



## Memoria correspondiente al curso 2021-22

### Departamento de Química Física



<https://produccioncientifica.usal.es/grupos/unidades/1886/listado>



<https://www.usal.es/departamento-de-Quimica-Fisica>



#### Áreas de conocimiento

Química Física

### Índice

- 1.- Órganos de gobierno unipersonales
- 2.- Personal Docente Investigador
- 3.- Personal de Administración y Servicios
- 4.- Docencia
- 5.- Trabajos dirigidos: TFMs, TFGs y Estancias predoctorales
- 6.- Proyectos de Investigación
- 7.- Tesis Doctorales dirigidas
- 8.- Publicaciones
- 9.- Otros



## 1. Cargos unipersonales

### Dirección del departamento

#### Dtora. Dpto. Química Física

- María Dolores Merchán Moreno  
Profesora Titular de Universidad en el área Química Física ( 27/10/2020-Actualmente )

#### Subdtora. Dpto. Química Física

- María Jesús Sánchez Montero  
Profesora Titular de Universidad en el área Química Física ( 28/10/2020-Actualmente )

#### Secretaria Dpto. Química Física

- Susana Raquel Gómez Carrasco  
Profesora Contratada Doctor en el área Química Física ( 28/10/2020-Actualmente )

### Resto de cargos

- **Decana Fac. de Ciencias Químicas** , María del Mar Canedo Alonso, Profesora Contratada Doctor en el área de Química Física (28/06/2021-Actualmente)
- **Vicedecana de Economía, Investigación y Movilidad Fac. Farmacia** , Margarita Valero Juan, Profesora Titular de Universidad en el área de Química Física (28/10/2020-Actualmente)
- **Vicedecano de Docencia y Calidad. Fac. CC Químicas** , José Luis Usero García, Profesor Titular de Universidad en el área de Química Física (29/06/2021-Actualmente).
- **Responsable Técnico de la Organización y Desarrollo de las Pruebas de Acceso de la Universidad** Emilio Calle Martín
- **Miembro electo de la Junta del PDI de la Universidad de Salamanca:** M<sup>a</sup> del Pilar García Santos.
- **Secretaria de la Junta de Gobierno de la Sección Territorial de Salamanca de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ-STS)** desde 2015.: M<sup>a</sup> del Pilar García Santos.
- **Directora de la Unidad de Excelencia de Nanoelectrónica y Nanomateriales:** USAL-NANOLAB desde 1 de Junio de 2017. M<sup>a</sup> Mercedes Velázquez Salicio.



## 2. Personal Docente e Investigador

### Química Física

**Aldegunde Carrión, Jesús José**

Profesor Titular de Universidad - Fac. Ciencias Químicas

**Bello Estévez, José-Felipe**

Profesor Titular de Universidad - Fac. Farmacia

**Calle Martín, Emilio**

Profesor Titular de Universidad - Fac. Ciencias Químicas

**Canedo Alonso, María del Mar**

Profesora Contratada Doctor - Fac. Ciencias Químicas

**García Jambrina, Pablo**

Profesor Titular de Universidad - Fac. Farmacia

**García Roig, Manuel**

Catedrático de Universidad - Fac. Ciencias Químicas

**García Santos, María Pilar**

Profesora Titular de Universidad - Fac. Ciencias Químicas

**González Blanco, María Carmen**

Profesora Asociada - Fac. Ciencias Químicas

**González Hernández, José Luis**

Profesor Titular de Universidad - Fac. Ciencias Químicas

**González Sánchez, María Dolores**

Profesora Titular de Universidad - Fac. Ciencias Químicas

**Gómez Carrasco, Susana Raquel**

Profesora Contratada Doctor - Fac. Farmacia

**López Díaz, David**

Profesor Ayudante Doctor - Fac. Ciencias Químicas

**Merchán Moreno, María Dolores**

Profesora Titular de Universidad - Fac. Ciencias Químicas

**Salvador Palacios, Francisco**

Profesor Emérito - Fac. Ciencias Químicas

**Sánchez Hernández, Ana María**

Profesora Asociada - Fac. Ciencias Químicas

**Sánchez Montero, María Jesús**

Profesora Titular de Universidad - Fac. Farmacia

**Usero García, José Luis**

Profesor Titular de Universidad - Fac. Ciencias Químicas



**Valero Juan, Margarita**

Profesora Titular de Universidad - Fac. Farmacia

**Velázquez Salicio, María Mercedes**

Catedrática de Universidad - Fac. Ciencias Químicas



## Resto de Personal Docente e Investigador

**Corzo Gualdrón, Aura Marcela**

Investigador Predoctoral en Formación - Fac. Ciencias Químicas

**Daoudi, Rania**

Investigador Predoctoral en Formación - Fac. Ciencias Químicas

**Gómez Rodríguez, Sandra**

Investigadora Distinguida - Fac. Ciencias Químicas

**Ortega Álvarez, Pablo**

Investigador Predoctoral en Formación - Fac. Ciencias Químicas

**Veselinova Marinova, Anzhela**

Investigadora Predoctoral en Formación - Fac. Ciencias Químicas



### **3.- Personal de Administración y Servicios**

**María del Pilar Berzal Rubio**

**María Teresa Manzano Muñoz**

**Montserrat Sierra Ramos**



## 4.- Docencia

Facultad de Ciencias [208] - GRADO EN FISICA [208]				
Asignatura	ECTS	Semestre	Docentes	Áreas
QUÍMICA I [100866]	9	S9	María del Mar Canedo Alonso	755-Química Física
QUÍMICA I [100866]	9	S9	Emilio Calle Martín	755-Química Física

