: *Comparison of the conventional and pseudopotential Feshbach methods:  $N^{5+}(3l,3l')$   $^1S^e$  and  $^{1,3}P^o$  resonances.*  
REF. REVISTA: J. Phys. B **21**, 2261 (1988). CLAVE=A
78. AUTORES: F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Energies and widths of ( $1s^23l3l'$ ) resonant states of  $C^{2+}$ ,  $N^{5+}$ ,  $O^{4+}$  and  $N^{6+}$ .*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. A **38**, 1094 (1988). CLAVE=A
79. AUTORES: F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Continuum vs. discretized wavefunctions. The importance of being well normalized.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **149**, 85 (1988). CLAVE=A
80. AUTORES: A. Macías, F. Martín y M. Yáñez.  
TITULO: *El continuo electrónico. Estados resonantes.*  
Capítulo del Libro: "Nuevas Tendencias de la Química Teórica",  
Vol II, pag. 19, Ed. S. Fraga, C.S.I.C (Madrid), 1989. CLAVE=CL

81. AUTORES: M. Yáñez.  
TITULO: *Clusters en fase gaseosa*.  
Capítulo del Libro: "Modelos teóricos e informáticos en la Química actual".  
Ed. A. Riera. Editorial Centro de Estudios Ramón Areces, Madrid (1989).CLAVE=L
82. TITULO: *Ion Chemistry*.  
Editor: M. Yáñez.  
Editorial de la Universidad Autónoma de Madrid. Madrid. (1989). CLAVE=L
83. AUTORES: A. Macías, F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Atomic and molecular autoionizing states. A theoretical approach*.  
REF. REVISTA: J. Physique **50**, C1-37 (1989). CLAVE=A
84. AUTORES: A. Macías, O. Mó, A. Riera, M. Yáñez, H. Bachau, P. Galán and F. Martín.  
TITULO: *Extension of the conventional and pseudopotential Feshbach methods to the study of "two active electrons + core" resonance states. Application to  $C^{2+}$  ( $1s^2 3131'$ ) and  $Ne^{6+}$  ( $1s^2 3131'$ ) systems*.  
REF. REVISTA: J. Physique **50**, C1-99 (1989). CLAVE=A
85. AUTORES: M. Boudjema, P. Moretto-Capelle, A. Bordenave-Montesquieu, P. Benoit-Cattin, A. Gleizes, H. Bachau, P. Galan, F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Double capture into  $1s^2 3131'$  configurations in collisions between He-like ions ( $Z= 7, 8$  and  $10$ ) And helium target at  $10 qKeV, 10^\circ$* .  
REF. REVISTA: J. Phys. B **22**, L121 (1989). CLAVE=A
86. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A molecular orbital study of azole- $Li^+$  complexes*.  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **93**, 3929 (1989). CLAVE=A
87. AUTORES: F. Fernández-Lázaro, J. Mendoza, O. Mó, S. Rodríguez-Morgade, T. Torres, M. Yáñez, and J. Elguero.  
TITULO: *Phtalocyanine analogues. Part I. Synthesis, spectroscopy and theoretical study of 9,20-Dihydro-5,24:12,17-Diimino-7,10:19,22-dinitrilobenz (*f,p*)[1,2,4,9,11,12,14,19] octaazacycloeicosine and MNDO calculations on its related Hückel heteroannulene*.  
REF. REVISTA: J. Chem. Soc. Perkin 2, 797 (1989). CLAVE=A
88. AUTORES: M. Alcamí, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Nitrogen inversion barriers in three-membered rings. An ab initio molecular orbital study*.  
REF. REVISTA: J. Comput. Chem. **10**, 468 (1989). CLAVE=A
89. AUTORES: F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Core effects in atomic resonances. A comparison between  $1,3P^o$  ( $3131'$ ) states of He-like and Be-like systems*.  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **91**, 376 (1989). CLAVE=A
90. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *A MO analysis of the aromaticity of some nitrogen heterocyclic compounds*.  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **201**, 17 (1989). CLAVE=A
91. AUTORES: A. Macías, F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *A new method to calculate lifetimes of atomic and molecular autoionizing states*.



- REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **202**, 235 (1989). CLAVE=A
92. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz, M. Yáñez, I. Alkorta, J. Elguero, P. Goya and I. Rozas.  
TITULO: *A molecular orbital study of the conformation (inversion and rotational barriers) and electronic properties of sulfamide.*  
REF. REVISTA: Can. J. Chem. **67**, 2227 (1989). CLAVE=A
93. AUTORES: F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *A study of core effects in quasimolecular structure.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **205**, 43 (1990). CLAVE=A
94. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Enhanced  $Li^+$  binding energies of some azines: a molecular orbital study.*  
REF. REVISTA: Theoret. Chim. Acta **77**, 1,(1990). CLAVE=A
95. AUTORES: J. Elguero, P. Goya, A. Martínez, I. Rozas, O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *On the problem of the aromaticity of 1,2,6-Thiadiazine 1,1-Dioxides.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **3**, 470 (1990). CLAVE=A
96. AUTORES: J. Catalán, J.L.G. de Paz, M. Yáñez, R.M. Claramunt, C. López, J. Elguero, F. Anvia, J.H. Quian, M. Taagepera and R.W. Taft.  
TITULO: *An intrinsic basicity scale based on azoles: Theoretical and experimental study of methyldiazoles basicity.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **112**, 1303 (1990). CLAVE=A
97. AUTORES: H. Bachau, P. Galán, F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Resonance parameters and properties of berylliumlike doubly excited states:  $4\sigma Z\sigma 10$ .*  
REF. REVISTA: At. Data and Nuc. Data Tables **44**, 305, (1990). CLAVE=A
98. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, F. Anvia and R.W. Taft.  
TITULO: *An experimental and theoretical study of  $Li^+$  affinities of methyldiazoles.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **94**, 4796, (1990). CLAVE=A
99. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, J.L.M. Abboud and J. Elguero.  
TITULO: *Bond Activation by protonation in the gas phase.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **172**, 471 (1990). CLAVE=A
100. AUTORES: H. Bachau, P. Galán, F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Comment on "Calculations of energies of intra-shell doubly excited states of beryllium-like ions"*  
REF. REVISTA: J. Phys. B. **23**, L83, (1990). CLAVE=A
101. AUTORES: M. Alcamí, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A topological analysis of the bond activation in  $N_2H_4X^+$  and  $H_2O_2X^+$  ( $X=H, Li, Na, Al$ ) complexes.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Res. **1**, 119, (1990). CLAVE=A
102. TITULO: *Trends In Atomic and Molecular Physics.*  
Editor: M. Yáñez  
Editorial de la Universidad Autónoma de Madrid. (1991) CLAVE=L
103. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez and J.L.M. Abboud.

- TITULO: *Ab initio MO study of the halogen cation basicities of some organic bases.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **4**, 177, (1991). CLAVE=A
104. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Ab initio molecular orbital treatment of hydroxylamine- $X^+$ -water and hydroxylamine- $X^+$ -ammonia ( $X=H, Li$ ) clusters.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. **151**, 21, (1991). CLAVE=A
105. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *An ab initio molecular orbital study of the structure, energetics and bond activations of  $Al^+$  complexes.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **234**, 357 (1991). CLAVE=A
106. AUTORES: H. Bachau, F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Resonance parameters and properties of heliumlike doubly excited states:  $2 \square Z \square 10$ .*  
REF. REVISTA: Atomic Data and Nuclear Data Tables. **48**, 167, (1991).CLAVE=A
107. AUTORES: F. Martín, H. Bachau, P. Galán, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Electron correlation properties of doubly excited states. Berylliumlike vs. heliumlike systems.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **94**, 5011 (1991). CLAVE=A
108. AUTORES: A. Macías, F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Atomic Doubly Excited States.*  
Capítulo del Libro: "Computational Chemistry: Structure, Interactions and Reactivity.  
Editor: S. Fraga, Ed. Elsevier, Amsterdam, 1992. CLAVE=CL
109. AUTORES: O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical approach to ion-molecule interactions in the gas-phase.*  
Capítulo del Libro: "Trends in Physical Chemistry". Vol. 3, 81 (1992) CLAVE=CL
110. AUTORES: J.L.M. Abboud, M. Yáñez, J. Elguero, D. Liotard, M. Esseffar, M. El-Mouhtadi and R.W. Taft.  
TITULO: *A comparative study of lithium cation affinities of alcohols and ethers and proton affinities of Lithium alkoxides.*  
REF. REVISTA: New J. Chem. **16**, 739 (1992). CLAVE=A
111. AUTORES: M. Esseffar, M. El-Mouhtadi, V. López and M. Yáñez.  
TITULO: *A topological analysis of bond activations in alcohols and fluoroalkanes by protonation in the gas phase.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **255**, 393 (1992). CLAVE=A
112. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Enhanced  $Al^+$  binding energies of some azoles. A theoretical study of azole- $X^+$  ( $X=Na, K, Al$ ) complexes.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **96**, 3022 (1992). CLAVE=A
113. AUTORES: J.L.M. Abboud, T. Cañada, H. Homán, R. Notario, C. Cativiela, M.D. Díaz de Villegas, M.C. Bordejé, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas phase basicities of  $\square$ -Lactams and azetidines. Cyclation effects. An experimental and Theoretical study.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc., **114**, 4728, (1992). CLAVE=A

114. AUTORES: A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *A G1 ab initio MO study of the distonic ions  $H_2C-O-Si^+$  and their isomers.*  
 REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett., **197**, 581, (1992). CLAVE=A
115. AUTORES: J. Tortajada, A. Total, J.P. Morizur, M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Experimental and theoretical study of  $C_2H_4OAl^+$  complexes in the gas phase.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem., **96**, 8309, (1992). CLAVE=A
116. AUTORES: A.L. Llamas-Saiz, C. Foces-Foces, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
 TITULO: *Nature of the hydrogen bond: crystallographic vs. theoretical description of the  $O-H...N(sp^2)$  hydrogen bond.*  
 REF. REVISTA: Acta Cryst. **B48**, 700, (1992). CLAVE=A
117. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
 TITULO: *Cooperative (nonpairwise) effects in water trimers: an ab initio molecular orbital study.*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Phys., **97**, 6628 (1992). CLAVE=A
118. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, A. Total, J. Tortajada and J.P. Morizur.  
 TITULO: *Structures and stabilities of  $[C_2H_5NAl]^+$  molecular ions. An ab initio molecular orbital study.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **97**, 5553 (1993) CLAVE=A
119. AUTORES: M.C. Bordejé, O. Mó, M. Yáñez, M. Herreros and J.L.M. Abboud.  
 TITULO: *Cyclization effects on the gas-phase basicities of esters and ethers. An experimental and MO study.*  
 REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **115**, 7389 (1993). CLAVE=A
120. AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *G2 ab initio Calculations on the Thermochemistry of  $[P,N,H_n]$  ( $n=0,2$ ) and  $[P,N,H_n]^+$  ( $n=0,3$ ) species and on the potential energy surfaces of  $[P,N,H_3]^+$  singlet and triplet state cations.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **97**, 6607 (1993). CLAVE=A
121. AUTORES: A. Luna and M. Yáñez.  
 TITULO: *Thermochemistry of the Reaction of  $Si^+$  ( $^2P$ ) with methanol. A G2 Molecular Orbital Study.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **97**, 10659 (1993). CLAVE=A
122. AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *High level ab initio calculations on the structures and relative stabilities of  $[O,P,H]$  systems and Their cations.*  
 REF. REVISTA: Chem. Phys. Let. **209**, 557 (1993). CLAVE=A
123. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz, M. Yáñez, M. Esseffar, W. Bouab, E. Ballesteros, M. Herreros, H. Homan, C. Lopez-Mardomingo, R. Notario and J.L.M. Abboud.  
 TITULO: *Thiocarbonyl vs. Carbonyl Compounds: A Comparison of Intrinsic Reactivities.*  
 REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **115**, 12468 (1993) CLAVE=A
124. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Stabilization of nitrogen containing three-membered rings by  $H^+$  and  $Li^+$  association in the gas-phase.*  
 REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **115**, 11074 (1993) CLAVE=A

125. AUTORES: M. Yáñez.  
TITULO: *Visión actual de algunos problemas de contaminación.*  
Capítulo del Libro: "Aspectos Relevantes de la Química Actual". pg.11. Ediciones de la UAM (1993).  
CLAVE=CL
126. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, I. Rozas and J. Elguero  
TITULO: *Structure, Vibrational Frequencies and Thermodynamic Properties of Hydrogen Peroxide Dimers. An Ab Initio Molecular Orbital Study.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **100**, 2871 (1994)  
CLAVE=A
127. AUTORES: A. Tipping, M. V. Roux, M. P. Jiménez, J. Elguero, M. Esseffar, M. Yáñez, E. Ballesteros and J.-L.M. Abboud  
TITULO: *Structure, Basicity and Thermodynamical Properties of 3,5-bis-trifluoromethyl-1,2,4-triazole with regards to 1,2,4-triazole: An Experimental and Theoretical Study.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **59**, 1039 (1994)  
CLAVE=A
128. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, I. Rozas and J. Elguero  
TITULO: *Structure, Vibrational Frequencies and Thermodynamic Properties of Hydrogen Peroxide-Water Dimers. An Ab Initio Molecular Orbital Study.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Let. **219**, 45 (1994)  
CLAVE=A
129. AUTORES: J.-L.G. Abboud, R. Notario, E. Ballesteros, M. Herreros, O. Mó, M. Yáñez, J. Elguero, G.Boyer and R. Claramunt.  
TITULO: *Dissociative Attachment of Protons to 1-Fluoro- and 1-Chloro-Adamantane in the Gas-phase.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **116**, 2486 (1994)  
CLAVE=A
130. AUTORES: A. Martínez, J. Elguero, O.Mó and M. Yáñez  
TITULO: *An ab initio study of the azoniaspiro[2.2]pentane cation (azirineaziridinium ion).*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **115**, 45 (1994)  
CLAVE=A
131. AUTORES: A. Luna, M. Manuel, O.Mó and M. Yáñez  
TITULO: *G2 ab initio Calculations on the F<sup>+</sup> + OH<sub>2</sub> singlet and triplet potential energy surfaces.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **98**, 6980 (1994)  
CLAVE=A
132. AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Thermochemistry of the Reactions of P<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P) and P<sup>+</sup>(<sup>1</sup>D) with Formaldehyde. A G2 Molecular Orbital Study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **98**, 8679 (1994)  
CLAVE=A
133. AUTORES: A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A topological description of Si<sup>+</sup> and C<sup>+</sup> adducts of formaldehyde.*  
REF. REVISTA: Anales de Física **90**, 205 (1994)  
CLAVE=A
134. AUTORES: M.C. Bordejé, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Bond activation of four membered cycles by protonation in the gas phase.*  
REF. REVISTA: Anales de Física **90**, 209 (1994)  
CLAVE=A
135. AUTORES: M. Esseffar, O.Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Is the Depletion of Ozone by HSO an Exothermic Process?.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **101**, 2175 (1994)  
CLAVE=A

136. AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Thermochemistry of the Reactions of  $PH_2^+(^3B_1)$  with CO. A G2 Molecular Orbital Study.*  
 REF. REVISTA: Chem. Phys. Let. **223**, 240 (1994) CLAVE=A
137. AUTORES: A. Luna, O.Mó and M. Yáñez  
 TITULO: *Gas-Phase reactions of  $C^+(^2P)$  and  $Si^+(^2P)$  with oxygen bases. A G2 ab initio molecular orbital study.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **310**, 135 (1994) CLAVE=A
138. AUTORES: O.Mó, M. Yáñez and J. Elguero  
 TITULO: *Cooperative Effects in the Cyclic Trimer of Methanol. An ab initio Molecular Orbital Study.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **314**, 73 (1994) CLAVE=A
139. AUTORES: O.Mó, M. Yáñez, M. Esseffar and J.L.M. Abboud  
 TITULO: *The Topological Analysis of the Electronic Charge Densities as a Tool to Study Protonation effects on Thiocarbonyl Compounds.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **7**, 685 (1994) CLAVE=A
140. AUTORES: J. Tortajada, E. León, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Ab initio calculations on Formamidine- $X^+$  ( $X = H, Li, Na, Mg, \text{ and } Al$ ) complexes.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **98**, 12919 (1994). CLAVE=A
141. AUTORES: A.L. Llamas, C. Foces-Foces, O.Mó, M. Yáñez E. Elguero and J. Elguero  
 TITULO: *The Geometry of Pyrazole: a test for ab initio calculations.*  
 REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **16**, 263 (1995) CLAVE=A
142. AUTORES: S. Blanco, J.C. López, J.L. Alonso, O.Mó, M. Yáñez, N. Jagerovic and J.Elguero.  
 TITULO: *Microwave Spectra and ab initio calculations of 1-Nitropyrazole.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. **344**, 241 (1995) CLAVE=A
143. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M. Eckert-Maksic and Z.B. Maksic.  
 TITULO: *Bent Bonds in Benzocyclopropenes and their fluorinated derivatives.*  
 REF. REVISTA: J. Org. Chem. **60**, 1638 (1995). CLAVE=A
144. AUTORES: O.Mó, M. Yáñez, A.L. Llamas-Saiz, C. Foces-Foces and J. Elguero  
 TITULO: *Ab initio study of the effect of N-substituents on properties of pyrazoles.*  
 REF. REVISTA: Tetrahedron **51**, 7045 (1995) CLAVE=A
145. AUTORES: M. Alcamí, I.L. Cooper, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Potential energy surfaces of the  $C_{2v}$  and  $D_{3h}$  ozone complexes with  $Li^+$ .*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **103**, 253 (1995) CLAVE=A
- 146.- AUTORES: J. Tortajada, E. León, J.P. Morizur, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Potential energy surface of protonated formamide and of formamide- $X^+$  ( $X = Li, Na, Mg, \text{ and } Al$ ) complexes.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **99**, 13890 (1995). CLAVE=A
- 147.- AUTORES: F. Ijjaali, O. Mó, M. Yáñez and J.-L.G. Abboud.  
 TITULO: *Hybridization effects on the intrinsic basicities of phosphorus and nitrogen containing bases.*

