
Curriculum vitae

Nombre: Octavio Roncero Villa

Fecha: 10/9/2011

APELLIDOS: RONCERO VILLA

NOMBRE: OCTAVIO

D.N.I.: 2525074

FECHA NACIMIENTO: 13/6/61

SEXO: V

Nº FUNCIONARIO: 2525074/68A5404

ESPECIALIZACION (CODIGO UNESCO): 2206,2207,2208

FORMACION ACADEMICA

LICENCIATURA/INGENIERIA

CENTRO

FECHA

Licenciado en CC. Químicas

U.Autónoma de Madrid

junio 1984

DOCTORADO

Doctor en CC. Químicas U.Autónoma mayo 1987

DIRECTOR(ES) DE TESIS: Prof. Pablo Villarreal Herrán

SITUACION PROFESIONAL

ORGANISMO: C.S.I.C.

FACULTAD, ESCUELA O INSTITUTO: Instituto de Matemáticas y Física Fundamental

DEPT./SECC./UNIDAD ESTR.: U.E. Física Atómica y Molecular Teórica

CATEGORIA PROFESIONAL Y FECHA DE INICIO: Investigador Científico, desde agosto de 2002

DIRECCION POSTAL: Serrano 123 E-28006-Madrid

TELEFONO (indicar prefijo, número y extensión): 91-5616800 ext 1124

E-MAIL: oroncero@imaff.cfmac.csic.es

PLANTILLA OTRAS SITUACIONES ESPECIFICAR:

CONTRATADO DEDICACION A TIEMPO COMPLETO

BECARIO A TIEMPO PARCIAL

INTERINO

ACTIVIDADES ANTERIORES DE CARACTER CIENTIFICO O PROFESIONAL

FECHAS

PUESTO

INSTITUCION

1985-1987 Becario Predoctoral C.S.I.C.

1988-1990 Becario Postdoctoral L.U.R.E. U. Paris-Sud (Francia)

1990-2002 Científico Titular C.S.I.C.

2002- Investigador Científico C.S.I.C.

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

IDIOMA HABLA LEE ESCRIBE

Inglés C C C

Francés C C C

Participación en Proyectos de I+D financiados en Convocatorias públicas
(nacionales y/o internacionales)

1. TÍTULO DEL PROYECTO: “ESTUDIO TEÓRICO DE PROCESOS DINÁMICOS EN FÍSICA ATÓMICA Y MOLECULAR”
ENTIDAD FINANCIADORA: C.A.Y.C.I.T./C.S.I.C.
PERIODO: 1985–1987 REFERENCIA: PR84-0085
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Prof. G. Delgado Barrio
CENTRO DE EJECUCIÓN: Instituto de Estructura de la Materia (C.S.I.C.)

2. TÍTULO DEL PROYECTO: “TRANSFERENCIA DE ENERGÍA Y FOTODISOCIACIÓN MOLECULAR”
ENTIDAD FINANCIADORA: Acción Integrada Hispano–Francesa
PERIODO: 1989 REFERENCIA: A.I. núm. 23
INVESTIGADOR PRINCIPAL FRANCÉS: Prof. J.A. Beswick
INVESTIGADOR PRINCIPAL ESPAÑOL: Prof. G. Delgado Barrio
CENTROS DE EJECUCIÓN: Instituto de Estructura de la Materia (C.S.I.C.) y L.U.R.E., Université Paris–Sud, Orsay.

3. TÍTULO DEL PROYECTO: “ESTUDIO TEÓRICO DE PROCESOS DINÁMICOS EN FÍSICA ATÓMICA Y MOLECULAR”
ENTIDAD FINANCIADORA: D.G.Y.C.I.T.
PERIODO: 1988–1990 REFERENCIA: PB87-0272
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Prof. G. Delgado Barrio
CENTRO DE EJECUCIÓN: Instituto de Estructura de la Materia (C.S.I.C.)

4. TÍTULO DEL PROYECTO: “FOTODISOCIACIÓN DE IONES DIATÓMICOS Y COMPLEJOS DE VAN DER WAALS”
ENTIDAD FINANCIADORA: Acción Integrada Hispano–Italiana
PERIODO: 1989 REFERENCIA: A.I. núm. 12
INVESTIGADOR PRINCIPAL ITALIANO: Prof. F.A. Gianturco
INVESTIGADOR PRINCIPAL ESPAÑOL: Prof. G. Delgado Barrio
CENTROS DE EJECUCIÓN: Instituto de Estructura de la Materia (C.S.I.C.) y Università degli Studi di Roma, “La Sapienza”.

5. TÍTULO DEL PROYECTO: “STRUCTURE, CHEMISTRY AND DYNAMICS ON METALLIC AND SEMICONDUCTOR SURFACES AND CLUSTERS”
ENTIDAD FINANCIADORA: Comunidad Económica Europea, Programa Science
PERIODO: 1989–1992 REFERENCIA: SC1*-CT89-0145.C
INVESTIGADOR PRINCIPAL INGLÉS: Prof. J.P. Simons
INVESTIGADOR PRINCIPAL FRANCÉS: Prof. B. Soep
INVESTIGADOR PRINCIPAL ESPAÑOL: Prof. G. Delgado Barrio
CENTROS DE EJECUCIÓN: Department of Chemistry, University of Nottingham, Laboratoire de Photophysique Moleculaire, Université Paris–Sud, e Instituto de Estructura de la Materia (C.S.I.C.) Madrid.