Facultad de Farmacia [201] - GRADO EN FARMACIA [201]				
Asignatura	ECTS	Semestre	Docentes	Áreas
BIOFÍSICA [100144]	5	S1	Margarita Valero Juan	755-Química Física
TÉCNICAS INSTRUMENTALES [100109]	6	S2	Jesús Aldegunde Carrión Susana Raquel Gómez Carrasco María Jesús Sánchez Montero David López Díaz María Carmen González Blanco Ana María Sánchez Hernández	755-Química Física
FÍSICA APLICADA Y FISICOQUÍMICA I [100104]	5	S1	Jesús José Aldegunde Carrión José-Felipe Bello Estévez María Pilar García Santos  Pablo García Jambrina  Susana Raquel Gómez Carrasco  María Jesús Sánchez Montero  Pablo Ortega Álvarez (Colaborador docente)	755-Química Física
FÍSICA APLICADA Y FISICOQUÍMICA II [100105]	5	S2	Susana Raquel Gómez Carrasco María Pilar García Santos Margarita Valero Juan  Jesús José Aldegunde Carrión Pablo García Jambrina Ana María Sánchez Hernández Anzhela Veselinova Marinova (Colaboradora docente)	755-Química Física

Facultad de Ciencias Agrarias y Ambientales [M119] - MÁSTER UNIVERSITARIO EN INGENIERÍA AGRONÓMICA [M119]				
Asignatura	ECTS	Semestre	Docentes	Áreas
CONTROL QUÍMICO-FÍSICO DE PROD.AGR.TÉCN.ESPECTROSCÓ. CUANTIF. [303986]	3	S1	Margarita Valero Juan	755-Química Física



Facultad de Educación [M146] - M. U. EN PROFESOR E.S.O. Y BACHILLERATO, FORM. PROF. Y ENSEÑANZA DE IDIOMAS [M146]				
Asignatura	ECTS	Semestre	Docentes	Áreas
EVALUACIÓN EN LA ESPECIALIDAD DE FÍSICA Y QUÍMICA [305074]	3	S2	María Dolores Merchán Moreno	755-Química Física
PRACTICUM DE OBSERVACIÓN EN LA ESPECIALIDAD DE FÍSICA Y QUÍMICA [305079]	6	S2	María Dolores Merchán Moreno	755-Química Física
PRACTICUM DE INTERVENCIÓN EN LA ESPECIALIDAD DE FÍSICA Y QUÍMICA [305080]	6	S2	María Dolores Merchán Moreno	755-Química Física
INNOVACIÓN DOCENTE EN LA ESPECIALIDAD DE FÍSICA Y QUÍMICA [305077]	3	S2	María Dolores Merchán Moreno	755-Química Física

Facultad de Ciencias Químicas [241] - GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA [241]				
Asignatura	ECTS	Semestre	Docentes	Áreas
QUÍMICA FÍSICA [104103]	4,5	S1	María Dolores Merchán Moreno María del Mar Canedo Alonso David López Díaz Pablo Ortega Álvarez (Colaborador docente)	755-Química Física
EXPERIMENTACIÓN EN QUÍMICA [104109]	7,5	S2	María Mercedes Velázquez Salicio David López Díaz María Carmen González Blanco	755-Química Física
TERMODINÁMICA APLICADA [104114]	6	S1	María Dolores Merchán Moreno María del Mar Canedo Alonso David López Díaz	755-Química Física
CINÉTICA QUÍMICA [104123]	4,5	S1	María Mercedes Velázquez Salicio Francisco Salvador Palacios David López Díaz	755-Química Física



Facultad de Ciencias Químicas [240] - GRADO EN QUÍMICA [240]				
Asignatura	ECTS	Semestre	Docentes	Áreas
OPERACIONES BÁSICAS DE LABORATORIO [104003]	9	S1	Francisco Salvador Palacios María del Mar Canedo Alonso Emilio Calle Martín David López Díaz Pablo Ortega Álvarez (Colaborador docente)	755-Química Física
EXPERIMENTACIÓN EN QUÍMICA FÍSICA [104021]	6	S1	María del Mar Canedo Alonso Emilio Calle Martín María Carmen González Blanco Pablo García Jambrina María Dolores Merchán Moreno José Luis Usero García	755-Química Física
QUÍMICA I [104002]	9	S1	María del Mar Canedo Alonso Emilio Calle Martín	755-Química Física
QUÍMICA FÍSICA III [104018]	6	S1	María Mercedes Velázquez Salicio María Dolores González Sánchez	755-Química Física
QUÍMICA FÍSICA II [104013]	6	S2	José Luis Usero García María Dolores Merchán Moreno	755-Química Física
QUÍMICA FÍSICA I [104012]	9	S1	María Dolores González Sánchez José Luis Usero García Jesús José Aldegunde Carrión Pablo García Jambrina Anzhela Veselinova Marinova (Colaboradora docente) Pablo Ortega Álvarez (Colaborador docente)	755-Química Física
QUÍMICA FÍSICA APLICADA [104036]	6	S1	María Dolores González Sánchez Jesús José Aldegunde Carrión	755-Química Física



Facultad de Ciencias Químicas [M165] - MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA SUPRAMOLECULAR [M165]				
Asignatura	ECTS	Semestre	Docentes	Áreas
TÉCNICAS DE CARACTERIZACIÓN DE NANOMATERIALES EN DISOLUCIÓN [305551]	3	S2	David López Díaz María Mercedes Velázquez Salicio	755-Química Física
QUÍMICA FÍSICA SUPRAMOLECULAR [305536]	3	S1	María Pilar García Santos José Luis Usero García María Mercedes Velázquez Salicio	755-Química Física
TÉCNICAS DE CARACTERIZACIÓN DE NANOMATERIALES EN SUPERFICIES [305547]	3	S1	David López Díaz María Dolores Merchán Moreno María Mercedes Velázquez Salicio	755-Química Física
NANOMATERIALES BIDIMENSIONALES [305546]	3	S1	Manuel García Roig María Jesús Sánchez Montero	755-Química Física
BIOQUÍMICA COMPUTACIONAL. [306066]	5	A0	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física
COMPETENCIA CIENTÍFICA Y LINGÜÍSTICA TRANSVERSAL.	5	A0	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física