- REF. REVISTA: J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **338**, 225 (1995). CLAVE=A
- 148.- AUTORES: G. Bouchoux, D. Drancourt, D. Leblanc, M. Yáñez and O. Mó.  
TITULO: *Gas-phase basicities of lactones*.  
REF. REVISTA: New. J. Chem. **19**, 1243 (1995). CLAVE=A
- 149.- AUTORES: A.I. González and M. Yáñez.  
TITULO: *Energetics of addition versus insertion mechanisms in the  $Si^+(^2P) + HCOOH$  reaction*.  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **248**, 102 (1996). CLAVE=A
150. AUTORES: J.-L.G. Abboud, M. Herreros, R. Notario, M. Esseffar, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *A New Bond from an Old Molecule: Formation, Stability and Structure of  $P_4H^+$* .  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **118**, 1126 (1996) CLAVE=A
- 151 AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *High-level ab initio calculations on  $CH_2(^2A_1)$  with  $PO(^2\Pi)$  reactions*.  
REF. REVISTA: Int. J. Quant. Chem. **57**, 559 (1996). CLAVE=A
- 152.- AUTORES: A.I. González, O. Mó, M. Yáñez, E. León, J. Tortajada, J.P. Morizur, I. Leito, P.C. Maria and J.F. Gal.  
TITULO: *Basicity of Acetamidine. Experimental and Theoretical Study*.  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **100**, 10490 (1996) CLAVE=A
- 153.- AUTORES: O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The Theory of Atoms in Molecules as a Tool to Investigate the Reactivity of Tetraphosphacubane*  
REF. REVISTA: Canadian Journal of Chem. **74**, 901 (1996) CLAVE=A
154. AUTORES: M. T. Molina, W. Bouab, M. Esseffar, M. Herreros, R. Notario, J.-L.G. Abboud, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *The Intrinsic Acidity and Basicity of 2,2,2-Trifluoroethanethiol. The First Experimental and Theoretical Study*.  
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **61**, 5485 (1996) CLAVE=A
155. AUTORES: J.-L.G. Abboud, M. Herreros, R. Notario, O. Mó, M. Yáñez, M. Regitz and J. Elguero.  
TITULO: *Tetraphosphacubane: An unexpectedly strong base in the gas-phase*.  
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **61**, 7813 (1996) CLAVE=A
- 156.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Modeling Intrinsic Basicities: The Use of the Electrostatic Potentials and the Atoms-in-Molecules theory*.  
REF. REVISTA: Theoretical and Computational Chemistry Series. Vol 3. Molecular Electrostatic Potentials: Concepts and Applications. Ed. J.S. Murray and K. Sen. Elsevier Amsterdam 1996. CLAVE=CL
- 157.- AUTORES: B. Amekraz, J. Tortajada, J.P. Morizur, A.I. González, O. Mó, M. Yáñez, I. Leito, P.C. Maria and J.F. Gal.  
TITULO: *Experimental and Theoretical Study of the Basicity of Guanidine. The Performance of DFT calculations vs. high level ab initio approaches*.  
REF. REVISTA: New. J. of Chem. **20**, 1011 (1996) CLAVE=A
- 158.- AUTORES: M.C. Bordejé, O. Mó and M. Yáñez.

- TITULO: *Binding Energies of Metal Monocations to  $\alpha$ -lactones and  $\alpha$ -lactams. A theoretical Study of cyclization effects.*  
 REF. REVISTA: Structural Chem. **7**, 309 (1996). CLAVE=A
- 159.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *High level ab initio calculations on the 1,2-dithioglyoxal/1,2-dithiete isomerism.*  
 REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **263**, 407 (1996). CLAVE=A
- 160.- AUTORES: L. González, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
 TITULO: *Cooperative Effects in Water Trimers. The Performance of Density Functional Approaches.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **371**, 1 (1996). CLAVE=A
- 161.- AUTORES: B. Amekraz, J. Tortajada, J.P. Morizur, A.I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Acetamidine-Mg<sup>+</sup>(<sup>2</sup>S) complexes. The performance of different exchange and correlation density functionals approaches.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **371**, 313 (1996) CLAVE=A
- 162.- AUTORES: M. Manuel, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *A G2 molecular orbital study of the reactions of water with Cl<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P) and Cl<sup>+</sup>(<sup>1</sup>D).*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **101**, 1722 (1997). CLAVE=A
- 163.- AUTORES: E. Leon, B. Amekraz, J. Tortajada, J.P. Morizur, A.I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Acetamidine-X<sup>+</sup> and Guanidine-X<sup>+</sup> (X = Li, Na, Mg, Al) Complexes in the gas-phase. A Theoretical Study.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem.. **101**, 2489 (1997) CLAVE=A
164. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M. Esseffar, A. El-Hammadi, M. Herreros, R. Notario and J.L.G. Abboud.  
 TITULO: *The role of chelation and resonance on the intrinsic acidity and basicity of tropolone.*  
 REF. REVISTA: J. Org. Chem. **62**, 3200 (1997) CLAVE=A
- 165- AUTORES: M.T. Molina, M. Yáñez, O. Mó, R. Notario and J.L.G. Abboud.  
 TITULO: *The Thiocarbonyl Group.*  
 REF. REVISTA: "The Chemistry of Double-Bonded Functional Groups". Ed. S. Patai  
 John Wiley (1997), pg 1355 CLAVE=CL
- 166.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *High-level ab initio vs. DFT calculations on (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O complexes as prototypes of multiple hydrogen bond systems.*  
 REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **18**, 1124 (1997). CLAVE=A
- 167.- AUTORES: M. Manuel, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Thermochemistry of the reactions of F<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P) and F<sup>+</sup>(<sup>1</sup>D) with hydrogen sulfide. A molecular orbital study.*  
 REF. REVISTA: Mol. Phys. **91**, 503 (1997). CLAVE=A
- 168- AUTORES: A. Luna, B. Amekraz, J.P. Morizur, J. Tortajada, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Reaction between Guanidine and Cu<sup>+</sup> in the gas-phase. An Experimental and Theoretical Study.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem.. **101**, 5931 (1997) CLAVE=A

169. AUTORES: O.Mó, M. Yáñez, and J. Elguero  
 TITULO: *Study of the methanol trimer potential energy surface.*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **107**, 3592 (1997) CLAVE=A
- 170.- AUTORES: M. Manuel, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Structure and Stability of  $[H_2,Cl,O]^+$  triplet state cations. A G2 ab initio molecular orbital study.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. **398/399**, 417 (1997). CLAVE=A
- 171.- AUTORES: A.I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Structure and stability of  $[H_2O_2]^+$  Doublet and Quartet State Cations. An ab initio Molecular Orbital Study.*  
 REF. REVISTA: Anales de Química (International Edition) **93**, 310 (1997). CLAVE=A
172. AUTORES: H. Homan, M. Herreros, R. Notario, J.-L.G. Abboud, M. Esseffar, O. Mó, M. Yáñez, C. Foces-Foces, A. Ramos-Gallardo, M. Martinez-Ripoll, A. Vegas, M.T. Molina, J. Casanovas, C. Turrión, P. Jimenez, M.V. Roux.,  
 TITULO: *Strain effects in protonated carbonyl compounds. An experimental and ab initio, treatment of acyclic carboxamides and ketones.*  
 REF. REVISTA: J. Org. Chem. **62**, 8503 (1997) CLAVE=A
- 173.- AUTORES: G. Bouchoux, D. Leblanc, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Structural effects on the intrinsic basicities of  $\alpha,\beta$ -unsaturated lactones and ketones.*  
 REF. REVISTA: J. Org. Chem. **62**, 8439 (1997). CLAVE=A
174. AUTORES: J.M. Orza, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
 TITULO: *Vibrational Spectra of N-Methylpyrazole: An experimental and theoretical study.*  
 REF. REVISTA: Spectroquímica Acta A **53**, 1383 (1997) CLAVE=A
- 175.- AUTORES: A.I. González, D.C. Clary, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Calculations of rate constants for reactions of first and second row cations.*  
 REF. REVISTA: Theoretical Chemistry Accounts **98**, 33 (1997). CLAVE=A
- 176.- AUTORES: J.C. Guillemin, M. Decouzon, PC Maria, JF Gal, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Gas-Phase basicities and acidities of ethyl-, vinyl- and ethynylarsines. An Experimental and Theoretical Study.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **101**, 9525 (1997). CLAVE=A
- 177.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *High-level ab initio calculations on the intramolecular hydrogen bond in thiomalonaldehyde.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **101**, 9710 (1997). CLAVE=A
- 178.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Ionic Intrinsic Reactivities of Strained Systems*  
 REF. REVISTA: Recent Research Developments in Physical Chemistry (1997) CLAVE=CL
- 179.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Proton Transfer in Dissociative Protonation Processes.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 1356 (1998). CLAVE=A
- 180- AUTORES: A. Luna, B. Amekraz, J. Tortajada, J.P. Morizur, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.



- TITULO: *Modeling the interactions between peptide functions and Cu(I): Formamide Cu<sup>+</sup> reaction in the gas-phase.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **120**, 5411 (1998) CLAVE=A
- 181.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *G2 ab initio Calculations on three-membered rings. The role of Hydrogen Atoms*  
REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **19**, 1072 (1998) CLAVE=A
- 182.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Ab initio and density functional theory calculations on the protonated species of As<sub>4</sub> clusters.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **108**, 8957 (1998) CLAVE=A
- 183.- AUTORES: A. Luna, J.P. Morizur, J. Tortajada, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The role of Cu<sup>+</sup> association on the formamide → formamidic acid → (aminohydroxy) carbene isomerization in the gas-phase.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 4652 (1998) CLAVE=A
- 184.- AUTORES: M. Yáñez.  
TITULO: *Química Iónica en Fase Gas. ¿Una nueva Química?*  
REF. REVISTA: Temas Actuales de la Química Cuántica. Cap.4 (1998). CLAVE=CL
- 185.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *High level ab initio and density functional theory studies on methanol-water dimers and cyclic methanol(water)<sub>2</sub> trimer.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **109**, 139 (1998) CLAVE=A
- 186.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Stabilization of zwitterionic forms of three-membered rings by cationization in the gas phase*  
REF. REVISTA: J. Mol Struct. (THEOCHEM) **433**, 217 (1998) CLAVE=A
- 187.- AUTORES: L. González, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero.  
TITULO: *Very strong Hydrogen Bonds in Neutral Molecules: The Phosphinic Acid Dimers*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **109**, 2685 (1998) CLAVE=A
- 188.- AUTORES: M. Yáñez.  
TITULO: *Are phosphatetrahedrane and diphosphatetrahedrane phosphorus or carbon bases?*  
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **11**, 678 (1998). CLAVE=A
- 189.- AUTORES: J.-L.G. Abboud, M. Esseffar, M. Herreros, O. Mó, M.T. Molina, R. Notario, and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation of S<sub>4</sub>, S<sub>6</sub> and S<sub>8</sub> sulfur cycles. A Quantitative study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 7996 (1998) CLAVE=A
- 190.- AUTORES: O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Density Functional Theory Calculations on Hydrogen-Bonded Tropolone-(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub> Clusters.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 8174 (1998) CLAVE=A
- 191.- AUTORES: M. Begtrup, T. Balle, R.M. Claramunt, D. Sanz, JA. Jimenez, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *GIAO ab initio calculations of nuclear shieldings of monosubstituted benzenes and n-substituted pyrazoles.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **453**, 255 (1998) CLAVE=A

- 192.- AUTORES: G. Bouchoux, JF Gal, PC Maria, J.E.Szulejko, T.B. McMahon, J. Tortajada, A. Luna, M. Yáñez and O. Mó  
 TITULO: *Gas-Phase Basicities of Acid Anhydrides.*  
 REF. REVISTA: J. Phys.Chem. **102**, 9183 (1998). CLAVE=A
193. AUTORES: L. Infantes, C. Foces-Foces, P. Cabildo, R.M. Claramunt, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
 TITULO: *The structure of aminoazoles and its relationship with aromaticity. crystal and molecular structure of two polymorphic forms of 4-aminopyrazole.*  
 REF. REVISTA: Heterocycles **49**,157 (1998) CLAVE=A
- 194.- AUTORES: , M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, A. Luna, J. Tortajada and J.P. Morizur.  
 TITULO: *Exploring the potential energy surface of the association of Cu<sup>+</sup> to oxaziridine, nitrosomethane and formaldoxime.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 10120 (1998) CLAVE=A
- 195.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Ionic intrinsic reactivities of strained systems*  
 REF. REVISTA: Recent Res. Devel. in Physical Chemistry **2**, 827 (1998) CLAVE=CL
- 196.- AUTORES: A. I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Exploring the Potential Energy Surfaces of the Reactions of O<sup>+</sup>(<sup>4</sup>S) and O<sup>+</sup>(<sup>4</sup>S) with ammonia*  
 REF. REVISTA: J. Mass. Spectr. Ion Processes. **179/180**, 77 (1998) CLAVE=A
- 197.- AUTORES: M. Manuel, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *The reactions of Cl<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P) and Cl<sup>+</sup>(<sup>1</sup>D) with hydrogen sulfide. A G2 molecular orbital study.*  
 REF. REVISTA: Mol. Phys. **96**, 231 (1999). CLAVE=A
- 198.- AUTORES: Z.B. Maksic , M. Eckert-Maksic, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *The Mills-Nixon Effect: Fallacies, Facts and Chemical Relevance.*  
 REF. REVISTA: Theoretical and Computational Chemistry vol 6. Pauling's Legacy. Modern Modeling of the Chemical Bonding. Elsevier. Amsterdam (1999) CLAVE=CL
- 199.- AUTORES: A. I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *A gas-phase basicity scale for selenocarbonyl compounds based on high-level ab initio and density functional theory calculations*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **103**, 1662 (1999) CLAVE=A
- 200.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Substituent Effects on the Strength of the Intramolecular Hydrogen Bond of Thiomalonaldehyde.*  
 REF. REVISTA: J. Org. Chem. **64**, 2314 (1999) CLAVE=A
- 201.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M. Decouzon, PC Maria, JF Gal and J.C. Guillemin  
 TITULO: *Gas-Phase basicities and acidities trends in  $\alpha,\beta$ -unsaturated amines,phosphines and arsines.*  
 REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **121**, 4653 (1999). CLAVE=A
- 202.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez and I.L. Cooper.  
 TITULO: *Ab initio Molecular Orbital Study of XO<sub>2</sub><sup>+</sup> (X= F, Cl, Br, I) Systems.*

- REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **103**, 2793 (1999) CLAVE=A
- 203.- AUTORES: G. Bouchoux, M. Yáñez and O. Mó  
TITULO: *Isomerization and Dissociation Processes of Protonated Benzene and Protonated Fulvene in the Gas-Phase.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectr. **185/186/187**, 241 (1999). CLAVE=A
- 204.- AUTORES: M. Alcamí, A.I. González, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Performance of Density Functional Theory methods for the treatment of metal-ligand dications.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **307**, 244 (1999) CLAVE=A
- 205.- AUTORES: A. I. González, A. Luna and M. Yáñez.  
TITULO: *High-Level ab initio calculations on the gas-phase reactions between C<sup>+</sup>(<sup>2</sup>P) and formic acid.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **103**, 4543 (1999) CLAVE=A
- 206.- AUTORES: L. González, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Density functional theory study on ethanol dimers and cyclic ethanol trimers*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **111**, 3855 (1999) CLAVE=A
- 207.- AUTORES: J.-L.M. Abboud, R. Notario, M. Yáñez, O. Mó, R. Flammang, N. Jagerovic, I. Alkorta and J. Elguero  
TITULO: *4-Nitropyrazole: A Nitrogen or Oxygen base in the gas phase?*  
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **12**, 787 (1999) CLAVE=A
- 208.- AUTORES: J.A. Jiménez, R. Claramunt, O. Mó, M. Yáñez, F. Wehrmann, G. Buntkowsky, H.H. Limbach, R. Goddard and J. Elguero.  
TITULO: *The structure of N-aminopyrazole in the solid state and in solution: an experimental and computational study.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **1**, 5113 (1999)
- 209.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M.V. Roux, P. Jiménez, J.Z. Dávalos, M.A.V. Ribeiro da Silva, M.D.M.C. Ribeiro da Silva, M.A.R. Matos, L.M.P.F. Amaral, A. Sánchez-Migallón, P. Cabildo, R. Claramunt, J. Elguero, J.E. Liebman.  
TITULO: *Enthalpies of Formation of N-Substituted Pyrazoles and Imidazoles*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **103**, 9336 (1999). CLAVE=A
- 210.- AUTORES: A.I. González, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *The structure and stability of Sb<sub>4</sub>H<sup>+</sup> clusters. The importance of non-classical structures.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **112**, 2258 (2000) CLAVE=A
- 211.- AUTORES: A. Luna, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Cu<sup>+</sup> binding energies. Dramatic failure of the G2 method vs. Good performance of the B3LYP approach.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **320**, 129 (2000) CLAVE=A
- 212.- AUTORES: J.L-M. Abboud, I. Alkorta, J.Z. Dávalos, J.F. Gal, M. Herreros, P.C. Maria, O. Mó, M.T. Molina, R. Notario and M. Yáñez.  
TITULO: *The P<sub>4</sub>...Li<sup>+</sup> Ion in the Gas Phase: A Planetary System.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **122**, 4451 (2000) CLAVE=A