6. TÍTULO DEL PROYECTO: “TRANSFERENCIA DE ENERGÍA DE SISTEMAS DEBILMENTE LI-GADOS”
ENTIDAD FINANCIADORA: Acción Integrada Hispano–Francesa
PERIODO: 1990–1992 REFERENCIA: 267-A y 257-B
INVESTIGADOR PRINCIPAL FRANCÉS: Prof. J.A. Beswick
INVESTIGADOR PRINCIPAL ESPAÑOL: Prof. G. Delgado Barrio
CENTROS DE EJECUCIÓN: Instituto de Física Fundamental (C.S.I.C.) y L.U.R.E., Université Paris–Sud, Orsay.

7. TÍTULO DEL PROYECTO: “FOTODISOCIACIÓN DE COMPLEJOS DE VAN DER WAALS ”
ENTIDAD FINANCIADORA: Acción Integrada Hispano-Italiana
PERIODO: 1991-1992
INVESTIGADOR PRINCIPAL ITALIANO: Prof. F. A. Gianturco
INVESTIGADOR PRINCIPAL ESPAÑOL: Prof. P. Villarreal
CENTROS DE EJECUCIÓN: Instituto de Física Fundamental (C.S.I.C.) y Università degli Studi di Roma, “La Sapienza”.
REFERENCIA: 81/A y 89/A
8. TÍTULO DEL PROYECTO: “ESTUDIO TEÓRICO DE PROCESOS DINAMICOS EN FÍSICA ATÓMICA Y MOLECULAR”
ENTIDAD FINANCIADORA: D.G.Y.C.Y.T.
PERIODO: 1991-1992
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Prof. G. Delgado Barrio
CENTRO DE EJECUCIÓN: Instituto de Estructura de la Materia (C.S.I.C.)
REFERENCIA: Prórroga PB87-0272
9. TÍTULO DEL PROYECTO: “DINÁMICA DE SISTEMAS DEBILMENTE LIGADOS Y MOLECULAS ATMOSFÉRICAS SIMPLES”
ENTIDAD FINANCIADORA: Comunidad Autónoma de Madrid
PERIODO: 1992-1994
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Prof. P. Villarreal Herrán
CENTRO DE EJECUCIÓN: Instituto de Matemáticas y Física Fundamental (C.S.I.C.)
REFERENCIA: 064/92
10. TÍTULO DEL PROYECTO: “TRANSFERENCIA DE ENERGÍA EN FÍSICA ATÓMICA Y MOLECULAR”
ENTIDAD FINANCIADORA: D.G.Y.C.I.T.
PERIODO: 1993-1996
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Prof. Gerardo Delgado Barrio
CENTRO DE EJECUCIÓN: Instituto de Matemáticas y Física Fundamental (C.S.I.C.)
REFERENCIA: PB92-0053
11. TÍTULO DEL PROYECTO: “DYNAMICS OF WEAKLY BOUND COMPLEXES AND SIMPLE ATMOSPHERIC MOLECULES: SCALAR AND VECTOR PROPERTIES”
ENTIDAD FINANCIADORA: Unión Europea
PERIODO: 1994-1995
INVESTIGADOR PRINCIPAL ESPAÑOL: Prof. G. Delgado Barrio
CENTROS DE EJECUCIÓN: Instituto de Matemáticas y Física Fundamental (C.S.I.C.)
REFERENCIA: INTAS-93-1809
12. TÍTULO DEL PROYECTO: “REACTION DYNAMICS AND PHOTOCHEMISTRY WITH APPLICATIONS TO ATMOSPHERIC CHEMISTRY AND COMBUSTION”
ENTIDAD FINANCIADORA: Unión Europea, Programa ALAMED
PERIODO: 1995-1997
INVESTIGADOR PRINCIPAL ESPAÑOL: Prof. G. Delgado Barrio
CENTROS DE EJECUCIÓN: Instituto de Matemáticas y Física Fundamental (C.S.I.C.)
REFERENCIA: CII*-CT94-0128
13. TÍTULO DEL PROYECTO: “ESTUDIO TEÓRICO DE SISTEMAS MOLECULARES DE COMPLEJIDAD CRECIENTE”
ENTIDAD FINANCIADORA: D.G.Y.C.I.T.
PERIODO: 1996-2001
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Prof. Gerardo Delgado Barrio
CENTRO DE EJECUCIÓN: Instituto de Matemáticas y Física Fundamental (C.S.I.C.)
REFERENCIA: PB95-0071
14. TÍTULO DEL PROYECTO: “POTENTIAL ENERGY SURFACES FOR MOLECULAR SPECTROSCOPY AND DYNAMICS”
ENTIDAD FINANCIADORA: Unión Europea
PERIODO: 1997-2000
INVESTIGADOR PRINCIPAL ESPAÑOL: Prof. G. Delgado Barrio
CENTRO DE EJECUCIÓN: Instituto de Matemáticas y Física Fundamental (C.S.I.C.) Madrid.
REFERENCIA: Contract FMRXCT960088