Facultad de Ciencias Químicas [M186] - MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA TEÓRICA Y MODELIZACIÓN COMPUTACIONAL [M186]				
Asignatura	ECTS	Semestre	Docentes	Áreas
DE LA TEORÍA A LA IMPLEMENTACIÓN: TUTORIALES EN QUÍMICA TEÓRICA. [306071]	6	S2	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física
DINÁMICA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS. [306060]	5	A0	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física
ESTADOS EXCITADOS. [306061]	5	A0	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física
FUNDAMENTOS MATEMÁTICOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA. [306051]	5	A0	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física
LABORATORIO DE QUÍMICA TEÓRICA APLICADA. [306064]	5	A0	Pablo García Jambrina Jesús José Aldegunde Carrión	755-Química Física
LÁSERES. [306065]	5	A0	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física
LINUX Y LINUX DE GESTIÓN. [306063]	5	A0	María Dolores González Sánchez Pablo García Jambrina Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física
MECÁNICA ESTADÍSTICA Y APLICACIONES EN SIMULACIÓN. [306052]	5	A0	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física
MÉTODOS AVANZADOS EN ESTRUCTURA ELECTRÓNICA, DINÁMICA Y MODELIZACIÓN MOLECULAR. [306057]	12	A0	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física
MÉTODOS DE LA QUÍMICA TEÓRICA I. [306055]	5	A0	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física

**Facultad de Ciencias Químicas [M186] - MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA TEÓRICA Y MODELIZACIÓN COMPUTACIONAL [M186]**

Asignatura	ECTS	Semestre	Docentes	Áreas
MÉTODOS DE LA QUÍMICA TEÓRICA II. [306056]	5	A0	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física
MÉTODOS TEÓRICOS PARA LA SIMULACIÓN DE MATERIALES. [306068]	6	S2	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física
MODELIZACIÓN DE ESTRUCTURA ELECTRÓNICA. [306072]	6	S2	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física
MODELIZACIÓN MULTIESCALA DE SISTEMAS MOLECULARES COMPLEJOS. [306073]	6	S2	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física
MULTIESCALA, MACHINE LEARNING Y MÉTODOS QSAR APLICADOS A BIOMOLÉCULAS. [306067]	6	S2	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física
PROFUNDIZACIÓN EN LOS MÉTODOS DE LA QUÍMICA TEÓRICA. [306059]	5	A0	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física
PROYECTO DE PROGRAMACIÓN DE QUÍMICA COMPUTACIONAL. [306070]	6	S2	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física
QUÍMICA DE SUPERFICIES E INTERFASES: EXPERIMENTACIÓN Y MODELIZACIÓN. [306074]	6	S2	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física
SIMETRÍA EN ÁTOMOS, MOLÉCULAS Y SÓLIDOS. [306053]	5	A0	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física
SÓLIDOS. [306062]	5	A0	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física
TÉCNICAS COMPUTACIONALES AVANZADAS. [306069]	6	A0	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física
TÉCNICAS COMPUTACIONALES Y CÁLCULO NUMÉRICO. [306054]	5	A0	Susana Raquel Gómez Carrasco	755-Química Física

**Facultad de Biología [295] - GRADO EN BIOTECNOLOGÍA [295]**

Asignatura	ECTS	Semestre	Docentes	Áreas
QUÍMICA [109503]	4,5	S1	Manuel García Roig	755-Química Física
TERMODINÁMICA Y CINÉTICA QUÍMICA [109507]	6	S2	Manuel García Roig	755-Química Física
TÉCNICAS INSTRUMENTALES AVANZADAS [109521]	4,5	S2	María Pilar García Santos	755-Química Física



## 5. Trabajos dirigidos: TFM's , TFG's y Estancias predoctorales

### MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA TEÓRICA Y MODELIZACIÓN COMPUTACIONAL (TRABAJO FIN DE MÁSTER)

- Título: **Estudio computacional de la adición de O<sub>2</sub> molecular a 2-metil-3,4-dihidro-1-naftol prohibido por espín.**  
Estudiante: **ANTONIO PULGAR RUBIO**  
Director: **Pablo García Jambrina**  
Codirectora: **Sara Gil Guerrero**  
Fecha de lectura: **17/09/2021**
- Título: **Estudio Computacional de tiempos de retención para inhibidores de tubulina.**  
Estudiante: **NURIA ANGUITA ORTIZ**  
Director: **Pablo García Jambrina**  
Codirector/a: **Sara Gil Guerrero**  
Fecha de lectura: **17/09/2021**

### MU PROFESOR E.S.O. Y BACHILLERATO, FORM. PROF. Y E. IDIOMAS (TFM FÍSICA Y QUÍMICA (ESPECIALIDAD))

- Título: **DISEÑO DE RECURSOS DOCENTES PARA FOMENTAR EL TRABAJO AUTÓNOMO EN SECUNDARIA. UNIDAD DIDÁCTICA "ESTRUCTURA ATÓMICA".**  
Estudiante: **NOEMY RODRÍGUEZ SÁNCHEZ**  
Directora: **María Dolores Merchán Moreno**  
Fecha de lectura: **16/06/2022**
- Título: **LA ENSEÑANZA BILINGÜE EN LA ESPECIALIDAD DE FÍSICA Y QUÍMICA. EJEMPLO Y DISEÑO DE UNA UNIDAD DIDÁCTICA.**  
Estudiante: **JOSÉ MARTÍNEZ CANO**  
Directora: **M. Dolores Merchán Moreno**  
Fecha de lectura: **12/07/2022**
- Título: **Los Museos de Ciencia como recurso didáctico en Física y Química en Enseñanza Secundaria y Bachillerato.**  
Estudiante: **ALVARO GONZALEZ VILLORIA**  
Directora: **María Dolores Merchán Moreno**  
Fecha de lectura: **16/06/2022**