- 213.- AUTORES: A. Luna, B. Amekraz, J.P. Morizur, J. Tortajada, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Reactions of Urea with Cu<sup>+</sup> in the Gas Phase: An Experimental and Theoretical Study*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **104**, 3132 (2000) CLAVE=A
- 214.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, and I. Cooper.  
 TITULO: *The Performance of density functional theory in challenging cases: Halogen oxides.*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **112**, 6131 (2000) CLAVE=A
- 215.- AUTORES: M. Lamsabhi, M. Alcamí, O. Mó, W. Bouab, M. Esseffar, J.L-M. Abboud, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Are the Thiouracils Sulfur Bases in the Gas-Phase?.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **104**, 5122 (2000) CLAVE=A
- 216.- AUTORES: G. Bouchoux, B. Gaudin, D. Leblanc. M. Yáñez and O. Mó.  
 TITULO: *Is ionized cyclopropylamine cyclic?.*  
 REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectr. **199**, 59 (2000) CLAVE=A
- 217.- AUTORES: A. Luna, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Cu<sup>+</sup> reactivity trends in sp, sp<sup>2</sup> and sp<sup>3</sup> nitrogen, phosphorus and arsenic containing bases.*  
 REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectr. **201**, 215 (2000) CLAVE=A
- 218.- AUTORES: M. Esseffar, W. Bouab, A. Lamsabhi, J.L.M. Abboud, R. Notario, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Thiocarbonyl-I<sub>2</sub> Molecular Complexes. An Experimental and Theoretical Study.*  
 REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **122**, 2300 (2000) CLAVE=A
- 219.- AUTORES: F. Fernández-Morata, M. Alcamí, L. González and M. Yáñez.  
 TITULO: *Thermochemistry of the Reactions F<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P, <sup>1</sup>D) + PH<sub>3</sub> in the Gas Phase*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **104**, 8075 (2000) CLAVE=A
- 220.- AUTORES: M.C. Oliveira, M.A. Almoester-Ferreira, O. Mó, M. Yáñez and H. Audier.  
 TITULO: *Exploring the Potential Energy Surface Associated with the HBr Loss from 2-Bromobutane Radical Cation*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **104**, 9287 (2000) CLAVE=A
- 221.- AUTORES: O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: ***Enlace Químico y Estructura Molecular***  
 REF. J.M. Bosch Editor. Barcelona 2000. CLAVE=L
- 222.- AUTORES: F. Ijjaali, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *A Theoretical Study of the Reaction between N<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P) and Formaldehyde and Related Processes in the Gas Phase.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **104**, 11132 (2000) CLAVE=A
- 223.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Protonation and Deprotonation of Thiomalonaldehyde. The role of the Intramolecular Hydrogen Bond*  
 REF. REVISTA: "Recent Theoretical and Experimental Advances in Hydrogen Bonded Clusters". Ed. S.S. Xantheas. Kluwer Academic Pub. (2000). The Netherlands. CLAVE=CL
- 224.- AUTORES: F. Ijjaali, M. El-Mouhtadi, M. Esseffar, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.

- TITULO: *The role of the spin-forbidden processes in  $N^+(\textit{P}) + \text{NH}_3$  reactions in the gas phase.*  
 REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **3**, 179 (2001) CLAVE=A
- 225.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, W. Bouab, M. Esseffar, M. Alcamí, M. Yáñez and J.L.M. Abboud.  
 TITULO: *Basicity of some carbonyl compounds towards Iodine monochloride: Experimental and theoretical study.*  
 REVISTA: New Journal of Chemistry **25**, 509 (2001) CLAVE=A
- 226.- AUTORES: A. Benidar, R. Le Doucen, J.C. Guillemin.O. Mó, M. Yáñez.  
 TITULO: *Vibrational Spectra, DFT calculations and Assignments of the syn- and the gauche forms of vinylphosphine.*  
 REVISTA: J. Mol. Spectrosc. **205**, 252 (2001) CLAVE=A
- 227.- AUTORES: F. Ijjaali, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Thermochemistry of the reactions between  $\text{CN}^+$  and  $\text{H}_2\text{O}$  in the gas phase.*  
 REVISTA: Mol. Phys. **99**, 1129 (2001) CLAVE=A
- 228.- AUTORES: J.F. Gal, M. Decouzon, P.C. Maria, A.I. González, O. Mó, M. Yáñez, S. El Chaouch and J.C. Guillemin.  
 TITULO: *Acidity trends in  $\alpha,\beta$ -Unsaturated alkanes, silanes, germanes and stannanes.*  
 REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **123**, 6353 (2001) CLAVE=A
- 229.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, L. González and J. Elguero.  
 TITULO: *Spontaneous Self-ionization in the Gas Phase. A Theoretical Prediction.*  
 REF. REVISTA: Chem. Phys. Chem. **7**, 465 (2001) CLAVE=A
- 230.- AUTORES: I. Alkorta, I. Rozas, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero.  
 TITULO: *Hydrogen bond vs. proton transfer between neutral molecules in the gas phase*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **105**, 7481 (2001) CLAVE=A
- 231.- AUTORES: M.C. Oliveira, M.A. Almoester-Ferreira, O. Mó, M. Yáñez, and H. Audier.  
 TITULO: *Reaction Mechanisms for the HBr Loss from 2-Bromobutane Radical Cations.*  
 REF. REVISTA: Adv. Mass Spectrom. **15**, 753 (2001) Ed. E. Gelpi. John Wiley & Sons. New York  
 CLAVE=CL
- 232.- AUTORES: M. Yáñez.  
 TITULO: *Some useful theoretical tools to investigate Ion-Molecule reactions in the gas phase.*  
 REF. REVISTA: Adv. Mass Spectrom. **15**, 333 (2001) Ed. E. Gelpi. John Wiley & Sons. New York.  
 CLAVE=CL
- 233.- AUTORES: A. Hoz, I. Almena, C. Foces-Foces, M. Yáñez, O. Mó, M. Alcamí, N. Jagerovic and J. Elguero  
 TITULO: *Synthesis, X-ray structure and properties of 2-(1'-pyridin-2'-one)benzimidazole.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. B **105**, 12759 (2001) CLAVE=A
- 234.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez  
 TITULO: *Computational Chemistry. A useful (some times mandatory) tool in mass spectrometry Studies.*  
 REF. REVISTA: Mass Spectrom. Rev. **20**, 195-245 (2001) CLAVE=A

- 235.- AUTORES: F. Ijjaali, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *High level ab initio study of the  $N^+(\overset{3}{P})+ SH_2$  reactions in the gas phase. The role of spin forbidden pathways.*  
REVISTA: Int. J. Quantum Chem. **86**, 130 (2002) CLAVE=A
- 236.- AUTORES: L. Boutreau, J. Tortajada, A. Luna, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Perturbation of the intramolecular hydrogen bonds of Glucose by  $Cu^+$  association.*  
REVISTA: Int. J. Quantum Chem. **86**, 138 (2002) CLAVE=A
- 237.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Modeling Intrinsic Basicities and Acidities*  
REF. REVISTA: J. Phys Org. Chem. (Rev. Article) **15**, 174 (2002) CLAVE=A
- 238.- AUTORES: M. Alcamí, A. Luna, O. Mó, M. Yáñez, L. Boutreau and J. Tortajada  
TITULO: *An Experimental and Theoretical Investigation of the Reactions between Glucose and  $Cu^+$  in the Gas Phase.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 2641 (2002) CLAVE=A
- 239.- AUTORES: S. El Chaouch, J.C.Guillemin, J.F. Gal, P.C. Maria, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas-Phase acidity of primary  $\alpha,\beta$ -unsaturated germanes and stannanes.*  
REF. REVISTA: *Main Group Metal Chemistry*, **25**, 85 (2002). CLAVE=A
- 240.- AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *Competition between  $X...H...Y$  intramolecular hydrogen bonds and  $X...Y$  ( $X=O, S$ ;  $Y=Se, Te$ ) chalcogen-chalcogen interactions.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 4661 (2002) CLAVE=A
- 241.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, I. Alkorta and J. Elguero.  
TITULO: *Triaziridine and Tetrazetidine vs. Cyclic Water trimer and tetramer: A computational approach to the relationship between Molecular and Supramolecular Conformational Analysis.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **4**, 2123 (2002) CLAVE=A
- 242.- AUTORES: A. Luna, M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, and J. Tortajada  
TITULO: *A theoretical study of the interaction between  $Ni^+$  and small oxygen- and nitrogen-containing Bases.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom **217**, 119 (2002) CLAVE=A
- 243.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, T. El Messaoudi, M. Esseffar, M. Alcamí, and M. Yáñez  
TITULO: *Prototropic tautomerism of thioxo(oxo)-3 oxo(thioxo)-5 2,7-dimethyl-1,2,4-triazepines.*  
REVISTA: New Journal of Chemistry **26**, 711 (2002) CLAVE=A
- 244.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez J.F. Gal, P.C. Maria and J.C.Guillemin.  
TITULO: *Vinyl and Ethynyl Silanes, Germanes and Stannanes. A new case of Dissociative Proton Attachment.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **15**, 509 (2002) CLAVE=A
- 245.- AUTORES: G. Bouchoux, D. Defaye, T. McMahon, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Structural and energetic aspects of the protonation of phenol, catechol, resorcinol and hydroquinone.*

- REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **8**, 2900 (2002) CLAVE=A
- 246.- AUTORES: A. Benidar, R. Le Doucen, J.C.Guillemain, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Vibrational Spectra of Vinylarsine and Vinylstibine. An Experimental and Theoretical Study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 6262 (2002) CLAVE=A
- 247.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The Crucial role of agostic interactions in the binding of Cu<sup>+</sup> to alkanes, silanes and germanes in the gas phase.*  
REF. REVISTA: J. Comp. Methods in Sciences and Engineering **2**, 411(2002) CLAVE=A
- 248.- AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *The Role of Chalcogen-chalcogen interactions on the intrinsic basicity and acidity of  $\beta$ -chalcogenovinylaldehydes, HC(=X)-CH=CH-CYH (X=O, S; Y=Se, Te).*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **8**, 3999 (2002) CLAVE=A
- 240.- AUTORES: J.F. Gal, P.C. Maria, M. Decouzon, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas-Phase Lithium cation basicity of some benzene derivatives. An experimental and theoretical study.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom **219**, 445 (2002) CLAVE=A
- 250.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, M. Esseffar, W. Bouab, T. El Messaoudi, M. El Messaoudi, J.L.M. Abboud, M. Alcamí, and M. Yáñez  
TITULO: *The gas-phase basicity of 2,7-dimethyl-1,2,4-triazepine thio derivatives.*  
REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 7383 (2002) CLAVE=A
- 251.- AUTORES: L. Boutreau, P. Toulhoat, J. Tortajada, A. Luna, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Reactions between Glycolic Acid and Cu<sup>+</sup> in the Gas-phase. An experimental and theoretical study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **106**, 9359 (2002) CLAVE=A
- 252.- AUTORES: L. Galiano, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas Phase chemistry of ethyl- and vinyl-amines, phosphines and arsines. A DFT study of the structure and stability of their Cu<sup>+</sup> complexes.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 9306 (2002) CLAVE=A
- 253.- AUTORES: I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, M. Yáñez, and J. Del Bene.  
TITULO: *An ab initio study of the structural, energetic, bonding, and IR spectroscopic properties of complexes with dihydrogen bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **106**, 9325 (2002) CLAVE=A
- 254.- AUTORES: J. Del Bene, S.A. Perera, R.J. Bartlett, I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *One-Bond (<sup>1</sup>dJ<sub>H-H</sub>) and Three-Bond (<sup>3</sup>dJ<sub>X-M</sub>) Spin-Spin Coupling Constants across X-H...H-M Dihydrogen Bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 9331 (2002) CLAVE=A
- 255.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, J.C. Guillemain, E.H. Riague, J.F. Gal, P.C. Maria and C. Dubin-Poliart.  
TITULO: *The gas-phase acidity of HCP, CH<sub>3</sub>CP, HCAs and CH<sub>3</sub>Cas. An unexpected enhanced acidity*

- of the methyl group.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **8**, 4919 (2002) CLAVE=A
- 256.- AUTORES: M. Esseffar, E. Quintanilla, J.Z. Dávalos, J.L.M. Abboud, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Nitro derivatives of pyrrole, furan and 1H-tetrazole: ring or nitro bases?.*  
REF. REVISTA: New J. Chem. **26**, 1567 (2002) CLAVE=A
- 257.- AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *1,8-Chalcogen-Bridged Naphthalenes. Strong Carbon Bases in the Gas Phase.*  
REF. REVISTA: New J. Chem. **26**, 1747 (2002) CLAVE=A
- 258.- AUTORES: F. Martín, F. Borondo, M. Yáñez, et al. (Coordinadores J. Bertran, J. Nuñez).  
TITULO: *QUIMICA FISICA*  
REF. REVISTA: Ariel Ciencia, Barcelona (2002). CLAVE=CL
- 259.- AUTORES: L. Galiano, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas-Phase Chemistry of Ethynyl-Amine, Phosphine and Arsine. Structure and stability of their Cu<sup>+</sup> and Ni<sup>+</sup> complexes.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Chem. **4**, 72 (2003) CLAVE=A
- 260.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, J. Elguero, M.V. Roux, P. Jiménez, J.Z. Dávalos, M.A.V. Ribeiro da Silva, M. das D. M. C. Ribeiro da Silva, P. Cabildo, R. Claramunt.  
TITULO: *Substituent effects on enthalpies of formation. Benzene derivatives.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 366 (2003). CLAVE=A
- 261.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *Structure and stability of [H<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>, N]<sup>+</sup> singlet state cations. A comparison between DFT and high-level ab initio calculations.*  
REF. REVISTA: Int. J. Quantum Chem. **91**, 438 (2003) CLAVE=A
- 262.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Agostic vs.  $\pi$ -interactions in complexes of ethynyl-silanes and ethynyl-germanes with Cu<sup>+</sup> in the gas phase.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 1370 (2003) CLAVE=A
- 263.- AUTORES: J. Del Bene, S.A. Perera, R.J. Bartlett, M. Yáñez, O. Mó, I. Alkorta, and J. Elguero.  
TITULO: *Two-Bond F-N Spin-Spin Coupling Constants (<sup>2h</sup>J<sub>N-F</sub>) across FH...N Hydrogen Bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 3121 (2003) CLAVE=A
- 264.- AUTORES: J. Del Bene, S.A. Perera, R.J. Bartlett, M. Yáñez, O. Mó, I. Alkorta, and J. Elguero.  
TITULO: *Two-Bond N-F Spin-Spin Coupling Constants (<sup>2h</sup>J<sub>N-F</sub>) across NH<sup>+</sup>...F Hydrogen Bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 3126 (2003) CLAVE=A
- 265.- AUTORES: J. Del Bene, S.A. Perera, R.J. Bartlett, M. Yáñez, O. Mó, J. Elguero, and I. Alkorta.  
TITULO: *Two-Bond <sup>13</sup>C-<sup>15</sup>N Spin-Spin Coupling Constants (<sup>2h</sup>J<sub>C-N</sub>) across C-H-N Hydrogen Bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 3222 (2003) CLAVE=A
- 266.- AUTORES: M. Esseffar, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas-phase reactivity of lactones. Structures and stability of their Cu<sup>+</sup> complexes.*



- REF. REVISTA: Mol. Phys. **101**, 1249 (2003) CLAVE=A
- 267.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Binding energies of Cu<sup>+</sup> to saturated and  $\alpha,\beta$ -unsaturated alkanes, silanes and germanes. The role of agostic interactions.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom. **227**, 401 (2003) CLAVE=A
- 268.- AUTORES: M. Yáñez.  
TITULO: *Theory. Energies and Potential Energy Surfaces: Organics.*  
REF. REVISTA: Enciclopedia of Mass Spectrom. Vol 1: Theory and Ion Chemistry. Gen. Ed. M.L. Gross & R. Caprioli. Vol. Ed. P.B. Armentrout. Elsevier. Oxford UK. 2003. pg 68.  
CLAVE=CL
- 269.- AUTORES: D. Baric, Z.B. Maksic and M. Yáñez  
TITULO: *Atomic Additivity of the Correlation Energy in Molecules- An Ab Initio MP4 and G3 Study*  
REF. REVISTA: Mol. Phys. **101**, 1377 (2003)
- 270.- AUTORES: A. Luna, O. Mó, M. Yáñez, J.P. Morizur, E. Leclerc, B. Desmazières, V. Haldys, , J. Chamot-Rooke and J. Tortajada.  
TITULO: *Specific reactivity of alkenes with transition metal cations. 1-Pentene- and 1-Octene-Cu<sup>+</sup> reactions in the gas phase.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass. Spectrom. **228**, 359 (2003) CLAVE=A
- 271.- AUTORES: J.F. Gal, P.C. Maria, M. Decouzon, O. Mó, M. Yáñez, and J.-L. M. Abboud.  
TITULO: *Lithium-Cation/ $\pi$  complexes of aromatic systems. The effect of increasing the number of fused rings.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **125**, 10394 (2003) CLAVE=A
- 272.- AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *Characterization of intramolecular hydrogen bonds and other weak intramolecular interactions on the basis of the topology of the charge density .*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **5**, 2942 (2003) CLAVE=A
- 273.- AUTORES: M. Yáñez.  
TITULO: *La Química Computacional. Una herramienta para la Química del siglo XXI.*  
REF. REVISTA: Anales de la Real Sociedad Española de Química. (numero especial del centenario), **99(2)**, 203 (2003) CLAVE=A
- 274.- AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *Cyclization triggered by deprotonation. The gas-phase acidity of 1,8-Chalcogen-bridged naphthalenes..*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **4**, 830 (2003) CLAVE=A
- 275.- AUTORES: O. Mó and M. Yáñez, J.F. Gal, P.C. Maria, M. Decouzon.  
TITULO: *Enhanced Li<sup>+</sup> Binding energies in alkylbenzene derivatives. The scorpion effect.*  
REF. REVISTA: Chemistry European J. **9**, 4330 (2003) CLAVE=A
- 276.- AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.