**MU EN QUÍMICA SUPRAMOLECULAR (TRABAJO FIN DE MÁSTER)**

- Título: **Preparación, caracterización y aplicaciones de materiales híbridos de óxido de grafeno y óxidos metálicos.**  
Estudiante: **LUIS FERNÁNDEZ GALLEGO**  
Directores: **M. Dolores Merchán Moreno y David López Díaz**  
Fecha de lectura: **21/07/2022**
  
- Título: **Inclusión de fármacos antineoplásicos en ciclodextrinas: síntesis y estudio termodinámico.**  
Estudiante: **JAVIER FORTUOSO MARTÍN**  
Directores: **M. Pilar García Santos y Joaquín Rodríguez Morán**  
Fecha de lectura: **20/09/2022**
  
- Título: **Estudio de la deformación de la estructura de puntos cuánticos debido a la funcionalización.**  
Estudiante: **MAGDALENA SOFIA ISDASHL TROYE**  
Directores: **M<sup>a</sup> Mercedes Velázquez, Pablo García Jambrina y M<sup>a</sup> Dolores González Sánchez**  
Fecha de lectura: **09/2022**



**GRADO EN QUÍMICA (TRABAJO FIN DE GRADO)**

- Título: **Análisis de la Formación de Dímeros del Cation Denatonio en fase gaseosa por ionización de Electrospray Espectrometría de Masas.**  
Estudiante: **CECILIA ISABEL GARCÍA BRUGAROLAS**  
Director: **Pablo García Jambrina**  
Codirectora: **Anzhela Veselinova Marinova**  
Fecha de lectura: **23/09/2021**
- Título: **Espectroscopía Raman de materiales quirales de espesor sub-nanométrico.**  
Estudiante: **ELIZABETH CASTAÑO HERNÁNDEZ.**  
Directora: **María Mercedes Velázquez Salicio**  
Codirector: **José Manuel Caridad Hernández.**  
Fecha de lectura: **24/03/2022**
- Título: **Simulación del espectro de absorción del yodo gaseoso.**  
Estudiante: **RAÚL GONZÁLEZ TURIENZO.**  
Director: **Jesús José Aldegunde Carrión.**  
Fecha de lectura: **24/03/2022.**
- Título: **Validez de la Ecuación Cúbica de Estado de Redlich-Kwong para la Estimación de Propiedades Termodinámicas.**  
Estudiante: **MARÍA AZPILICUETA COLÁS.**  
Directora: **María Dolores Merchán Moreno**  
Fecha de lectura: **23/09/2021.**
- Título: **Procesos Catalíticos para la transformación de dióxido de carbono.**  
Estudiante: **AURORA RÍO CALONGE.**  
Directora: **M. Dolores Merchán Moreno.**  
Fecha de lectura: **19/07/2022.**
- Título: **Activación y caracterización de fibras de carbón para retención de CO<sub>2</sub>.**  
Estudiante: **ANA HERNÁNDEZ GARCÍA.**  
Directora: **M. Dolores Merchán Moreno.**  
Fecha de lectura: **19 de julio de 2022.**
- Título: **Química del Universo Temprano: colisiones de HeH<sup>+</sup> con He.**  
Estudiante: **MARÍA MALLO ÁLVAREZ.**  
Directora: **M<sup>a</sup> Dolores González Sánchez.**  
Coodirectora: **Anzhela Veselinova Marinova.**  
Fecha de lectura: **19/07/2022.**



- Título: **Estructura fina de moléculas diatómicas 3Sigma.**  
Estudiante: **ALEJANDRO LUIS GARCÍA MUÑOZ.**  
Director: **Jesús Aldegunde Carrión.**  
Coodirectora: **M<sup>a</sup> Dolores González Sánchez .**  
Fecha de lectura: **20/07/2022.**
  
- Título: **Mecanismo de Nitrosación de la Dopamina en Medio Ácido Acético y Clorhídrico.**  
Estudiante: **LAURA CASTAÑO MANGAS.**  
Director: **Emilio Calle Martín.**  
Fecha de lectura: **21/07/2022.**
  
- Título: **Preparación de perovskitas de haluro de plomo mediante el empleo de técnicas de superficie.**  
Estudiante: **DAVID DURÁN DEL VAL.**  
Director: **M<sup>a</sup> Mercedes Velázquez.**  
Coodirector: **David López Díaz.**  
Fecha de lectura: **21/07/2022.**



**ESTANCIAS PREDOCTORALES**

Estudiante de doctorado: **Maria João Martins.**

Entidad Financiadora de la estancia: **Fundação para a Ciência e Tecnologia del gobierno portugués (SFRH/BD/131433/2017 e COVID/BD/151933/2021).**

Fechas de estancia: **18 de abril a 20 mayo de 2022.**

Centro del estudiante: **Department of Chemistry - CICECO, University of Aveiro, 3810-193 Aveiro, Portugal.**

Tutora: **M<sup>a</sup> Mercedes Velázquez Salicio.**

Estudiante de Doctorado: **Pablo Ortega Álvarez**

Entidad financiadora de la estancia: **Universidad de Salamanca**

Fechas estancia: **15 marzo - 15 junio**

Centro de estancia: **Department of Chemistry, University of Colorado Boulder, EEUU**

Tutores: **Pablo García Jambrina y M<sup>a</sup> Dolores González Sánchez**

## 6. Proyectos de Investigación

### Proyectos nacionales

- **APROVECHAMIENTO DE ACEITES USADOS DE MOTOR POR TRATAMIENTO CON AGUA EN ESTADO DE PLASMA.**  
Código: SA109G19  
Entidad Financiadora: CONSEJERÍA DE EDUCACIÓN Y CULTURA DE LA JUNTA DE CASTILLA Y LEÓN  
Investigador Principal: Francisco Salvador Palacios  
Investigadores: María Carmen Izquierdo Misiego, María Jesús Sánchez Montero, Ana María Sánchez Hernández, Nicolás Martín Sánchez  
Periodo de ejecución: 10/07/2019 - 30/09/2021
- **CON-CIENCIA de ríos y zonas húmedas del Sudoeste de Castilla y León.**  
Código: FCT-19-15200  
Entidad Financiadora: FUNDACION ESPAÑOLA PARA LA CIENCIA Y TECNOLOGIA FECYT  
Investigador Principal: Manuel García Roig  
Periodo de ejecución: 01/07/2020 - 30/09/2021
- **Cinética y mecanismos de reacciones de alquilación de las bases nitrogenadas del ADN.**  
Entidad Financiadora: UNIVERSIDAD DE SALAMANCA  
Investigadora Principal: María Pilar García Santos  
Investigadores: Emilio Calle Martín  
Periodo de ejecución: 01/06/2019 - 31/12/2021
- **Dinámica Adiabática y no Adiabática de Reacciones y Cruces Intersistema en Sistemas Biológicos.**  
Código: PID2020-113147GA-I00  
Entidad Financiadora: MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACION  
Investigador Principal: Pablo García Jambrina  
Investigadores: Jesús José Aldegunde Carrión, María Dolores González Sánchez, Susana Raquel Gómez Carrasco, Reynler Suardiaz del Río  
Periodo de ejecución: 01/09/2021 - 31/08/2024
- **Desarrollo de nuevos sensores ópticos y de nuevas técnicas de caracterización en los espectros visible y de Terahercios**  
Entidad Financiadora: CONSEJERÍA DE EDUCACIÓN Y CULTURA DE LA JUNTA DE CASTILLA Y LEÓN  
Investigador principal: **Meziani, Yahya Moubarak**  
Investigadores: **Enrique Diez Fernández, Jesús Enrique Velázquez Pérez, M. Dolores Merchán Moreno, María Mercedes Velázquez Salicio, María Pilar García Estévez.**  
Periodo de ejecución: **06/11/2020 a 31/10/2023**
- **Tecnologías basadas en materiales híbridos avanzados: grafeno, materiales 2D y aislantes topológicos. (SA256P18)**  
Entidad Financiadora: CONSEJERÍA DE EDUCACIÓN Y CULTURA DE LA JUNTA DE CASTILLA Y LEÓN  
Investigador principal: **Enrique Diez Fernández,**  
Investigadores: **Cristina Natalia Hernández Fuentesvilla, Jaime Calvo Gallego, Juan Domingo Lejarreta González, Paz Albares Vicente, María Mercedes Velázquez Salicio, David López Díaz, Meziani, Yahya Moubarak, Clericò, Vito, Jesús Enrique Velázquez Pérez, María Pilar García Estévez, M. Dolores Merchán Moreno, Mehdipour, Sanaz, Mario Amado Montero**  
Periodo de ejecución: **11/07/2018 a 31/10/2021**



- **Dynamics of chemical reactions and nanomaterials induced by ultrafast laser irradiation: Experiment and Theory.**

**Código:** PGC2018-096444-B-I00

Entidad Financiadora: **MINISTERIO DE CIENCIA, INNOVACIÓN Y UNIVERSIDADES**

Investigadores Principales: **Francisco Javier Aoiz Molerés y Luis Bañares Morcillo**

Investigadores USAL: **M<sup>a</sup> Dolores González Sánchez**

Periodo de ejecución: **01/01/2019 - 30/09/2022**

- **Estudio de mecanismos de nitrosación y alquilación. Reactividad de moléculas bioactivas.**

Miembro del GIR: M<sup>o</sup> del Pilar García Santos.

- **Presentación del poster titulado "Histidine, Leucine and Isoleucine as dietary supplements. Formation of N-nitrosocompounds" en el 8th EuChems Chemistry Congress (Lisboa, 28/8-1/9/2022). Autores: Aura Marcela Corzo Gualdrón y María del Pilar García Santos.**

- **Coherent photochemistry: modelling electronic wave packet propagation in molecular systems,**

PROYECTOS DE GENERACIÓN DE CONOCIMIENTO 2021

Investigador Principal: Javier Segarra-Martí

Otros investigadores: **Sandra Gómez**, Thierry Tran, Graham Worth

- **Towards complete quantum dynamics simulations including solvent, Royal Society International Exchanges (2020-2022)**

**Investigador principal:** Fabrizio Santoro, Graham Worth

Otros investigadores: James Green, Roberto Improta, **Sandra Gómez**



## Contratos y convenios de investigación

- **NANOLAB: Laboratorio de nanomateriales y nanoelectrónica, es un conjunto de equipos de investigación e instalaciones agrupados bajo estas temáticas comunes a todos.**

Entidad Financiadora: Servicios Técnicos Repetitivos

Investigador Principal: Enrique Díez Fernández, María Mercedes Velázquez Salicio

Investigadores: Yahya Moubarak Meziani , Tomás González Sánchez, Jesús Enrique Velázquez Pérez