- TITULO: *Resonance Assisted Intramolecular Chalcogen-Chalcogen Interactions?*  
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **9**, 4548 (2003) CLAVE=A
- 277.- AUTORES: M.C. Sicilia, O. Mó, M. Yáñez, J.C. Guillemin, J.F. Gal and P.C. Maria.  
TITULO: *Is Allylphosphine a Carbon or a Phosphorus base in the gas phase?*  
REF. REVISTA: Eur. J. Mass Spectrom. **9**, 257 (2003) CLAVE=A
- 278.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *The importance of agostic-type interactions on the gas-phase of saturated and  $\alpha,\beta$ -unsaturated alkanes, silanes and germanes towards  $Ni^+$ .*  
REF. REVISTA: New J. Chem. **27**, 1657 (2003) CLAVE=A
- 279.- AUTORES: A. El Firdoussi, M. Esseffar, W. Bouab, A. Lamsabhi, J.L.M. Abboud, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Basicity of Lactones and cyclic ketones towards  $I_2$  and  $ICl$ . An experimental and theoretical study.*  
REF. REVISTA: New J. Chem. **27**, 1741 (2003) CLAVE=A
- 280.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, M. Yáñez, A. Scott, and L. Radom  
TITULO: *The Interaction between Neutral Molecules and  $Ca^{2+}$ : An Assessment of Theoretical Procedures.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **107**, 10456 (2003) CLAVE=A
- 281.- AUTORES: A. M. Lamsabhi, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas-Phase Reactivity of uracil, 2-thiouracil, 4-thiouracil, and 2,4-dithiouracil towards the  $Cu^+$  cation: a DFT study.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Chem. **4**, 1011 (2003) CLAVE=A
- 282.- AUTORES: J.-Y. Salpin, J. Tortajada, M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Optimization of extended basis sets and assessment of different theoretical schemes for Pb containing compounds.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **383**, 561 (2004) CLAVE=A
- 283.- AUTORES: J. Del Bene, J. Elguero, I. Alkorta, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO:  *$^{19}F$ - $^{19}F$  Spin-Spin Coupling Constant surfaces for  $(HF)_2$  clusters: The orientation and distance dependence of the sign and magnitude of  $J_{F-F}$ .*  
REF. REVISTA: J. Chem Phys. **120**, 3237 (2004) CLAVE=A
- 284.- AUTORES: A. Palacios, F. Martín, O. Mó, M. Yáñez, and Z. B. Maksic  
TITULO: *Stable doubly charged positive ions formed by direct attachment of alpha particles to HCN and HNC.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. Lett. **92**, 133001 (2004) CLAVE=A
- 285.- AUTORES: M.A.V. Ribeiro da Silva, M. das D. M. C. Ribeiro da Silva, L.M.P.F. Amaral, P. Jiménez, M.V. Roux, J.Z. Dávalos, M. Temprano, P. Cabildo, R. Claramunt, J. Elguero, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Experimental thermochemical study of two 2-alkylbenzimidazole isomers (alkyl = propyl and isopropyl).*  
REF. REVISTA: J. Chem. Thermo. **36**, 533 (2004). CLAVE=A

- 286.- AUTORES: J. Tortajada, B. Amekraz, M. Alcamí, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Unimolecular reactivity of strong metal cation complexes in the gas phase. Ethylenediamine-Cu<sup>+</sup>*  
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **10**, 2927 (2004) CLAVE=A
- 287.- AUTORES: P. Jiménez, M.V. Roux, J.Z. Dávalos, M. Temprano, M.A.V. Ribeiro da Silva, M. das D. M. C. Ribeiro da Silva, L.M.P.F. Amaral, P. Cabildo, R. Claramunt, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero.  
TITULO: *Substituent and ring effects on enthalpies of formation: 2-methyl- and 2-ethyl-benzimidazol vs. benzene- and imidazole-derivatives.*  
REF. REVISTA: Mol. Phys. **102**, 711 (2004). CLAVE=A
- 288.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *Bonding and Bonding Perturbation in Ion-Molecule Interactions in the Gas Phase.*  
REF. REVISTA: Encyclopedia of Computational Chemistry. Published on line  
URL: <http://www.mrw.interscience.wiley.com/ecc/articles/cn0062/frame.html> CLAVE=CL
- 289.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *The importance of non-conventional structures in the binding of Ni<sup>+</sup> to ethynyl-silanes and ethynyl-germanes.*  
REF. REVISTA: Theoret. Chem. Accounts. **112**, 298 (2004) CLAVE=A
- 290.- AUTORES: M. Alcamí, A. Luna, O. Mó, J. Tortajada and M. Yáñez  
TITULO: *A theoretical survey of the potential energy surface of Ethylenediamine + Cu<sup>+</sup> reactions.*  
REF. REVISTA: J. Phys.Chem. A **108**, 8367 (2004) CLAVE=A
- 291.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *Theoretical survey of the potential energy surfaces associated with the N<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P,<sup>1</sup>D) + C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> reactions in the gas phase.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **108**, 9762 (2004) CLAVE=A
- 292.- AUTORES: G. Bouchoux, J-Y. Salpin, and M. Yáñez  
TITULO: *Low energy dissociation processes of ionized cyclohexene: a theoretical insight.*  
REF. REVISTA: J. Phys.Chem. A **108**, 9853 (2004) CLAVE=A
- 293.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, M. Yáñez, J-Y. Salpin, J. Tortajada and L. Radom  
TITULO: *Gas-Phase Reactions between Urea and Ca<sup>2+</sup>: The importance of Coulomb explosions.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **108**, 10080 (2004) CLAVE=A
- 294.- AUTORES: A. El Firdoussi, M. Esseffar, W. Bouab, J.L.M. Abboud, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Push-pull electronic effects in charge-transfer complexes. The case of N-H and N-Me lactams.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **108**, 10568 (2004) CLAVE=A
- 295.- AUTORES: A. M. Lamsabhi, M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, and J. Tortajada.  
TITULO: *Cu<sup>2+</sup> association to uracil and its thio-derivatives. A theoretical study.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **5**, 1871-78 (2004) CLAVE=A
- 296.- AUTORES: I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, M. Yáñez, and J. Del Bene.  
TITULO: *Do coupling constants and chemical shift provide evidence for the existence of Resonance Assisted Hydrogen Bonds (RAHB)?*  
REF. REVISTA: Mol. Phys. **102**, 2563 (2004) CLAVE=A

- 297.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *Li<sup>+</sup> vs. Cu<sup>+</sup> association to toluene, phenyl-silane and phenyl-germane. Conventional vs. non-conventional  $\pi$ -complexes.*  
REF. REVISTA: Eur. J. Mass Spectrom. **10**, 921 (2004) CLAVE=A
- 298.- AUTORES: C. Emmeluth, V. Dyczmons, T. Kinzel, P. Botschwina, M.A. Suhm and M. Yáñez.  
TITULO: *Combined jet relaxation and quantum chemical study of the pairing preferences of ethanol.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **7**, 991 (2005) CLAVE=A
- 299.- AUTORES: E. Quintanilla, J.Z. Dávalos, J.L.M. Abboud, M. Alcamí, M.P. Cabildo, R. Claramunt, J. Elguero, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Why does pivalaldehyde (trimethylacetaldehyde) unexpectedly seem more basic than 1-adamantanecarbaldehyde in the gas-phase?. A FT-ICR and high-level ab initio study.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **11**, 1826 (2005) CLAVE=A
- 300.- AUTORES: J.C. Guillemin, E. H. Riague, J.F. Gal, P.C. Maria, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Acidity trends in  $\alpha,\beta$ -unsaturated sulfur, selenium and tellurium derivatives. Comparison with C-, Si-, Ge-, Sn-, N-, P-, As-, and Sb-containing analogs.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **11**, 2145 (2005) CLAVE=A
- 301.- AUTORES: J. Del Bene, J. Elguero, I. Alkorta, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Ab initio study of the influence of trimer formation on one and two-bond spin-spin coupling constants across X-H-Y hydrogen bonds: Complexes AH:XH:YH<sub>3</sub> for A,X = <sup>19</sup>F, <sup>35</sup>Cl and Y = <sup>15</sup>N, <sup>31</sup>P.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem A. **109**, 2350 (2005) CLAVE=A
- 302.- AUTORES: O. Picazo, I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Chiral Recognition in phosphinic acids dimers.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **18**, 491 (2005) CLAVE=A
- 303.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, and J.C. Guillemin.  
TITULO: *A theoretical study on the dimers of Aminoacrylonitrile (3-Amino-2-Propenenitrile), a compound of astrochemical interest.*  
REF. REVISTA: Arkivoc **IX**, 239 (2005) CLAVE=A
- 304.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M. Eckert-Maksic, Z.B. Maksic, I. Alkorta and J. Elguero.  
TITULO: *Periodic trends in bond dissociation energies. A theoretical study..*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem A **109**, 4359 (2005) CLAVE=A
- 305.- AUTORES: A. Benidar, J.C. Guillemin, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Infrared Spectra of a Species of Astrochemical Interest: Aminoacrylonitrile (3-Amino-2-Propenenitrile).*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **109**, 4705 (2005) CLAVE=A
- 306.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, J. Del Bene, I. Alkorta, and J. Elguero.  
TITULO: *Cooperativity and proton transfer in hydrogen-bonded trimers.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **6**, 1411 (2005) CLAVE=A
- 307.- AUTORES: A. Palacios, I. Corral, O. Mó, F. Martín and M. Yáñez  
TITULO: *On the existence and lifetimes of Cu<sup>2+</sup> complexes with water, ammonia and hydrogen cyanide.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **123**, 014315 (1-5) (2005) CLAVE=A

- 308.- AUTORES: J. Zevallos, A. Toro-Labbé, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *The role of Intramolecular Hydrogen Bond vs. other weak interactions on the conformation of hyponitrous acid and its mono- and dithio-derivatives.*  
 REF. REVISTA: Struct. Chem. **16**, 295 (2005) CLAVE=A
- 309.- AUTORES: M.A.V. Ribeiro da Silva, M.das D. M. C. Ribeiro da Silva, L.M.P.F. Amaral, J. Elguero, P. Jiménez, M.V. Roux, J.Z. Dávalos, M. Temprano, P. Cabildo, R. Claramunt, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Thermochemical Properties of Two Benzimidazole Derivatives: 2-Phenyl- and 2-Benzylbenzimidazole.*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Therm. **37**, 1168 (2005). CLAVE=A
- 310.- AUTORES: I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, M. Yáñez, and J. Del Bene.,  
 TITULO: *Are RAHBs "resonance assisted"? A theoretical NMR study.*  
 REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **411**, 411 (2005) CLAVE=A
- 311.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, M. Yáñez and L. Radom  
 TITULO: *Why the Ca<sup>2+</sup> and K<sup>+</sup> binding energies of formaldehyde and ammonia are reversed with respect to their proton affinities?*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **109**, 6735 (2005) CLAVE=A
- 312.- AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
 TITULO: *The NICS(Nucleus-Independent Chemical Shift) as a probe of the relative stability of  $\beta$ -Chalcogenovinylaldehydes stabilized through intramolecular chalcogen-chalcogen interactions.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **730**, 217 (2005) CLAVE=A
- 313.- AUTORES: B. Kovačević, M. Rožman, L. Klasinc, D. Srzić, Z.B.Maksic and M. Yáñez  
 TITULO: *Gas phase structure of protonated histidine and histidine methyl ester– a combined experimental mass spectrometry and theoretical ab initio study.*  
 REF. REVISTA: J. Phys Chem. A **109**, 8329 (2005) CLAVE=A
- 314.- AUTORES: A. El Firdoussi, M. Esseffar, W. Bouab, J.L.M. Abboud, O. Mó, M. Yáñez and M.F. Ruasse.  
 TITULO: *Density Functional Theory Study of the Hydrogen Bond Interaction Between Lactones, Lactams and Methanol.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **109**, 9141 (2005) CLAVE=A
- 315.- AUTORES: X. Solans, M. Sodupe, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero.  
 TITULO: *Hydrogen bond vs. Proton transfer in médium-size zeolitas. A Theoretical Study.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. B **109**, 19301 (2005) CLAVE=A
- 316.- AUTORES: M. Güell, J. Poater, J. M. Luis, O. Mó, M. Yáñez and M. Solà  
 TITULO: *An aromaticity analysis of Lithium-cation/  $\pi$  complexes of aromatic systems.*  
 REF. REVISTA: ChemPhysChem **6**, 2552 (2005) CLAVE=A
- 317.- AUTORES: G. Bouchoux, D. Leblanc, W. Bertrand, T.B. McMahon, J.E. Szulejko, F. Berruyer-Penaud, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Protonation thermochemistry of selected hydroxy and methoxy carbonyl molecules.*  
 REF. REVISTA: J. Phys Chem. A **109**, 11851 (2005) CLAVE=A
- 318.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez

- TITULO: *Analysis of the bonding in  $XH_3-Cu^+$  ( $X=B,Al,Ga$ ) complexes.*  
REF. REVISTA: Int. J. Quantum Chem. **106**, 659 (2006) CLAVE=A
- 319.- AUTORES: A. M. Lamsabhi, M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, and J. Tortajada.  
TITULO: *On the gas-phase deprotonation of Uracil- $Cu^{2+}$  and Thiouracil- $Cu^{2+}$  Complexes.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **110**, 1943 (2006) CLAVE=A
- 320.- AUTORES: L. Infantes, O. Mó, M. Yáñez, M.V. Roux, P. Jiménez, J.Z. Dávalos, M. Temprano, M.A.V. Ribeiro da Silva, M.das D. M. C. Ribeiro da Silva, L.M.P.F. Amaral, P. Cabildo, R. Claramunt, and J. Elguero.  
TITULO: *Substituent Effects on Enthalpies of Formation of Nitrogen Heterocycles: 2-Substituted Benzimidazoles and Related Compounds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **110**, 2535 (2006). CLAVE=A
- 321.- AUTORES: C. Trujillo, A. M. Lamsabhi, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The reactions of  $F^+(\ ^3P)$  and  $F^+(\ ^1D)$  with silicon oxide. Possibility of spin-forbidden processes.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **110**, 7130 (2006) CLAVE=A
- 322.- AUTORES: M.I. Colvin, C.J. Cramer, C.E. Dykstra, J.H. Jensen, S. Krimm, J-L. Rivail, A.J. Tacar and M. Yáñez.  
TITULO: *Molecular quantum mechanics to biodynamics: Essential connections.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct (THEOCHEM) **764**, 1 (2006) CLAVE=A
- 323.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO:  *$Cu^+$  association to some  $Ph-X$  ( $X=OH, NH_2, CHO, COOH, CF_3$ ) phenyl derivatives. A comparison with  $Li^+$  complexes.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass. Spectrom. **255-256**, 20 (2006) CLAVE=A
- 324.- AUTORES: J. Del Bene, J. Elguero, I. Alkorta, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *An ab initio study of  $^{15}N-^{11}B$  spin-spin coupling constants for borazine and selected derivatives.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **110**, 9959 (2006) CLAVE=A
- 325.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, M. Yáñez J-Y Salpin, J. Tortajada, D. Moran and L. Radom  
TITULO: *An experimental and theoretical investigation of glycine+  $Ca^{2+}$  reactions in the gas phase*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **12**, 6787 (2006) CLAVE=A
- 326.- AUTORES: J.F. Gal, P.C. Maria, O. Mó, M. Yáñez and D. Kuck.  
TITULO *Gaseous Complexes between Lithium Cation and Diphenylalkanes. The Pincer Effect.*  
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **12**, 7676 (2006) CLAVE=A
- 327.- AUTORES: A. Luna, O. Mó, M. Yáñez J.F. Gal, P.C. Maria, and J.C. Guillemin.  
TITULO *Gas-phase protonation and deprotonation of acrylonitrile derivatives  $N\equiv C-CH=CH-X$  ( $X=CH_3, NH_2, PH_2, SiH_3$ ).*  
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **12**, 9254 (2006) CLAVE=A
- 328.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez

- TITULO: *On the stability of non-conventional  $\pi$ -complexes between  $Ni^+$  and toluene, phenyl-silane and phenyl-germane*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **19**, 495 (2006) CLAVE=A
- 329.- AUTORES: A. M. Lamsabhi, O. M3, M. Y3nez, J. Tortajada, and J-Y Salpin.  
 TITULO: *Unimolecular reactivity of Uracil- $Cu^{2+}$  complexes in the Gas-Phase*  
 REF. REVISTA: ChemPhysChem **8**, 181 (2007.) CLAVE=A
- 330.- AUTORES: J.Z. D3valos, R. Herrero, J.L.M. Abboud, O. M3, and M. Y3nez.  
 TITULO: *How can a carbon atom be covalently bound to five ligands?. The case of  $Si_2(CH_3)_7^+$  or the beauty of symmetry.*  
 REF. REVISTA: Angew. Chem. Int. Ed. **46**, 381 (2007) CLAVE=A
- 331.- AUTORES: J. Del Bene, J. Elguero, I. Alkorta, M. Y3nez, and O. M3.  
 TITULO: *Attacking Boron Nucleophiles: NMR Properties of 5-membered Diazaborole Rings.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **111**, 419 (2007) CLAVE=A
- 332.- AUTORES: M. Esseffar, R. Herrero, E. Quintanilla, J.Z. D3valos, , J.L.M. Abboud, M. Y3nez, and O. M3.  
 TITULO: *Activation of the disulfide bond and chalcogen-chalcogen interactions. An experimental (FT-ICR) and computational study .*  
 REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **13**, 1796 (2007) CLAVE=A
- 333.- AUTORES: J. Del Bene, O. M3, M. Y3nez, I. Alkorta, and J. Elguero.  
 TITULO: *Spin-Spin Coupling Constants for Iminoboranes RBNH, HBNR, and RBNR and Comparisons with Corresponding Isoelectronic Acetylenes RCCH and RCCR, for R = H, CH<sub>3</sub>, NH<sub>2</sub>, OH, and F.*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **3**, 549 (2007) CLAVE=A
- 334.- AUTORES: E. Rinc3n, O. M3, A. Toro-Labb3, and M. Y3nez.  
 TITULO: *Effect of Ni(II), Cu(II) and Zn(II) association on the keto-enol tautomerism of thymine.*  
 REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **9**, 2531 (2007) CLAVE=A
- 335.- EDITORS: O. M3, M. Y3nez.  
 TITULO: *Special Issue on "COMPUTATIONAL ORGANIC CHEMISTRY"*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM, **811** (2007) CLAVE=L
- 336.- AUTORES: O. M3, M. Y3nez, J-Y Salpin, and J. Tortajada.  
 TITULO: *Thermochemistry, Bonding and Reactivity of  $Ni^+$  and  $Ni^{2+}$  in the gas phase*  
 REF. REVISTA: Mass Spectrom. Rev. **26**, 474-516 (2007) CLAVE=A
- 337.- AUTORES: C. Trujillo, O. M3, M. Y3nez, J-Y Salpin, and J. Tortajada.  
 TITULO: *Gas-Phase Reactions between Thiourea and  $Ca^{2+}$ . New evidences for the formation of  $[Ca(NH_3)]^{2+}$  and other doubly charged species*  
 REF. REVISTA: ChemPhysChem **8**, 1330 (2007) CLAVE=A
- 338.- AUTORES: P. Sanz, O. M3, M. Y3nez, and J. Elguero  
 TITULO: *Resonance-assisted hydrogen bonds: A critical examination. Structure and stability of the enols of beta-diketones and beta-enaminones*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **111**, 3585 (2007) CLAVE=A

- 339.- AUTORES: C. Trujillo, O. Mó, M. Yáñez.  
TITULO *A Theoretical Study of hydration effects on the Prototropic Tautomerism of Selenouracils.*  
REF. REVISTA: Org. Biomol. Chem. **5**, 3092 (2007) CLAVE=A
- 340.- AUTORES: P. Sanz, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero  
TITULO: *Non-resonance-assisted hydrogen bonding in hydroxymethylene and aminomethylene cyclobutanones and cyclobutenones and their nitrogen counterparts*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **8**, 1950 (2007) CLAVE=A
- 341.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, A. Martín-Pendás, I. Alkorta, J. Elguero, and J. Del Bene  
TITULO: *Unusual substituent effects on the bonding of iminoboranes.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **9**, 3970 (2007) CLAVE=A
- 342.- AUTORES: A. Luna, O. Mó, M. Yáñez, J.C. Guillemin, J.F. Gal, and P.C. Maria.  
TITULO *Cyano substituent effects on enol and enethiol acidity and basicity: the protonation and deprotonation of 3-hydroxy-2-propenenitrile and its thio analogue.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom. **267**, 125 (2007) CLAVE=A
- 343.- AUTORES: R. Caballol and M. Yáñez,  
TITULO *Quantum Chemistry Methods.I.-Wave Function-Based Methods.* Theoretical and Computational Chemistry: Foundations, Methods and Techniques. Ed. J. Andrés and J. Bertran.  
REF. REVISTA: CienciasExperimentals 11, 155-220 . Univ. Jaume I (2007) CLAVE=CL
- 344.- AUTORES: J.A. Gámez, J.C. Guillemin, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Strong Dissimilarities between the Gas-Phase Acidities of Saturated and  $\alpha,\beta$ -Unsaturated Boranes and the corresponding Alanes and Gallanes.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **14**, 2201 (2008) CLAVE=A
- 345.- AUTORES: A. M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez, J. Tortajada, and J-Y Salpin.  
TITULO: *Ni<sup>+</sup> reactions with aminoacetonitrile, a potential pre-biological molecule precursor of glycine.*  
REF. REVISTA: J. Mass Spectrom. **43**, 317 (2008) CLAVE=A
- 346.- AUTORES: P. Sanz, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero  
TITULO: *Bonding in Tropolone, 2-Aminotropone and Aminotropoimine. No evidence of Resonance Assisted Hydrogen Bonding.*  
REF. REVISTA: Chem Eur. J. **14**, 4225 (2008) CLAVE=A
- 347.- AUTORES: C. Trujillo, O. Mó, M. Yáñez, J. Tortajada, and J-Y Salpin.  
TITULO: *Selenourea-Ca<sup>2+</sup> Reactions in the Gas-Phase. Similarities and dissimilarities with urea and thiourea.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. B. **112**, 5479 (2008) CLAVE=A
- 348.- AUTORES: A. Medina, C.G. Claessens, G.M. Aminur Rahman, A.M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez, D.M. Guldi and T. Torres.  
TITULO: *Accelerating charge transfer in a triphenylamine-subphthalocyanine donor-acceptor system.*  
REF. REVISTA: Chem. Comm. **15**, 1759 (2008) CLAVE=A
- 349.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and R. Boyd.



- TITULO: *Gas-phase Interactions of Calcium ( $Ca^{2+}$ ) with Seleno Derivatives of Uracil*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **4**, 1002 (2008) CLAVE=A
- 350.- AUTORES: C. Trujillo, A.M. Lamsabhi, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *The importance of the oxidative character of doubly charged metal cations in binding neutral bases. [Urea-M] $^{2+}$  and [Thiourea-M] $^{2+}$  (M = Mg, Ca, Cu) Complexes.*  
 REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **10**, 3229 (2008) CLAVE=A
- 351.- AUTORES: C. Trujillo, O. Mó, M. Yáñez  
 TITULO: *Why are selenouracils as basic as but stronger acids than uracil in the gas phase?*  
 REF. REVISTA: ChemPhysChem. **9**, 1715 (2008) CLAVE=A
- 352.- AUTORES: A. Cimas, J.A. Gámez, O. Mó, M. Yáñez and J. Y. Salpin  
 TITULO: *Computational study on the kinetics of the reaction between  $Ca^{2+}$  and urea.*  
 REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **456**, 156 (2008) CLAVE=A
- 353.- AUTORES: C. Trujillo, O. Mó, M. Yáñez and B. Silvi  
 TITULO: *On the Bonding of selenocyanates and isoselenocyanates and their protonated derivatives*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comput. **4**, 1593 (2008) CLAVE=A
- 354.- AUTORES: M. Yáñez, O. Mó, I. Alkorta and J. E. Del Bene  
 TITULO: *Structures, bonding, and one-bond B-N and B-H spin-spin coupling constants for a series of neutral and anionic five-membered rings containing BN bonds*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comput. **11**, 1869 (2008) CLAVE=A
- 355.- AUTORES: A. Eizaguirre, O. Mó, M. Yáñez and J.-C. Guillemin  
 TITULO:  *$\alpha,\beta$ -unsaturated and saturated derivatives of Be, Mg and Ca. Are they carbon or metal acids in the gas phase?*  
 REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **14**, 10423 (2008) CLAVE=A
- 356.- AUTORES: A. Eizaguirre, M. Yáñez, J. Tortajada and J.-Y. Salpin  
 TITULO:  *$Sr^{2+}$ -neutral molecules interactions. An Assessment of Theoretical Procedure*  
 REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **464**, 240 (2008) CLAVE=A
- 357.- AUTORES: M. Hurtado, J. G. Contreras, A. Matamala, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Conformational analysis, NMR properties and nitrogen inversion of N-substituted 1,3-oxazines.*  
 REF. REVISTA: New J. Chem. **32**, 2209 (2008) CLAVE=A
- 358.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez, J.-Y. Salpin, V. Haldys, J. Tortajada, and J.-C. Guillemin.  
 TITULO:  *$Ni^+$  Reactions with Aminoacrylonitrile, A Species of Potential Astrochemical Relevance*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **112**, 8046 (2008) CLAVE=A
- 359.- AUTORES: C. Trujillo, A. M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J.-Y. Salpin.  
 TITULO: *Interaction of  $Ca^{2+}$  with uracil and its thio derivatives in the gas phase*  
 REF. REVISTA: Org. Biomol. Chem., **6**, 3695 (2008) CLAVE=A
- 360.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, O. Mó, S. Gutierrez-Oliva, P. Perez, A. Toro-Labbé, and M. Yáñez.

- TITULO: *The mechanism of double proton transfer in dimers of uracyl and 2-thiouracyl The reaction force perspective.*  
REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **30**,389-398 (2009) CLAVE=A
- 361.- AUTORES: P.Sanz, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero  
TITULO: *The effects of C by N replacement on the hydrogen bonding of malonaldehyde: N-formylformimidic acid, N-(hydroxymethyl)formamide and related compounds*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **11**, 762 (2009) CLAVE=A
- 362.- AUTORES: M. Hurtado, M. Yáñez, R. Herrero, A. Guerrero, J. Z. Dávalos, J.-L. M. Abboud, B. Khater and J.-C. Guillemin  
TITULO: *The Ever-Surprising Chemistry of Boron: Enhanced Acidity of Phosphine-Boranes*  
REF. REVISTA: Chem. Eur J. **15**, 4622 (2009) CLAVE=A
- 363.- AUTORES: J. M. Saá and M. Yáñez  
TITULO: *On the "Gluing" Effect of Lithium: the Lithium-driven Assembly of circumarranged, Edge-fused Cyclopentadienyl Lithium Compounds and Aza Analogues.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **15**, 3123 (2009)
- 364.- AUTORES: M. Hurtado, O. Mó, M. Yáñez and J.-C. Guillemin.  
TITULO: *Acidity enhancement of the cyclopentadiene cycle by PH<sub>2</sub> and AsH<sub>2</sub> substitution*  
REF. REVISTA: Croat. Chim. Acta. **82**, 1 (2009) CLAVE=A
- 365.- AUTORES: J. E. Del Bene, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Substituent effects on B-N bonding and coupling constants in five-membered rings N<sub>3</sub>B<sub>2</sub>H<sub>4</sub>X and N<sub>2</sub>B<sub>3</sub>H<sub>4</sub>X, X = H, F, and Li*  
REF. REVISTA: Croat. Chim. Acta. **82**, 149 (2009) CLAVE=A
- 366.- AUTORES: P. López-Tarifa, F. Martín, M. Yáñez and M. Alcamí  
TITULO: *Theoretical study of doubly charged X(H<sub>2</sub>O) and X(NH<sub>3</sub>) (X=Si, Ge, Sn, Pb) molecular ions.*  
REF. REVISTA: Croat. Chim. Acta. **82**, 129 (2009) CLAVE=A
- 367.- AUTORES: J. E. Del Bene, M. Yáñez, I. Alkorta and J. Elguero  
TITULO: *An ab initio study of the structures and selected properties of 1,2-dihydro-1,2-azaborine and related molecules.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comput. **5**, 2239 (2009) CLAVE=A
- 368.- AUTORES: M. Hurtado, M. Yáñez and J.-C. Guillemin.  
TITULO: *Enhanced Acidity of cyclopenta-2,4-dienylborane and its Al and Ga analogues. The role of aromatization.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. , **11**, 8759-8766 (2009)
- 369.- AUTORES: I. Alkorta, J. E. Del Bene, J. Elguero, O.Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study of diborenes HRB=BRH for R = CO, NH<sub>3</sub>, OH<sub>2</sub> PH<sub>3</sub>, SH<sub>2</sub>, ClH: Structures, energies and spin-spin coupling constants.*  
REF. REVISTA: Theoret. Chem. Acc. **124**, 186-195 (2009) CLAVE=A
- 370.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, M. Yáñez, J.-Y. Salpin, J. Tortajada.

- TITULO: *Gas-phase chemistry of organocopper compounds.*  
REF. REVISTA: The Chemistry of organocopper compounds. pg. 279-346. Ed. Z. Rappoport and I. Marek. J.Wiley & Sons. (2009) CLAVE=CL
- 371.- AUTORES: P.Sanz, M. Yáñez, O.Mó, I. Alkorta, and J. Elguero.  
TITULO: *Beryllium bonds, do they exist?*  
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **5**, 2763-2771 (2009) CLAVE=A
- 372.- AUTORES: A. Benidar, B. Khater, J.C. Guillemin, J.A. Gámez, and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas Phase Infrared Spectra of Vinyselenol and Vinyltellurol*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **113**, 12857-12863 (2009) CLAVE=A
- 373.- AUTORES: M. Esseffar, A. El Firdoussi, W. Bouab, J.L.M. Abboud, O. Mo, and M. Yáñez.  
TITULO: *Combined Experimental and Theoretical Study on Hydrogen-Bonded Complexes between Cyclic Ketones, Lactones and Lactams and 3,4-Dinitrophenol*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **113**, 14711-14717 (2009) CLAVE=A
- 374.- AUTORES: José A. Gámez, Luis Serrano-Andrés and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Electron capture activation of the disulfide bond. The role of the asymmetry and electronegativity.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **12**, 1042-1050 (2010) CLAVE=A
- 375.- AUTORES: I. Corral, C.Trujillo, J.-Y. Salpin and M. Yáñez.  
TITULO: *Ca<sup>2+</sup> reactivity in the gas phase. . Bonding, catalytic effects and coulomb explosions.*  
REF. REVISTA: Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics. Vol. 12 Kinetics and Dynamics: From Nano- to Bio-Scale. Eds. P. Paneth and A.Dybala-Defratyka. Springer. London (2010) CLAVE=CL
- 376.- AUTORES: M. Hurtado, A.M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J.-C. Guillemin.  
TITULO: *Are cyclopentadienylberyllium, magnesium and calcium hydrides carbon or metal acids in the gas phase?*  
REF. REVISTA: Dalton Trans. **39**, 4593-4601 (2010) CLAVE=A
- 377.- AUTORES: José A. Gámez, Luis Serrano-Andrés and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Asymmetry and Non-Adiabaticity in Fragmentation of Disulfide Bonds upon Electron Capture.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **10**, 2530-2538 (2010) CLAVE=A
- 378.- AUTORES: M. Hurtado, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Homoselenocisteina. An Oxygen or a Selenium acid in the gas-phase?*  
REF. REVISTA: Can. J. Chem. **88**,744-753 (2010) CLAVE=A
- 379.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Serine-Ca<sup>2+</sup> vs. Serine-Cu<sup>2+</sup> complexes. A theoretical perspective.*  
REF. REVISTA: Can. J. Chem. **88**,759-768 (2010) CLAVE=A
- 380.- AUTORES: Alvaro Cimas, Inés Corral, Otilia Mó, Manuel Yáñez and Nazario Martín.  
TITULO: *Hydrogen bonding in electronically excited states: A comparison between formic acid dimer and its mono-substituted thioderivatives.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **12**, 13037-46 (2010) CLAVE=A

- 381.- AUTORES: José A. Gámez, Inés Corral, Otilia Mó and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Unexpected gas-phase ion chemistry results unraveled by computational chemistry.*  
REF. REVISTA: *Current Org. Chem.* **14**, 1600-1611 (2010) CLAVE=A
- 382.- AUTORES: Ibon Alkorta, José Elguero, Janet E. Del Bene, Otilia Mó, and Manuel Yáñez,  
TITULO: *New insights into factors influencing B-N bonding in  $X:BH_{3-n}F_n$  and  $X:BH_{3-n}Cl_n$  for  $X=N_2$ , HCN, LiCN,  $H_2CNH$ ,  $NF_3$ ,  $NH_3$  and  $n = 0-3$ : The importance of deformation.*  
REF. REVISTA: *Chem. Eur. J.* **16**, 11897-11905 (2010) CLAVE=A
- 383.- AUTORES: A. Benidar, R. Georges, J-C. Guillemin, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Infrared Spectra of a Species of Potential Prebiotic and Astrochemical Interest: Cyanoethenethiol (HS-CH=CH-CN).*  
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. A* **114**, 9583-9588 (2010) CLAVE=A
- 384.- AUTORES: José A. Gámez and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Asymmetry and Electronegativity in the electron capture activation of the Se-Se bond:  $\sigma^*(Se-Se)$  vs  $\sigma^*(Se-X)$ .*  
REF. REVISTA: *J. Chem. Theor. Comp.* **6**, 3102-3112 (2010) CLAVE=A
- 385.- AUTORES: A. Gonzalez-Castrillo, M. Hurtado, O. Mó, M. Yáñez, and J.C. Guillemin.  
TITULO: *The role of hyperconjugative  $\pi$ -aromaticity on the enhanced acidity of  $CpXH_3$  ( $X= C, Si, Ge$ ) derivatives.*  
REF. REVISTA: *Mol. Phys.* **108**, 2467-2476 (2010) CLAVE=A
- 386.- AUTORES: Janet E. Del Bene, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez,  
TITULO: *Structural and Electronic Effects on One-bond Spin-spin Coupling Constants  $^1J(B-N)$ ,  $^1J(B-H)$ ,  $^1J(B-F)$  for Complexes of Nitrogen Bases with  $BH_3$  and its Fluoro-substituted Derivatives.*  
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. A*, **114**, 12775-12779 (2010) CLAVE=A
- 387.- AUTORES: A. Eizaguirre, O.Mó, M. Yáñez and R.J. Boyd  
TITULO: *Effect of  $Sr^{2+}$  association on the tautomerization processes of uracil and its dithio- and diseleno-derivatives.*  
REF. REVISTA: *Org. Biomol. Chem.* **9**, 423-431 (2011) CLAVE=A
- 388.- AUTORES: Otilia Mó and Manuel Yáñez.  
TITULO: *La Química Computacional en la Nueva Frontera.*  
REF. REVISTA: *Arbor* **187**, 143-155 (2011) CLAVE=A
- 389.- AUTORES: A. Eizaguirre, A.M. Lamsabhi, O.Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Assisted Intramolecular Proton Transfer in  $(uracil)_2Ca^{2+}$  complexes*  
REF. REVISTA: *Theor. Chem. Acc.* **128**, 457-464 (2011) CLAVE=A
- 390.- AUTORES: I. Corral, A. Palacios, and M. Yáñez.  
TITULO: *On the stability and lifetime of  $GaO^{2+}$  in the gas phase.*  
REF. REVISTA: *Theor. Chem Acc.* **129**, 401-407 (2011) CLAVE=A
- 391.- AUTORES: Otilia Mó and Manuel Yáñez.  
TITULO: *La Química Cuántica o la larga travesía del desierto*  
REF. REVISTA: *Gaceta de la RSEM* **14**, 229-246 (2011) CLAVE=A