Periodo de ejecución: 09/07/2015 - 31/12/2022



## 7. Tesis Doctorales dirigidas

- **Análisis macrotextual, terminológico y traductológico de los textos farmacéuticos y estudio de campo de la traducción farmacéutica en España**  
Doctorando: Francisco Bautista Becerro  
Directora: Margarita Valero Juan  
Fecha de defensa: 04/07/2022
- **Gasificación De Aceites Usados De Motor Con Vapor Y Agua Supercrítica**  
Doctorando: Ana María Sánchez Hernández  
Directora: María Jesús Sánchez Montero  
Fecha de defensa: 14/12/2021
- **Cinética de nitrosación de moléculas precursoras de posibles agentes alquilantes del ADN. Estudio de la alquilación de NBP y nucleósidos.**  
Doctorando: Aura Marcela Corzo Gualdrón  
Directora: María del Pilar García Santos  
Fecha de defensa: En proceso de elaboración.
- **Intersystem Crossing in systems lacking metal cofactors**  
Doctorando: Pablo Ortega Álvarez  
Directores: Pablo García Jambrina y M<sup>a</sup> Dolores González Sánchez.  
Fecha de defensa: En proceso de elaboración.
- **Estudio de reacciones de adición de oxígeno molecular en el centro activo de proteínas que no incluyen cofactores metálicos**  
Doctorando: Anzhela Veselinova Marinova  
Directora: Pablo García Jambrina y M<sup>a</sup> Dolores González Sánchez.  
Fecha de defensa: En proceso de elaboración.
- **Estudio de efectos cuánticos en la dinámica de reacciones que involucran transferencia de oxígeno molecular a sustratos orgánicos**  
Doctorando: Javier Hernández Rodríguez  
Directoras: Susana Gómez Carrasco y M<sup>a</sup> Dolores González Sánchez  
Fecha de defensa: En proceso de elaboración.

## 8.- Publicaciones

- Canedo Alonso, González Cuadra, J., & González-Hernández. (2021). ANN-MATOPT hybrid algorithm: determination of kinetic and non-kinetic parameters in different reaction mechanisms. *Journal of Mathematical Chemistry*, 59(9), 2021-2048. <https://doi.org/10.1007/s10910-021-01275-x>
- De Passos C, Merchán Moreno, M.D, Velázquez Salicio, M.M. (2022). Correlations between structure and photoluminescence properties in N-doped carbon nanoparticles. *Journal of Science: Advanced Materials and Devices* 7 (2022) 100408 <https://doi.org/10.1016/j.jsamd.2021.100408x>
- Durr, S. L., Bohuszewicz, O., Berta, D., Suardiaz, R., Jambrina, P. G., Peter, C., Shao, Y., & Rosta, E. (2021). The role of conserved residues in the DEDDh Motif: The proton-Transfer mechanism of HIV-1 RNase H. *ACS Catalysis*, 11, 7915-7927. <https://doi.org/10.1021/acscatal.1c01493>
- García Prieto, J. C., García Roig, M., Málaga Martín, D., Ramos Rodríguez, M. M., Gutiérrez del Valle, A., Burguillo Muñoz, F. J., Bello Estévez, F., del Arco Aláinez, M., Martín Castilla, R., & Rico Jiménez, J. C. (2021). La utilización de la educación y sensibilización ambiental en escolares como elemento clave para la implementación de medidas de adaptación al cambio climático: un caso práctico. En J. Melgarejo Moreno, I. López Ortiz, & P. Fernández Aracil (eds.), *Inundaciones y sequías: Análisis multidisciplinar para mitigar el impacto de los fenómenos climáticos extremos* (pp. 1279-1293). Universitat d'Alacant / Universidad de Alicante.
- Gianturco, Giri, González-Sánchez, Yurtsever, Sathyamurthy, & Wester. (2021). Efficiency of rovibrational cooling of HeH<sup>+</sup> by collisions with He: Cross sections and rate coefficients from quantum dynamics. *Journal of Chemical Physics*, 155(15). <https://doi.org/10.1063/5.0062147>
- Gianturco, Giri, González-Sánchez, Yurtsever, Sathyamurthy, & Wester. (2021). Energy-transfer quantum dynamics of HeH<sup>+</sup> with He atoms: Rotationally inelastic cross sections and rate coefficients. *Journal of Chemical Physics*, 154(5). <https://doi.org/10.1063/5.0040018>
- González-Burciaga, L. A., García-Prieto, J. C., García-Roig, M., Lares-Asef, I., Núñez-Núñez, C. M., & Proal-Nájera, J. B. (2021). Cytostatic drug 6-mercaptopurine degradation on pilot scale reactors by advanced oxidation processes: Uv-c/h<sub>2</sub>O<sub>2</sub> and uv-c/tiO<sub>2</sub>/h<sub>2</sub>O<sub>2</sub> kinetics. *Catalysts*, 11(5). <https://doi.org/10.3390/catal11050567>
- González-Sánchez, L., Yurtsever, E., Mant, B. P., Wester, R., & Gianturco, F. A. (2021). Collision-driven state-changing efficiency of different buffer gases in cold traps: He(1S), Ar(1S) and p-H<sub>2</sub>(1?) on trapped CN?(1?). *Physical Chemistry Chemical Physics*, 23(13), 7703-7713. <https://doi.org/10.1039/d0cp03440a>
- González-Sánchez, Yurtsever, Wester, & Gianturco. (2021). Dynamics of HeHHe+Rotational State Changes Induced by Collision with He: A Possible New Path in Early Universe Chemistry. *Journal of Physical Chemistry A*, 125(17), 3748-3759. <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.1c01820>
- Heid, C. G., Bentham, I. P., Walpole, V., Jambrina, P. G., Aoiz, F. J., & Brouard, M. (2021). Controlling the Spin-Orbit Branching Fraction in Molecular Collisions. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 12(1), 310-316. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.0c02941>
- Jambrina, Lara, M., & Aoiz. (2021). Signature of shape resonances on the differential cross sections of the S(1D)+H<sub>2</sub> reaction. *Journal of Chemical Physics*, 154(12). <https://doi.org/10.1063/5.0042967>
- Jambrina, P. G., Croft, J. F. E., Balakrishnan, N., & Aoiz, F. J. (2021). Stereodynamic control of cold rotationally inelastic CO + HD collisions. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 23(35), 19364-19374. <https://doi.org/10.1039/d1cp02755g>
- López-Díaz, D., Sánchez-Hidalgo, R., Velázquez Salicio, M. M., Martín-García, B., Alejo, T., & Merchán Moreno, M. D. (2021). Manufacturing ordered films of nanoparticles by Langmuir-Blodgett technique. En *Handbook of Modern Coating Technologies* (pp. 121- 138). <https://doi.org/10.1016/b978-0-444-63240-1.00005-x>