- 392.- AUTORES: José A. Gámez and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Is Se-Se bond cleavage the most favourable process in electron attachment to diselenides? The importance of asymmetry.*  
REF. REVISTA: Chem. Comm. **47**, 3939-3941 (2011) CLAVE=A
- 393.- AUTORES: José A. Gámez, Luis Serrano-Andrés, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Two and Three State Conical Intersections in the Electron Capture Dissociation of Disulfides: The importance of Multireference Calculations.*  
REF. REVISTA: Int. J. Quant. Chem. **111**, 3316-3323 (2011) CLAVE=A
- 394.- AUTORES: José A. Gámez and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Electron attachment to diselenides revisited: Se-Se bond cleavage is neither adiabatic nor the most favorable process.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp **7**, 1726-1735 (2011) CLAVE=A
- 395.- AUTORES: I. Corral, and M. Yáñez.  
TITULO: *[ML<sub>n</sub>]<sup>2+</sup> doubly charged systems. Modeling, bonding, lifetimes and unimolecular reactivity.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. (perspective article) **13**, 14848-14864 (2011)  
CLAVE=A
- 396.- AUTORES: C. Trujillo, A. M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J.-Y. Salpin.  
TITULO: *Unimolecular Reactivity upon collision of Uracil-Ca<sup>2+</sup> complexes in Gas Phase: Comparison with uracil-M<sup>+</sup> (M= H, alkali metals) and uracil-M<sup>2+</sup> (M=Cu, Pb) systems.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom. **306**, 27-36 (2011). CLAVE=A
- 397.- AUTORES: I. Corral, A. Palacios, and M. Yáñez.  
TITULO: *Electronic structure and lifetimes of GaX<sup>2+</sup> (X= N, O, F) in the gas phase. Unraveling stability trends.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **13**, 18365-18372 (2011) CLAVE=A
- 398.- AUTORES: A. Eizaguirre, O.Mó, M. Yáñez and J-Y. Salpin.  
TITULO: *Modeling the interaction between peptide functions and Sr<sup>2+</sup>: Formamide- Sr<sup>2+</sup> reactions in the gas phase*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **13**, 18409-18417 (2011) CLAVE=A
- 399.- AUTORES: M. Hurtado, A-M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J-C. Guillemin.  
TITULO: *Stability trends and tautomerization of chalcocyclopentadienes. The role of aromaticity.*  
REF. REVISTA: New J. of Chem. **35**, 2713-2719 (2011) CLAVE=A
- 400.- AUTORES: A-M. Lamsabhi, M. Yáñez, O. Mó, C. Trujillo, F. Blanco, I. Alkorta, J. Elguero, E. Caballero, M.S. Rodríguez-Morgade, CG. Claessens and T. Torres.  
TITULO: *TDDFT study of the UV-vis spectra of subporphyrazines and subphthalocyanines*  
REF. REVISTA: Journal of Porphyrins and Phthalocyanines **15**, 1220-1230 (2011) CLAVE=A
- 401.- AUTORES: I. Corral, A.M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Infrared spectra of charge-solvated vs. salt-bridge conformations of glycine-, serine- and cisteine-Ca<sup>2+</sup> complexes.*

- REF. REVISTA: Int. J. Quant. Chem. **112**, 2126-2134 (2012) CLAVE=A
- 402.- AUTORES: M. Hurtado, A-M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J-C. Guillemin.  
TITULO: *On the origin of the enhanced acidity of chalcocyclopentadienes(cyclopentadiene-chalcogenols) in the gas phase.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **13**, 1167-1172 (2012), Inside cover, VIP, CLAVE=A
- 403.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, I. Corral, P. Perez, O. Tapia and M. Yáñez.  
TITULO: *Oxygenation of the phenylhalocarbenes. Are they spin allowed or spin forbidden reactions?*  
REF. REVISTA: J. Molecular Modeling 182813-182821 (2012) CLAVE=A
- 404.- AUTORES: Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, José Elguero.  
TITULO: *Modulating the strength of hydrogen bonds through beryllium bonds.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **8**, 2293-2300 (2012) CLAVE=A
- 405.- AUTORES: Goar Sanchez-Sanz, Ibon Alkorta, José Elguero, Manuel Yáñez, Otilia Mó.  
TITULO: *Strong interactions between copper halides and unsaturated systems: new metallocycles? or the importance of deformation.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **14**, 11468-11477 (2012) CLAVE=A
- 406.- AUTORES: A. Eizaguirre, M. Yáñez and L. Erikson.  
TITULO: *Stability and iron coordination in DNA adducts of anthracycline based anti-cancer drugs.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **14**, 12505-12514 (2012) CLAVE=A
- 407.- AUTORES: A. Eizaguirre, O.Mó, M. Yáñez, J-Y. Salpin and J. Tortajada.  
TITULO: *Modelling peptide-metal dication interactions: Formamide-Ca<sup>2+</sup> reactions in the Gas Phase.*  
REF. REVISTA: Org. Biomol. Chem. **10**, 7552-7561 (2012) CLAVE = A
- 408.- AUTORES: A. Martin-Somer, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Unexpected Acidity Enhancement Triggered by AlH<sub>3</sub> Association to Phosphines.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem A. **116**, 6950-6954 (2012) CLAVE=A
- 409.- AUTORES: A. Martin-Somer, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *The importance of deformation on the strength of beryllium bonds.*  
REF. REVISTA: Comp and Theoret. Chem. **998**, 74-79 (2012) CLAVE=A
- 410.- AUTORES: Laura Albrecht, Russell J. Boyd, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Cooperativity between Hydrogen bonds and beryllium bonds in (H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>BeX<sub>2</sub> (n =1-3, X = H, F) complexes. A new perspective.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **14**, 14540-14547 (2012) CLAVE=A
- 411.- AUTORES: A. Martin-Somer, A-M. Lamsabhi, M. Yáñez, J.Z. Davalos, J. Gonzalez, R. Ramos, and J-C. Guillemin.  
TITULO: *Can an amine be a stronger acid than a carboxylic acid? The surprisingly high acidity of amine-borane complexes.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **18**, 15699-15705 (2012) CLAVE=A
- 412.- AUTORES: M. M. Vallejos, A-M. Lamsabhi\*, N. M. Peruchena, O. Mó and M. Yáñez

- TITULO: *Microsolvation of Morpholine, a bidentate base. The importance of cooperativity*  
REF. REVISTA: J.Phys. Org. Chem. **25**, 1380-1390 (2012) CLAVE=A
- 413.- AUTORES: M. Montero-Campillo, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Alkyl Mercury Compounds: An Assessment of DFT Methods*  
REF. REVISTA: Theoret. Chem. Acc. **132**, 1328-8 (2013) CLAVE=A
- 414.- AUTORES: R. Verzeni, O. Mó, A. Cimas, I. Corral and M. Yáñez  
TITULO: *MS-CASPT2 study of the low-lying electronic excited states of di-thiosubstituted formic acid dimers*  
REF. REVISTA: Theoret. Chem. Acc. **132**, 1338-8 (2013) CLAVE=A
- 415.- AUTORES: Gavin S. Heverly-Coulson, Russell J. Boyd, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Revealing unexpected mechanisms for nucleophilic attack on S-S and Se-Se bridges*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **19**, 3629-3638 (2013) CLAVE=A
- 416.- AUTORES: A. Eizaguirre, O.Mó, M. Yáñez and J-Y. Salpin.  
TITULO: *Unimolecular reactivity of the [Urea-Sr]<sup>2+</sup> complex, a metastable dication in the gas phase: An experimental and theoretical perspective*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. B **117**, 2088-2095 (2013) CLAVE=A
- 417.- AUTORES: M. Montero-Campillo, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *UV-Vis Spectra Of Subporphyrazines And Subphthalocyanines with Aluminum And Gallium: A Time Dependent-DFT Study*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **14**, 915-922 (2013) CLAVE=A
- 418.- AUTORES: Oriana Brea, Manuel Yáñez, Otilia Mó, and Al Mokhtar Lamsabhi.  
TITULO: *On the stability of [(uracil)<sub>2</sub>-Cu]<sup>2+</sup> complexes in the gas phase. Different pathways for the formation of [(uracil-H)(uracil)-Cu]<sup>+</sup> monocations*  
REF. REVISTA: Org. Biomol. Chem., **11**, 3862-3870 (2013) CLAVE=A
- 419.- AUTORES: Cristina Trujillo, Goar Sánchez-Sanz, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez,  
TITULO: *Resonance assisted hydrogen bonds in open-chain and cyclic structures of malonaldehyde enol: A theoretical study*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. **1048**, 138-151 (2013) CLAVE=A
- 420.- AUTORES: M. Montero-Campillo, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Modulating weak intramolecular interactions through the formation of beryllium bonds: complexes between squaric acid and BeH<sub>2</sub>*  
REF. REVISTA: J. Mol. Mod. **19**, 2759-2766 (2013) CLAVE=A
- 421.- AUTORES: Manuel Yáñez, Otilia Mó, Ibon Alkorta, José Elguero.  
TITULO: *Can conventional Bases and Unsaturated Hydrocarbons be converted into gas-phase Superacids that are stronger than most of the known Oxyacids? The role of Beryllium Bonds*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **19**, 11637-11643 (2013) CLAVE=A
- 422.- AUTORES: M. Hurtado, M. Monte-Caballero, A-M. Lamsabhi, M. Yáñez, O. Mó and J-Y Salpin.  
TITULO: *Modelling interactions between an aminoacid and a metal dication: cysteine-Ca(II) reactions in the gas phase..*

- REF. REVISTA: ChemPlusChem **78**, 1124-1133 (2013), CLAVE=A
- 423.- AUTORES: A.C. Marele, I. Corral, P. Sanz, M.R. Mas-Ballesté, F. Zamora, M. Yáñez and J.M. Gómez-Rodríguez.  
TITULO: *Some pictures of alcoholic dancing: From simple to complex hydrogen-bonded networks based on polyalcohols*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. C **117**, 4680-4690 (2013) CLAVE=A
- 424.- AUTORES: Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, and José Elguero.  
TITULO: *Enhancing and modulating the intrinsic acidity of imidazole and pyrazol through Beryllium bonds.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Mod. **19**, 4139-4145 (2013) CLAVE=A
- 425.- AUTORES: Gavin S. Heverly-Coulson, Russell J. Boyd, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Dramatic substituent effects on the mechanisms of nucleophilic attacks on Se-S bridges.*  
REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **34**, 2537-2547 (2013) CLAVE=A
- 426.- AUTORES: A-M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J-C. Guillemin.  
TITULO: *Conformational preferences of RCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CN (R= CH<sub>3</sub>, F, Cl) cyanides and their corresponding isocyanides.*  
REF. REVISTA: Struct. Chem. **24**, 1789-1798 (2013), CLAVE=A
- 427.- AUTORES: A. Benidar, R. Georges, J-C. Guillemin O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Infrared Spectra of Cyanoacetaldehyde (NCCH<sub>2</sub>CHO): A Potential Prebiotic compound of Astrochemical Interest.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **14**, 2764-2771 (2013), CLAVE=A
- 428.- AUTORES: Manuel Yáñez, Otilia Mó, Ibon Alkorta, and José Elguero.  
TITULO: *Spontaneous ion-pair formation in the gas phase induced by Beryllium bonds*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **590**, 22-26 (2013) CLAVE=A
- 429.- AUTORES: José A. Gámez, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *[FAAF]<sup>-</sup> (A = O, S, Se, Te) or How Electrostatic Interactions Influence the Nature of the Chemical Bond*  
REF. REVISTA: J. Chem.Theory. Comp. **11**, 5211-5215 (2013)CLAVE=A
- 430.- AUTORES: M. Hurtado, A-M. Lamsabhi, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *Complexation of Ca<sup>2+</sup> with Selenocysteine and effects on its intrinsic acidity*  
REF. REVISTA: Arkivoc **ii**, 207-223 (2014), CLAVE=A
- 431.- AUTORES: Ibon Alkorta, José Elguero, Manuel Yáñez, and Otilia Mó.  
TITULO: *Cooperativity in Beryllium Bonds*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **16**, 4305-4312 (2014) CLAVE=A
- 432.- AUTORES: A. Benidar, M. Montero-Campillo, A-M. Lamsabhi, O. Mó, J-C. Guillemin and M. Yáñez.  
TITULO: *On the Structures, lifetimes, and Infrared Spectra of Alkyl Mercury Hydrides.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **15**, 530-541 (2014), CLAVE=A
- 433.- AUTORES: Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, and José Elguero.  
TITULO: *Spontaneous proton transfers induced by Beryllium bonds*



- REF. REVISTA: Mol. Phys. **112**, 592-600 (2014) CLAVE=A
- 434.- AUTORES: F. Aguilar-Galindo, M. Montero-Campillo, M. Yáñez, and O. Mó  
TITULO: *On the Stability of [Pb(Proline)]<sup>2+</sup> Complexes. Reconciling Theory with Experiment.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **598**, 91-95 (2014) CLAVE=A
- 435.- AUTORES: M. Montero-Campillo, M. Yáñez, A-M. Lamsabhi, and O. Mó  
TITULO: *Spontaneous H<sub>2</sub> Loss through the Interaction of Squaric Acid Derivatives and BeH<sub>2</sub>*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **20**, 5309-5316 (2014) CLAVE=A
- 436.- AUTORES: A. Martin-Somer, MP. Gaigeot, M. Yáñez and R. Spezia.  
TITULO: *RRKM study and DFT assessment on gas-phase fragmentation of formamide-M<sup>2+</sup> (M=Ca, Sr).*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **16**, 14813-14825 (2014) CLAVE=A
- 437.- AUTORES: Laura Albrecht, Russell J. Boyd, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Changing weak halogen bonds into strong ones through cooperativity with beryllium bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **118**, 4205-4213(2014) CLAVE=A
- 438.- AUTORES: K. Lemishko, M. Montero-Campillo, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The Behavior of Carboxylic Acids Upon Complexation With Beryllium Compounds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **118**, 5720-5726 (2014) CLAVE=A
- 439.- AUTORES: A. Martin-Somer, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Are Boryl radicals from amine- and phosphine-boranes the most stable radicals?.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **15**, 2288- 2294 (2014) CLAVE=A
- 440.- AUTORES: E. Fernandez Villanueva, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *On the existence and Characteristics of  $\pi$ -Berilium bonds.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **16**, 17531- 17536 (2014) CLAVE=A
- 441.- AUTORES: A. Martin-Somer, M. Yáñez, MP. Gaigeot, and R. Spezia.  
TITULO: *Unimolecular Fragmentation Induced by Low-Energy Collisions: Statistically or Dynamically Driven?*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **118**, 10882-10893 (2014) CLAVE=A
- 442.- AUTORES: M. Hurtado, O. Mó, M. Yáñez, B. Herrera, and A-M. Lamsabhi.  
TITULO: *New insights into the gas-phase unimolecular fragmentations of [Cysteine-Ca]<sup>2+</sup> complexes.*  
REF. REVISTA: COMPTC **1047**, 38-46 (2014) CLAVE=A
- 443.- AUTORES: Julia Guilleme, Lara Martínez-Fernández, David González-Rodríguez, Inés Corral, Manuel Yáñez, and Tomás Torres.  
TITULO: *An Insight into the Mechanism of the Axial Ligand Exchange Reaction in Boron Subphthalocyanine Macrocycles.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **136**, 14289-14298 (2014) CLAVE=A
- 444.- AUTORES: A. Martin-Somer, M.M. Montero-Campillo, O. Mó, M. Yáñez, I. Alkorta and J. Elguero.