- Mant, B., Yurtsever, E., González-Sánchez, L., Wester, R., & Gianturco, F. A. (2021). Vibrational quenching of CN-in collisions with He and Ar. *Journal of Chemical Physics*, 154(8). <https://doi.org/10.1063/5.0039854>
- Martins, M.J., Velazquez Salicio, M.M, Merchán Moreno, M.D., López Diaz, D., Trindade, T., Nogueira, H., (2022) Assembly of EuPOM onto GO surfaces to produce luminescent films. IX Meeting on Colloids and Interfaces. Santiago de Compostela, 10-13 Julio 2022.
- Ortega, Gil-Guerrero, Veselinova, Zanchet, González-Sánchez, Jambrina, & Sanz-Sanz. (2021). Multi- and single-reference methods for the analysis of multi-state peroxidation of enolates. *Journal of Chemical Physics*, 154(14). <https://doi.org/10.1063/5.0046906>
- Ortega, P., Zanchet, A., Sanz-Sanz, C., Gómez-Carrasco, S., González-Sánchez, L., & Jambrina, P. G. (2021). DpgC-Catalyzed Peroxidation of 3,5-Dihydroxyphenylacetyl-CoA (DPA-CoA): Insights into the Spin-Forbidden Transition and Charge Transfer Mechanisms\*\*. *Chemistry - A European Journal*, 27(5), 1700-1712. <https://doi.org/10.1002/chem.202002993>
- Pabois, O., Ziolk, R. M., Lorenz, C. D., Prévost, S., Mahmoudi, N., Skoda, M. W. A., Welbourn, R. J. L., Valero, M., Harvey, R. D., Grundy, M. M.-L., Wilde, P. J., Grillo, I., Gerelli, Y., & Dreiss, C. A. (2021). Morphology of bile salts micelles and mixed micelles with lipolysis products, from scattering techniques and atomistic simulations. *Journal of Colloid and Interface Science*, 587, 522-537. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2020.10.101>
- Sanchez-Hernandez, A. M., Martin-Sanchez, N., Sanchez-Montero, M. J., Izquierdo, C., & Salvador, F. (2021). Efficiency and energetic analysis of the production of gaseous green fuels from the compressed steam and supercritical water gasification of waste lube oils. *Journal of Supercritical Fluids*, 174. <https://doi.org/10.1016/j.supflu.2021.105267>
- Sanderson, L., da Silva, M., Sekhar, G. N., Brown, R. C., Burrell-Saward, H., Fidanboyly, M., Liu, B., Dailey, L. A., Dreiss, C. A., Lorenz, C., Christie, M., Persaud, S. J., Yardley, V., Croft, S. L., Valero, M., & Thomas, S. A. (2021). Drug reformulation for a neglected disease. The nanohat project to develop a safer more effective sleeping sickness drug. *PLoS Neglected Tropical Diseases*, 15(4). <https://doi.org/10.1371/journal.pntd.0009276>
- Santos Sánchez, M. J., Beltrán, S., Merchán Moreno, M. D., Prieto Calvo, C., & Queiruga Dios, M. A. (2021). Experiencias de ciencia para acompañar pacientes oncohematológicos. En C. López Esteban (ed.), *Innovación en la formación de los futuros educadores de Educación Secundaria para el Desarrollo sostenible y ciudadanía mundial: modelos y experiencias en el Máster en Profesor de Educación Secundaria y Bachillerato, Formación Profesional y Enseñanza de Idiomas* (pp. 153-169). Ediciones Universidad de Salamanca.
- Valero, M., Hu, W., Houston, J. E., & Dreiss, C. A. (2021). Solubilisation of salicylate in F127 micelles: Effect of pH and temperature on morphology and interactions with cyclodextrin. *Journal of Molecular Liquids*, 322. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114892>
- Valero, Sultimova, N. B., Houston, J. E., & Levin, P. P. (2021). Naproxen sodium salt photochemistry in aqueous sodium dodecyl sulfate (SDS) ellipsoidal micelles. *Journal of Molecular Liquids*, 324. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114724>
- Veselinova, Agundez, Goicoechea, Menendez, Zanchet, Verdasco, Jambrina, & Aoiz. (2021). Quantum study of reaction O (3P) + H<sub>2</sub>(v,j) ? OH + H: OH formation in strongly UV-irradiated gas. *Astronomy and Astrophysics*, 648. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202140428>
- Yating Ye, L. Vega Martín, M. J. Sánchez Montero, López-Díaz D., Velázquez Salicio, M. M. and Merchán Moreno M. D.(2022). Optimizing the Properties of Hybrids Based on Graphene Oxide for Carbon Dioxide Capture. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2022, 61, 1332 – 1343  
<https://doi.org/10.1021/acs.iecr.1c02922>



- J. A. Green, **S. Gómez**, G. A. Worth, F. Santoro, R. Imbrota Solvent effects on ultrafast charge transfer population: insights from the quantum dynamics of Guanine-Cytosine in chloroform Chem. Eur. J. e202201731
- Presentación del poster titulado "Histidine, Leucine and Isoleucine as dietary supplements. Formation of N-nitrosocompounds" en el 8th EuChemS Chemistry Congress (Lisboa, 28/8-1/9/2022). Autores: Aura Marcela Corzo Gualdrón y María del Pilar García Santos.



## 9.- Otros

### Profª. M<sup>a</sup> del Pilar García Santos

- Asistencia al International Symposium on Thermodynamics of Metal Complexes (Valencia, 5-8/6/2022) y presentación del póster titulado "Cyclodextrins as anticancer drug delivery vehicle". Autores: *M. Pilar García Santos*, Ana Jiménez Amaya, José J. Garrido González, Inmaculada Dios Pérez, Ángel L. Fuentes de Arriba, Eva M. Martín del Valle, Joaquín R. Morán.
- Asistencia a la I Jornada de Innovación Docente de las Universidades Públicas de Castilla y León, organizada por el Grupo Interuniversitario de Formación en Innovación Docente FIUniCyL (Valladolid, 22/04/2022) y presentación del póster titulado "Metodologías activas en docencia semipresencial: herramientas para mejorar el aprendizaje y la evaluación".
- Asistencia a la 2nd ISMEC-NECTAR Training School on the Determination, Analysis and Use of Thermodynamics Data, SOLVE-Advances in SOLution Equilibria. Curso de Formación Online, 25-27/07/2022, 18 horas. Cost (European Cooperation in Science and Technology), Horizonte 2020.

### Profª. Mercedes Velázquez Salicio.

- Miembro de la Editorial board de la revista open Access desde 01/01/2021: Coatings.
- Participación en el programa de rtve la 2: La aventura del saber, dentro del espacio Universo sostenible con el tema ¿Cómo nos cambiara la nanotecnología?  
Fecha de emisión: 20 abril de 2022.

### Profª. Dolores González Sánchez

- Asistencia al 23rd European Conference on the Dynamics of Molecular Systems MOLEC 2022 (Hamburg, Germany, 21-26 agosto 2022) y presentación de la conferencia invitada "Study of gas-phase reactions of small systems with relevance in astrochemistry".  
Autora: M<sup>a</sup> Dolores González Sánchez
- Miembro del Tribunal de la Tesis Doctoral "Desarrollo de software científico e investigaciones en sistemas moleculares acuosos de impacto medioambiental y energético" defendida por D. Raúl Rodríguez Segundo el 25 de mayo de 2022 en la Universidad Autónoma de Madrid.
- Responsable del Proyecto de Innovación y Mejora Docente, en la convocatoria 2021-2022, con título: "DISEÑO DE PRÁCTICAS: PARTICIPACIÓN ACTIVA DEL ALUMNADO" (ID2021/147). Miembros del equipo: M<sup>a</sup> Dolores González Sánchez y Jesús Aldegunde Carrión.

### D. Pablo Ortega Álvarez.

- Asistencia al I PhD Day Facultad de Ciencias Universidad de Valladolid (Valladolid, 18/2/2022) y comunicación oral titulada "Oxígeno (O<sub>2</sub>) y cruces intersistema triplete-singlete".

### Dña. Anzhela Veselinova Marinova

- Asistencia al Virtual Winter School on Computational Chemistry 2022 (congreso online, 21/02/2022) y presentación en formato comunicación oral del póster "Calculation and fitting of Global Potential Energy Surfaces for the O+C<sub>2</sub> reaction". Autores: A. Veselinova, P. Ortega, S. Gómez-Carrasco, P. G. Jambrina, C. Sanz-Sanz, L. González-Sánchez.
- Asistencia a XIII Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular J2IFAM (Santiago de Compostela, 15/03/2022) y presentación de la comunicación oral "Global Potential Energy Surfaces for the O(3P) + C<sub>2</sub>(1Σ<sup>g+</sup>, 3Π<sub>u</sub>) reaction". Autores: A. Veselinova, P. Ortega, S. Gómez-Carrasco, P. G. Jambrina, C. Sanz-Sanz, L. González-Sánchez.



- Asistencia a 11th International Meeting on Atomic and Molecular Physics and Chemistry (Praga, 16/06/2022) y presentación de la comunicación oral "Accurate Global 3A" potential energy surface for the  $O(3P) + C_2(1\Sigma_g^+, 3\Pi_u)$  reaction". Autores: A. Veselinova, J. Hernández, P. G. Jambrina, L. González-Sánchez, S. Gómez-Carrasco, C. Sanz-Sanz.
- Asistencia a IV Jornadas de Jóvenes Investigadores en Ciencia y Tecnología Químicas (Universidad de Salamanca, 19/07/2022) y presentación de la comunicación oral "Accurate global potential energy surfaces for the lowest electronic states of OC2 system". Autores: A. Veselinova.

**Dña. Sandra Gómez Rodríguez**

- Conferencia WATOC 12th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, 03-08/07/22 Vancouver, Canada  
Presentación de póster "Probing non-adiabatic dynamics using Quantics" y premio al mejor póster (patrocinado por peerJ).
- Simposio Quantum Dynamics in Complex Systems, 14/06/22 CNR Pisa, Italy  
Ponencia invitada: "Complementing experiments in complex environments".
- Conferencia High dimensional quantum dynamics, 12-15/07/22 Groningen, Netherlands. Ponencia: "On-the-fly quantum VS classical dynamics on three molecular models"
- Conferencia online, Solid state Chemistry Interest Group meeting, 28-29/09/22 Royal Society of Chemistry  
Ponencia: "Simulating fluorescence pathways in Maleimide derivatives in the solid state"