- TITULO: *Some Interesting Features of Non-Covalent Interactions*  
REF. REVISTA: Croat Chem.Acta. **87**, 291-306 (2014) CLAVE=A
- 445.- AUTORES: Kathy J. Chen, Otilia Mó, Manuel Yáñez, and Inés Corral  
TITULO: *Can transition metals and group II mono- and dications discriminate between homo- and heterochiral XXXX' dimers (X,X'=H,Me; Y=O,S,Se)?*  
REF. REVISTA: Croat Chem.Acta. **87**, 481-493 (2014) CLAVE=A
- 446.- AUTORES: Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, Manuel Yáñez, and Janet E. Del Bene.  
TITULO: *Using Beryllium Bonds to Change Halogen Bonds From Traditional to Chlorine-shared to Ion-pair.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **17**, 2259-2267 (2015) CLAVE=A
- 447.- AUTORES: A. Martin-Somer, O. Mó, M. Yáñez and JC Guillemin.  
TITULO: *Acidity enhancement of unsaturated bases of group 15 by association with borane and beryllium dihydride. Unexpected boron and beryllium Bronsted acids.*  
REF. REVISTA: Dalton Trans. **44**, 1193-1202 (2015) DOI:10.1039/c4dt02292k CLAVE=A
- 448.- AUTORES: Marta Marín-Luna, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Interplay in BeR<sub>2</sub>:C<sub>6</sub>X<sub>6</sub>:Y(-) complexes (R=H, F and Cl, X=H and F, and Y=Cl and Br).*  
REF. REVISTA: Molecules **20**, 9961-9976 (2015) CLAVE=A
- 449.- AUTORES: Oriana Brea, Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, José Elguero.  
TITULO: *Creating  $\sigma$ -holes through the formation of berillium bonds.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **21**, 12676-12682 (2015) CLAVE=A
- 450.- AUTORES: J-F. Gal, M. Yáñez, O. Mó,  
TITULO: *The aluminum mono-cation basicity and affinity scales.*  
REF. REVISTA: Eur. J. Mass Spectr. **21**, 517-532 (2015) CLAVE=A
- 451.- AUTORES: Marta Marín-Luna, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Simultaneous Aromatic-Beryllium Bonds and Aromatic-Anion Interactions: Naphthalene and Pyrene as Models of Fullerenes, Carbon Single-Walled Nanotubes (SWNTs) and Graphene.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **16**, 2680-2686 (2015) CLAVE=A
- 452.- AUTORES: A-M. Lamsabhi, S. Gutierrez-Oliva, O. Mó, A. Toro-Labbé and M. Yáñez  
TITULO: *Effects of the Ionization in the Tautomerism of Uracil: A Reaction Electronic Flux Perspective.*  
REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **36**, 2135-2145 (2015) CLAVE=A
- 453.- AUTORES: Oriana Brea, Manuel Yáñez, Otilia Mó, and Al Mokhtar Lamsabhi.  
TITULO: *Why is the spontaneous deprotonation of [(Uracil)<sub>2</sub>Cu]<sup>2+</sup> Complexes accompanied by an enolization of the system?*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **16**, 2375-2382 (2015) CLAVE=A
- 454.- AUTORES: Oriana Brea, Otilia Mó, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Ga<sup>+</sup> Basicity and Affinity Scales Based on High-Level Ab Initio Calculations.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **16**, 2306-2313 (2015) CLAVE=A
- 455.- AUTORES: Julia Guilleme, Lara Martínez-Fernández, Inés Corral, Manuel Yáñez, David

- González-Rodríguez, and Tomás Torres.  
TITULO: *Direct Access to Axial Substituted Subphthalocyanines from Trimethylsilyl-Protected Nucleophiles.*  
REF. REVISTA: Organic Lett. **17**, 4722-4725 (2015) CLAVE=A
- 456.- AUTORES: Kateryna Mykolayivna-Lemishko, Giovani Bistoni, Leonardo Belpassi, Francesco Tarantelli, M. Merced Montero-Campillo and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Charge Transfer in Beryllium Bonds and Cooperativity of Beryllium and Halogen Bonds. A new Perspective.*  
REF. REVISTA: Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics. Applications of Topological Methods in Molecular Chemistry. Invited Chapter. 461-489. R. Chauvin et al. Eds. Springer Int. CH (2016) CLAVE=CL
- 457.- AUTORES: Marta Marín-Luna, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Fullerene and corannulene derivatives acting as insulators of Cl<sup>-</sup> and BeH<sub>2</sub>.*  
REF. REVISTA: PhysChemChemPhys **18**, 6059-6068 (2016) CLAVE=A
- 458.- AUTORES: A. Martin-Somer, M. Yáñez, W.L. Hase, MP. Gaigeot, and R. Spezia.  
TITULO: *Post Transition State Dynamics in Gas Phase Reactivity: The Importance of Bifurcations and Rotational Activation*  
REF. REVISTA: J. Chem.Theory. Comp **12**, 974-982 (2016) CLAVE=A
- 459.- AUTORES: M.Merced Montero-Campillo, Otilia Mó, Manuel Yáñez, Abdessamad Benidar, Cedric Rouxel, Nicolas Kerisit, Y. Trolez and Jean Claude Guillemin  
TITULO: *Gas Phase Infrared Spectroscopy of Substituted Cyanobutadiynes. The Role Played by Bromine Atom and Methyl Group as Substituents.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **17**, 1018-1024 (2016) CLAVE=A
- 460.- AUTORES: Al Mokhtar Lamsabhi, Margarita M. Vallejos, Barbara Herrera, Otilia Mó, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Effect of beryllium bonds on the keto-enol tautomerism of formamide derivatives. A subtle basicity-acidity balance.*  
REF. REVISTA: Theor. Chem. Acc. **135**, 147 (9 pgs.) (2016) CLAVE=A
- 461.- AUTORES: Oriana Brea, Ibon Alkorta, Otilia Mó, Manuel Yáñez, José Elguero, Inés Corral.  
TITULO: *Exergonic and spontaneous production of radicals through beryllium bonds.*  
REF. REVISTA: Angew. Chem. Int. Ed. **55**, 8736-8739 (2016) CLAVE=A
- 462.- AUTORES: M.Merced Montero-Campillo, Al Mokhtar Lamsabhi, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Photochemical Behavior of Beryllium Complexes With Subporphyrazines and Subphthalocyanines*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **120**, 4845-4852 (2016) CLAVE=A
- 463.- AUTORES: Elena Kusevska, M.Merced Montero-Campillo, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Boron-Boron One Electron Sigma Bonds vs. B-X-B bridge structures.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **22**, 13697-13704 (2016) CLAVE=A
- 464.- AUTORES: Oriana Brea, Ibon Alkorta, Inés Corral, Otilia Mó, Manuel Yáñez, José Elguero.  
TITULO: *Intramolecular beryllium bonds. Further insights into resonance assistance phenomena.*  
REF. REVISTA: Intermolecular Interactions in Crystals: Fundamentals of Crystal Engineering. Ed

J. J. Novoa. (submitted)

CLAVE=CL

- 465.- AUTORES: Manuel Yáñez.  
TITULO: *Modelling intrinsic chemical properties through non-covalent interactions.*  
REF. REVISTA: European Acad. Of Sciences 2015 Annual Report CLAVE=A
- 466.- AUTORES: Oriana Brea, Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, José Elguero.  
TITULO: *On the existence of intramolecular one-electron Be-Be bonds.*  
REF. REVISTA: Chem. Comm. **52**, 9656-9659 (2016) CLAVE=A
- 467.- AUTORES: M.Merced. Montero-Campillo, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Beryllium Subphthalocyanines Self-Assembling Properties.*  
REF. REVISTA: Can. J. Chem. (in press) CLAVE=A
- 468.- AUTORES: Ana Martin-Somer, Ricardo Spezia and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Gas-phase reactivity of [Ca-formamide]<sup>2+</sup> complex: an example of different dynamical behaviours.*  
REF. REVISTA: Philosophical Trans. (submitted) (2016) CLAVE=A
- 469.- AUTORES: Oriana Brea, Ines Corral, Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, José Elguero.  
TITULO: *Beryllium-based Anion sponges close relatives of proton sponges.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. (in press) DOI: 10.1002/chem.201604325 CLAVE = A
- 470.- AUTORES: Jean-Yves Salpin, Violette Haldys, Vincent Steinmetz, Emmanuelle Leon, Manuel Yáñez, Mercedes M. Montero-Campillo.  
TITULO: *Protonation of Methyl-Uracils in the gas phase: the particular case of 3-Methyl-uracyl.*  
REF. REVISTA: to be submitted CLAVE=A
- 471.- AUTORES: Romain Ligny, Manuel Yáñez, Thierry Roisnel, Jean-Claude Guillemin, Yann Trolez  
TITULO: *One-step synthesis of conjugated enynenitriles from bromocynoacetylene.*  
REF. REVISTA: to be submitted. CLAVE=A

**ESTANCIAS EN CENTROS EXTRANJEROS**  
**(superiores a cuatro semanas)**

---

CENTRO: Carnegie- Mellon University  
LOCALIDAD: Pittsburgh PAIS: EEUU AÑO: 1974-76 DURACION: 2 años  
TEMA: Estancia postdoctoral con el Prof. Pople

---

CENTRO: Sydney University  
LOCALIDAD: Sydney PAIS: Australia AÑO: 2003 DURACION: 2 meses  
TEMA: Visiting Professor en el grupo del Profesor Leo Radom

---

CENTRO: Université d'Evry val d'Essonne  
LOCALIDAD: Evry PAIS: Francia AÑO: 2004 DURACION: 3 meses  
TEMA: Visiting Professor en el grupo de la Profesora Jeanine Tortajada

---

CENTRO: Université d'Evry val d'Essonne  
LOCALIDAD: Evry PAIS: Francia AÑO: 2006 DURACION: 2 meses  
TEMA: Visiting Professor en el grupo de la Profesora Jeanine Tortajada

---

CENTRO: Université d'Evry val d'Essonne  
LOCALIDAD: Evry PAIS: Francia AÑO: 2008 DURACION: 1 mes  
TEMA: Visiting Professor en el grupo de la Profesora Jeanine Tortajada

---

CENTRO: Université d'Evry val d'Essonne  
LOCALIDAD: Evry PAIS: Francia AÑO: 2009 DURACION: 1 mes  
TEMA: Visiting Professor en el grupo de la Profesora Jeanine Tortajada

---

CENTRO: École Nationale Supérieure de Chimie de Rennes  
LOCALIDAD: Rennes PAIS: Francia AÑO: 2010 DURACION: 1 mes  
TEMA: Visiting Professor en el grupo del Prof. Jean Claude Guillemin

---

CENTRO: Université d'Evry val d'Essonne  
LOCALIDAD: Evry PAIS: Francia AÑO: 2012 DURACION: 3 meses  
TEMA: Visiting Professor en el grupo de la Profesora Jeanine Tortajada

---

CENTRO: Dalhousie University  
LOCALIDAD: Dalhousie PAIS: Canada AÑO: 2012 DURACION: 3 meses  
TEMA: Sabatico en el grupo del Profesor Russell Boyd

---

CENTRO: Université d'Evry val d'Essonne  
LOCALIDAD: Evry PAIS: Francia AÑO: 2014 DURACION: 1 mes  
TEMA: Visiting Professor en el grupo de la Profesora Jeanine Tortajada

---

CENTRO: Université d'Evry val d'Essonne  
LOCALIDAD: Evry PAIS: Francia AÑO: 2015 DURACION: 1 mes  
TEMA: Visiting Professor en el grupo de la Profesora Jeanine Tortajada

---

## CONGRESOS

---

- TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 6th Symposium International on Chemical and Biochemical Reactivity  
LUGAR DE CELEBRACION: Jerusalem AÑO: 1973
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación invitada  
CONGRESO: Microsymposium on Quantum Chemistry.  
LUGAR DE CELEBRACION: Liblice (Checoslovaquia) AÑO: 1981
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicacion Invitada  
CONGRESO: Euchem Conference on IOn Chemistry. Gaseous vs. Solvated Ions  
LUGAR DE CELEBRACION: Lido di Ostia AÑO: 1982
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicacion Invitada  
CONGRESO: Symposium on the Chemistry of Heterocyclic Compounds (VIIIth) and of Nucleic Acid Components  
LUGAR DE CELEBRACION: Praga (Checoslovaquia) AÑO: 1984
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 11<sup>eme</sup> Colloque sur la Physique des Collisions Atomiques et Electroniques.  
LUGAR DE CELEBRACION: Metz (Francia) AÑO: 1986
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Miembro del Comité Organizador  
CONGRESO: First Europhysics Summer School on Chemical Physics  
LUGAR DE CELEBRACION: Santander (España) AÑO: 1986
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Director  
CONGRESO: Third Europhysics Summer School on Chemical Physics  
LUGAR DE CELEBRACION: Santander (España) AÑO: 1988
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: International Conference on the Physics of Multicharged Ions  
LUGAR DE CELEBRACION: Grenoble (Francia) AÑO: 1988
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de la Octava Sesión  
CONGRESO: Second Euchem Conference on the Gas Phase Ion Chemistry. Structure and Stereochemistry.  
LUGAR DE CELEBRACION: Frascati-Roma (Italia) AÑO: 1989
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Forty Years of Quantum Chemistry. An International Conference in Honor of Prof. J.A. Pople.  
LUGAR DE CELEBRACION: Athens, Georgia (U.S.A.) AÑO: 1989
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicacion Invitada  
CONGRESO: Second World Congress of Theoretical Organic Chemistry  
LUGAR DE CELEBRACION: Toronto (Canada) AÑO: 1990
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: XIX Congreso Internazionale dei Chimici Teorici dei Paesi di Espressione Latina.  
LUGAR DE CELEBRACION: Roma (Italia) AÑO: 1990
-

TIPO DE PARTICIPACION: Miembro del Comité Organizador  
CONGRESO: III Congreso de Física Atómica y Molecular  
LUGAR DE CELEBRACION: Toledo (España) AÑO: 1991

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de la Sesión Inaugural  
CONGRESO: I South European Conference of the Atomic and Molecular Physics.  
LUGAR DE CELEBRACION: Gandia (España) AÑO: 1992

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: XX Congreso de Químicos Teóricos de los Países de expresión Latina.  
LUGAR DE CELEBRACION: Mérida (Venezuela) AÑO: 1992

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: First Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics.  
LUGAR DE CELEBRACION: Lisboa (Portugal) AÑO: 1993

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: The Third World Congress of Theoretical Organic Chemists (WATOC'93)  
LUGAR DE CELEBRACION: Toyohashi (Japón) AÑO: 1993

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 8th International Congress of Quantum Chemistry  
LUGAR DE CELEBRACION: Praga (Republica Checa, junio de 1994) AÑO: 1994

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesión  
CONGRESO: The 5th European Symposium on Organic Reactivity. ESOR-V  
LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Compostela (España) AÑO: 1995

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Molecular Quantum Mechanics: Methods and Applications  
LUGAR DE CELEBRACION: Cambridge (Reino Unido) AÑO: 1995

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Workshop on Weakly Bonded Species in ionic gas-phase Reactions  
LUGAR DE CELEBRACION: Palaiseau (Francia) AÑO: 1996

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Fourth World Congress of Theoretically Oriented Chemists- WATOC'96  
LUGAR DE CELEBRACION: Jerusalem (Israel) AÑO: 1996

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesión  
CONGRESO: XXIII QTEL  
LUGAR DE CELEBRACION: Cáceres (España) AÑO: 1996

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: International Meeting on Localization and Transfer of Hydrogen  
LUGAR DE CELEBRACION: Madrid (España) AÑO: 1996

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Fourth European Workshop on FTMS

LUGAR DE CELEBRACION: Pont-à-Mousson (Francia) AÑO: 1997

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Recent Theoretical and Experimental Advances in Hydrogen-Bonded Clusters  
LUGAR DE CELEBRACION: Elounda, Creta AÑO: 1997

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Sixth European Symposium on Organic Reactivity ESOR VI  
LUGAR DE CELEBRACION: Louvain-la Neuve(Belgica) AÑO: 1997

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Hydrogen Transfer: Experiment and Theory  
LUGAR DE CELEBRACION: Berlin (Alemania) AÑO: 1997

---

TIPO DE PARTICIPACION: Profesor Invitado (4 Conferencias Plenarias)  
CONGRESO: 2da. Escuela Iberoamericana de Química Computacional y Diseño Molecular.  
LUGAR DE CELEBRACION: La Habana (Cuba) AÑO: 1998

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman of the Organizing Committee  
CONGRESO: Workshop on Computational Chemistry  
LUGAR DE CELEBRACION: Miraflores de la Sierra, Madrid (España) AÑO: 1998

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: XXIV QUITEL  
LUGAR DE CELEBRACION: Puebla de los Angeles (Mexico) AÑO: 1998

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: International Symposium on Gas-Phase Ion Chemistry and Physics  
LUGAR DE CELEBRACION: Rome (Italy) AÑO: 1998

---

TIPO DE PARTICIPACION: Profesor Invitado  
CONGRESO: International Conference in Honor John A. Pople.  
LUGAR DE CELEBRACION: Amelia Island Florida (USA) AÑO: 1999

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman of the Organizing Committee  
CONGRESO: International Symposium on Physical Organic Chemistry  
LUGAR DE CELEBRACION: Miraflores de la Sierra, Madrid (España) AÑO: 1999

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 5<sup>th</sup> World Congress of Theoretically Oriented Chemists.  
LUGAR DE CELEBRACION: Londres (Reino Unido) AÑO: 1999

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Inaugural  
CONGRESO: Energetique et Reactivite des Ions en Phase Gazeuse: Experience et Theorie.  
LUGAR DE CELEBRACION: Gif sur Yvette (Francia) AÑO: 1999

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: X<sup>th</sup> International Congress of Quantum Chemistry.  
LUGAR DE CELEBRACION: Menton (Francia) AÑO: 2000

---



TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 15<sup>th</sup> International Mass Spectrometry Conference.  
LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (España) AÑO: 2000

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Third European Conference on Computational Chemistry EUCCO-CC3.  
LUGAR DE CELEBRACION: Budapest (Hungria) AÑO: 2000

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: International Conference on: Electronic Structure: Prediction and Applications.  
LUGAR DE CELEBRACION: San Sebastián (España) AÑO: 2000

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 8<sup>th</sup> European Symposium on Organic Reactivity.  
LUGAR DE CELEBRACION: Cavtat (Dubrovnik) (Croatia) AÑO: 2001

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 9<sup>th</sup> International Conference on the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics.  
LUGAR DE CELEBRACION: S. Lorenzo del Escorial (España) AÑO: 2001

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesión  
CONGRESO: Electronic Structure and Chemical Reactivity.  
LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (España) AÑO: 2001

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 4<sup>th</sup> European Conference on Computational Chemistry.  
LUGAR DE CELEBRACION: Assisi (Italia) AÑO: 2002

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de la Sesión de clausura  
CONGRESO: Electronic Structure Principles and Applications (ESPA2002).  
LUGAR DE CELEBRACION: Sevilla (España) AÑO: 2002

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: HALCHEM Internacional Meeting  
LUGAR DE CELEBRACION: Cerdeña (Italia) AÑO: 2002

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Gordon Research Conference: Gaseous Ions: Structures, Energetics & Reactions  
LUGAR DE CELEBRACION: Ventura, California (USA) AÑO: 2003

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesión  
CONGRESO: Modelling Chemical Reactivity: from gas phase to solution and enzymes.  
LUGAR DE CELEBRACION: Nancy (Francia) AÑO: 2003

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: XIth Internacional Congreso of Quantum Chemistry 2003  
LUGAR DE CELEBRACION: Bonn (Alemania) AÑO: 2003

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 29th Congres Internacional des Chimistes Theoriciens d'Expression Latine  
LUGAR DE CELEBRACION: Marrakech (Marruecos) AÑO: 2003

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Seleccionada por el Comité Científico  
CONGRESO: 52nd ASMS conference on Mass Spectrometry  
LUGAR DE CELEBRACION: Nashville, Tennessee (USA) AÑO: 2004

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 5th European Conference on Computational Chemistry (EUCCOC5)  
LUGAR DE CELEBRACION: La Londe les Maures (Francia) AÑO: 2004

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Molecular Quantum Mechanics: The No Nonsense Path to Progress  
LUGAR DE CELEBRACION: Cambridge (Inglaterra) AÑO: 2004

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de sesión  
CONGRESO: XXX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina  
LUGAR DE CELEBRACION: Oporto (Portugal) AÑO: 2004

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Electronic Structure, Principles and Applications (ESPA2004)  
LUGAR DE CELEBRACION: Valladolid (España) AÑO: 2004

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 7th Congreso of the World Association of Theoretical Oriented Chemists (WATOC 2005)  
LUGAR DE CELEBRACION: Ciudad del Cabo (Sudáfrica) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Symposium in Honor of J.A. Pople. 229<sup>th</sup> ACS National Meeting  
LUGAR DE CELEBRACION: San Diego, CA (USA) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 10th European Symposium on Organic Reactivity  
LUGAR DE CELEBRACION: Roma (Italia) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 1<sup>o</sup> Symposium de Chimie et Biologie Analytiques : De la Molécule au Protéome  
LUGAR DE CELEBRACION: Montpellier (Francia) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Recent advances on the dynamics of atomic and molecular particles interacting with gas and solid targets (Workshop in honor of Antoine Salin)  
LUGAR DE CELEBRACION: Donostia (España) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: International Chemical Congress of Pacific basin Societies (Pacifichem2005)  
LUGAR DE CELEBRACION: Honolulu (USA) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: XX Bienal de la Real Sociedad Española de Química.  
LUGAR DE CELEBRACION: Lugo (España) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 89th Canadian Chemistry Conference  
LUGAR DE CELEBRACION: Halifax (Canada) AÑO: 2006

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: VII Girona Seminar on Chemical Bonding  
LUGAR DE CELEBRACION: Girona (Spain) AÑO: 2006

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Electronic Structure, Principles and Applications (ESPA2006)  
LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Compostela (España) AÑO: 2006

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia invitada  
CONGRESO: 6th European Conference on Computational Chemistry (EUCCOC6)  
LUGAR DE CELEBRACION: Tale (Eslovaquia) AÑO: 2006

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación invitada  
CONGRESO: 9th European Conference on Atoms Molecules & Photons (ECAMP IX)  
LUGAR DE CELEBRACION: Hersonissos, Creta (Grecia) AÑO: 2007

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman  
CONGRESO: Molecular Quantum Mechanics: Analytic Gradients and Beyond  
LUGAR DE CELEBRACION: Budapest (Hungría) AÑO: 2007

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 3rd Symposium on Theoretical Biophysics (TheoBio-07)  
LUGAR DE CELEBRACION: Cetraro, Calabria (Italia) AÑO: 2007

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de sesión  
CONGRESO: 11-European Symposium on Organic Reactivity (ESOR XI)  
LUGAR DE CELEBRACION: Faro (Portugal) AÑO: 2007

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia invitada  
CONGRESO: Conference of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC-2008)  
LUGAR DE CELEBRACION: Sydney (Australia) AÑO: 2008

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: The International Conference on the Theory and Applications of Computational Chemistry  
LUGAR DE CELEBRACION: Shanghai (China) AÑO: 2008

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Oral invitada  
CONGRESO: 19th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry 2008  
LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Compostela (España) AÑO: 2008

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia invitada  
CONGRESO: Meeting in Computational Chemistry  
LUGAR DE CELEBRACION: Kongsvinger (Noruega) AÑO: 2008

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesion  
CONGRESO: 13th International Congress on Quantum Chemistry  
LUGAR DE CELEBRACION: Helsinki (Finlandia) AÑO: 2009

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 7<sup>th</sup> Canadian Computational Chemistry Conference  
LUGAR DE CELEBRACION: Halifax (Canada) AÑO: 2009

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia invitada  
CONGRESO: Theoretical Chemistry: Modelling Reactivity from Gas Phase to Biomolecules and Solids.  
LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (Spain) AÑO: 2009

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: XXV QUITEL  
LUGAR DE CELEBRACION: S. Andrés (Colombia) AÑO: 2009

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Molecular Quantum Mechanics 2010. In honor of H.F. Schaefer  
LUGAR DE CELEBRACION: Berkeley, California (EEUU) AÑO: 2010

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesion  
CONGRESO: ESPA-2010. Electronic Structure Principles and Applications.  
LUGAR DE CELEBRACION: Oviedo (Spain) AÑO: 2010

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesion  
CONGRESO: ECAMP 2010. European Conference in Atoms, Molecules and Photons.  
LUGAR DE CELEBRACION: Salamanca (Spain) AÑO: 2010

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesión  
CONGRESO: 8<sup>th</sup> European Conference on Computational Chemistry  
LUGAR DE CELEBRACION: Lund (Suecia) AÑO: 2010

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: XXVI QUITEL  
LUGAR DE CELEBRACION: Biarritz (Francia) AÑO: 2010

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Canadian Society of Chemistry (CSC 2011) Conference  
LUGAR DE CELEBRACION: Montreal (Canada) AÑO: 2011

---

TIPO DE PARTICIPACION: Presidente del Comité Organizador  
CONGRESO: World Association of Theoretical and Computational Chemists. (WATOC-2011)  
LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Compostela (Spain) AÑO: 2011

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Inaugural Invitada.  
CONGRESO: Modeling Interactions in Biomolecules V.  
LUGAR DE CELEBRACION: Kutná Hora (Republica Checa) AÑO: 2011

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Anharmonicity in medium-sized molecules and clusters  
LUGAR DE CELEBRACION: Marne-La-Vallée (Francia) AÑO: 2012

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Canadian Society of Chemistry (CSC 2012) Conference  
LUGAR DE CELEBRACION: Calgary (Canada) AÑO: 2012

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Plenaria  
CONGRESO: ESPA-2012. Electronic Structure Principles and Applications.  
LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (Spain) AÑO: 2012

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairperson of session  
CONGRESO: Quantum Chemistry in the Solid State: Magnetic Coupling and Excited States. Symposium  
in honor of Ria Broer.  
LUGAR DE CELEBRACION: Groningen (The Netherlands) AÑO: 2012

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Plenaria  
CONGRESO: Modeling and Design of Molecular Materials 2012.  
LUGAR DE CELEBRACION: Wroclaw (Poland) AÑO: 2012

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesión  
CONGRESO: Theoretical Chemistry in Spain told by women. .  
LUGAR DE CELEBRACION: Tarragona (Spain) AÑO: 2013

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 7th Molecular Quantum Mechanics.  
LUGAR DE CELEBRACION: Lugano (Suiza) AÑO: 2013

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Workshop in “Topological approaches to Weak Interactions”.  
LUGAR DE CELEBRACION: Paris (Francia) AÑO: 2013

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: XVIII Workshop in “Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology  
LUGAR DE CELEBRACION: Paraty, Rio de Janeiro (Brasil) AÑO: 2013

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 9º ESPA- Electronic Structure Principles and Applications  
LUGAR DE CELEBRACION: Badajoz (Spain) AÑO: 2014

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 97th Canadian Chemistry Conference 2014  
LUGAR DE CELEBRACION: Vancouver (Canada) AÑO: 2014

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 9º ESPA- 14th Rencontre des Chimistes Theoriciens francophones  
LUGAR DE CELEBRACION: Paris (France) AÑO: 2014

---

TIPO DE PARTICIPACION: Plenary Lecture  
CONGRESO: Xth WATOC  
LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Chile (Chile) AÑO: 2014

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 15<sup>th</sup> Int. Congress of Quantum Chemistry (ICQC)  
LUGAR DE CELEBRACION: Pekin (China) AÑO: 2015

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: The Chemical Bonds at the 21<sup>th</sup> Century  
LUGAR DE CELEBRACION: Xiamen (China) AÑO: 2015

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada

CONGRESO: ICPEAC 2015

LUGAR DE CELEBRACION: Toledo (Spain)

AÑO: 2015

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada y presidente de sesión

CONGRESO: 10th European Conference on Computational Chemistry

LUGAR DE CELEBRACION: Fulda (Alemania)

AÑO: 2015

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada

CONGRESO: PACIFICHEM 2015 (The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015)

LUGAR DE CELEBRACION: Honolulu, Hawai (EEUU)

AÑO: 2015

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada

CONGRESO: 26th Austin Symposium on Molecular Structure and Dynamics

LUGAR DE CELEBRACION: Dallas, Texas (EEUU)

AÑO: 2016

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada

CONGRESO: ESPA 2016

LUGAR DE CELEBRACION: Castellón (Spain)

AÑO: 2016

---

TIPO DE PARTICIPACION: Miembro del Comité Científico

CONGRESO: European Symposium in Chemical Bond (ESCB1)

LUGAR DE CELEBRACION: Rouen (Francia)

AÑO: 2016

---

## TESIS DOCTORALES DIRIGIDAS

---

TITULO: Proyección de la Densidad de Carga Molecular en Componentes Esféricos. Un Nuevo Análisis de Población Electrónica

DOCTORANDO: Félix Escudero Molina

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 1982

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude

---

TITULO: Estudio Teórico de Equilibrios de Transferencia Protónica en Fase Gas.

DOCTORANDO: José Luis García de Paz

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 1985

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude

---

TITULO: Estudios de Resonancias Electrónicas en Moléculas y Cuasimoléculas

DOCTORANDO: Fernando Martín García

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 1986

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Apto cum Laude

---

TITULO: Cálculos ab initio y Análisis Topológico de la Basicidad frente a Monocationes

DOCTORANDO: Manuel Alcamí Pertejo

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 1990

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Apto cum Laude

---

TITULO: Estudio Teórico de Reacciones Ión Capa Abierta-Molécula de Interés en Astroquímica.

DOCTORANDO: Alberto Luna Fernández

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 1994

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Apto cum Laude

---

TITULO: Reacciones Cation-Molécula de Interés en Astroquímica y en la Química de los Elementos del Tercer y Cuarto Período.

DOCTORANDO: Ana Isabel González Jiménez

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 1999

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude por Unanimidad

---

TITULO: Contribution Experimentale et Theorique a l'étude de la basicité des groupements carbonyles et Thiocarbonyles vis-a-vis de I<sub>2</sub>, ICl et H<sup>+</sup>.

DOCTORANDO: Al Mokhtar Lamsabhi.

UNIVERSIDAD: Cadi Ayyad

AÑO: 2002

FACULTAD: Sciences

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude por Unanimidad

---

TITULO: Contribution a l'étude theorique par les méthodes ab initio des mecanismes reactionnels de processus interstellaires.

DOCTORANDO: Fatima Ijjaali

UNIVERSIDAD: Cadi Ayyad

AÑO: 2002

FACULTAD: Sciences

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude por Unanimidad

---

TITULO: Una Aproximación Teórica a la Química de los Calcógenos

DOCTORANDO: Pablo Sanz Mercado

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 2003

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude por Unanimidad

---

TITULO: Enlace y Perturbaciones de Enlace en Reacciones Ion-Molécula en Fase Gas.

DOCTORANDO: Inés Corral Pérez

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

FACULTAD: Ciencias

AÑO: 2005

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude y Mención Europea

**Esta Tesis Recibió el Premio a la Mejor Tesis de Química de la Comunidad Autónoma de Madrid en 2005.**

---

TITULO: Estudio de Enlaces y Reactividad Unimolecular de Dicationes Orgánicas en Fase Gas.

DOCTORANDO: Cristina Trujillo del Valle

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

FACULTAD: Ciencias

AÑO: 2008

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude

TITULO: Electron Capture Dissociation of Disulphides and Diselenides.

DOCTORANDO: José Antonio Gámez Martínez

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

FACULTAD: Ciencias

AÑO: 2010

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude y Mención Europea

TITULO: Reacciones en Fase gas de bases de Relevancia Bioquímica con  $\text{Ca}^{2+}$  y  $\text{Sr}^{2+}$ .

DOCTORANDO: Ane Eizaguirre Martínez de Antoñana

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

FACULTAD: Ciencias

AÑO: 2012

CALIFICACION: Apto cum Laude y Mención Europea

TITULO: Gas phase reactivity of Lewis-adducts and model biological systems. Quantum Chemistry and Molecular Dynamics perspectives.

DOCTORANDO: Ana Martín Sómer

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

FACULTAD: Ciencias

AÑO: 2014

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude y Mención Europea.

Tesis en cotutela con la Universidad d'Evry val d'Essonne.

---



## OTROS MERITOS O ACLARACIONES QUE DESEA HACER CONSTAR

---

### Premios

1. Premio Extraordinario de Licenciatura en Ciencias Químicas.  
Universidad de Santiago de Compostela.  
Julio de 1970.
2. Premio Nacional Fin de Carrera. Sección de Químicas.  
Marzo de 1971.
3. Ingreso en la **Orden Civil de Alfonso X el Sabio**, con categoría de Cruz.  
Julio de 1971.
4. Premio Extraordinario de Doctorado.  
Universidad Autónoma de Madrid.  
Enero de 1974.
5. **Premio de Investigación** de la Fundación de la U. A. M.  
Mayo de 1993.
6. **Premio de Investigación en Química Física** de la Real Sociedad Española de Química.  
Noviembre de 2001.
7. **Premio Científico Hispano Francés J. A. Betancourt J. Perronet**  
Marzo de 2003
8. Nombrado Académico Correspondiente de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales,  
Mayo, 2015

### Editor

- Editor de Journal of Molecular Structure (THEOCHEM) y en la Actualidad de Computational and Theoretical Chemistry
- Editor General de Anales de Química
- 

### Editorial Boards a los que perteneció o pertenece

- Mass Spectrometry Reviews
- The Open Chemical Physics Journal
- 

### Asociaciones a las que pertenece:

- Miembro del American Chemical Society desde Enero de 1976.
- Miembro de la Sociedad Europea de Física desde Enero de 1987.
- Miembro de la Real Sociedad Española de Física desde Enero de 1988.
- Miembro de la Real Sociedad Española de Química desde Enero de 2000.
- Miembro del Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular desde su fundación.
- Secretario del Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular 1988-1995.

### Revistas de las que es referee:

- Journal of Molecular Structure (THEOCHEM).
- Chemical Physics.

- Chemical Physics Letters
- Journal of the American Chemical Society.
- Angewandte Chemie
- Journal of Physical Chemistry A.
- Journal of Physical Chemistry B
- Journal of Physics B.
- Chemical Physics Research.
- Journal of Organic Chemistry
- Langmuir
- Theoretical Chemical Accounts
- Chemistry European Journal
- European Journal of Organic Chemistry.
- Organic & Biomolecular Chemistry
- Zeitsch. Für Anorg. Allg. Chemie
- European Physics Journal
- European Journal of Inorganic Chemistry.
- Physical Chemistry Chemical Physics.
- ChemPhysChem
- Molecules
- Molecular Physics
- Heteroatom Chemistry

### **Cargos Académicos**

- Director del Departamento de Química de Septiembre de 1994-Diciembre de 1997
- Director del Centro de Computación Científica de la Facultad de Ciencias de la UAM desde Mayo de 1998 a mayo de 2002.

### **Evaluaciones de Investigación y Docencia**

- 7 tramos de Investigación evaluados positivamente (periodo 1970-2000; 2000-2006; 2006-2012)
- 8 tramos de Docencia evaluados positivamente (periodo 1970-2000; 2000-2005; 2005-2010)

### **Comités Científicos de los que forma parte.**

- Vicechairman of the European Division of Computational Chemistry
- Comité Internacional del WATOC (World association of theoretical and computational chemists).
- Comisión de Evaluación para la promoción a Cátedras de la UAM.
- Comité Internacional de Evaluación de la Licenciatura de Química de las Universidades Portuguesas.
- Representante Español en el Comité del Programa COST D26.
- Comité de Evaluación de los Laboratorios de Química de la Ecole Polytechnique, Palaiseau.
- Comité de Evaluación del Profesorado de la Comunidad Valenciana
- Comité Internacional de Evaluación de Grupos de Investigación de las Universidades Portuguesas

.- Coordinador General del “European Master on Theoretical Chemistry and Computacional Modelling” proyecto Europeo que involucra a 47 Universidades Europeas de 8 países distintos. Este master ha recibido el EUROLABEL de la European Chemistry Thematic Network (C.N. EM0701). En estos momentos este es un master ERASMUS MUNDUS 2009-2015 coordinado por el Prof. Manuel Yáñez del Departamento de Química UAM. Prorrogado por tres ediciones más hasta 2019.

.- Coordinador General del Proyecto Europeo “Theoretical Chemistry and Computational Modelling “. Innovative Training Network (ITN) de European Commission. Research Executive Agency. **MSCA-ITN-EJD**. SEP-210137947 hasta 2019, que involucra a 12 Universidades Europeas y 9 Empresas privadas y Centros de HPC a nivel europeo.