15. TÍTULO DEL PROYECTO: “NUEVOS MECANISMOS DE PRODUCCIÓN DE OZONO A PARTIR DE O_2 EN ESTADOS DE EXCITACIÓN VIBRACIONAL MUY ALTA”
ENTIDAD FINANCIADORA: Convenio C.S.I.C./CONACYT (México)
PERIODO: 1997–1998 REFERENCIA: –
INVESTIGADOR PRINCIPAL ESPAÑOL: J. Campos Martínez
INVESTIGADOR PRINCIPAL MEXICANO: R. Hernández Lamonedá
CENTRO DE EJECUCIÓN: Instituto de Matemáticas y Física Fundamental (C.S.I.C.), y Universidad Autónoma del Estado de Morelos (México)
16. TÍTULO DEL PROYECTO: “Application of Quantum Mechanical Techniques to the Optimization and Design of Optical Waveguides”
ENTIDAD FINANCIADORA: Comisión de Intercambio Cultural, Educativo y Científico entre España y EE.UU.
PERIODO: 1999-2000 REFERENCIA: 99084
INVESTIGADOR PRINCIPAL ESTADOUNIDENSE: Dr. Rob. D. Coalson
INVESTIGADOR PRINCIPAL ESPAÑOL: Dr. J. Campos Martínez
CENTROS DE EJECUCIÓN: Instituto de Matemáticas y Física Fundamental y Universidad de Pittsburgh
17. TÍTULO DEL PROYECTO: Estudio Teórico de la dinámica de complejos moleculares débilmente unidos: desde los complejos de van der Waals a la fase condensada
ENTIDAD FINANCIADORA: Acción Integrada Hispano-Francesa
PERIODO: 2000-2001 REFERENCIA: HF-1999-0132
INVESTIGADOR PRINCIPAL ESPAÑOL: Dr. O. Roncero Villa
CENTROS DE EJECUCIÓN: Instituto de Matemáticas y Física Fundamental y Universidad Paul Savatier.
18. TÍTULO DEL PROYECTO: Theoretical Studies of Electronic and Dynamical Processes in Molecules and Clusters
ENTIDAD FINANCIADORA: Unión Europea
PERIODO: 2000-2004 REFERENCIA: HPRN-CT-1999-00005
INVESTIGADOR PRINCIPAL ESPAÑOL: Prof. Gerardo Delgado Barrio
CENTROS DE EJECUCIÓN: Instituto de Matemáticas y Física Fundamental y diversos centros europeos.
19. TÍTULO DEL PROYECTO: “DINÁMICA DE PROCESOS MOLECULARES DESDE LA FASE GAS HASTA LA INTERFASE GAS/MATERIA CONDENSADA”
ENTIDAD FINANCIADORA: D.G.I del Ministerio de Ciencia y Tecnología
PERIODO: 28-12-2001 a 27-12-2004 REFERENCIA: BFM 2001-2179
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Prof. Gerardo Delgado Barrio
CENTRO DE EJECUCIÓN: Instituto de Matemáticas y Física Fundamental (C.S.I.C.)
20. TÍTULO DEL PROYECTO: “Dinámica cuántica de sistemas moleculares complejos”
ENTIDAD FINANCIADORA: Comisión mixta CSIC/CNRS Presupuesto: aproximadamente 5686 Euros
PERIODO: 1-1-2004 a 31-12-2005 REFERENCIA: 2004FR0003
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Dr. Octavio Roncero Villa
CENTRO DE EJECUCIÓN: Instituto de Matemáticas y Física Fundamental (C.S.I.C.) y Universidad Paul Savatier
21. TÍTULO DEL PROYECTO: “DINÁMICA CUANTICA DE REACCIONES”
ENTIDAD FINANCIADORA: D.G.I del Ministerio de Educación y Ciencia
PRESUPUESTO: 65550 Euros
PERIODO: 12-12-2004 a 12-12-2007 REFERENCIA: CTQ2004-02415
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Dr. Octavio Roncero Villa
CENTRO DE EJECUCIÓN: Instituto de Matemáticas y Física Fundamental (C.S.I.C.)
22. TÍTULO DEL PROYECTO: Caracterización experimental y teórica de intermedios de reacción originados por la solvatación
ENTIDAD FINANCIADORA: Acción Integrada Hispano-Francesa
PERIODO: 2005-2006 REFERENCIA: HF2004-0260
INVESTIGADOR PRINCIPAL ESPAÑOL: Dr. O. Roncero Villa
PRESUPUESTO: 10612 Euros

INVESTIGADOR PRINCIPAL FRANCÉS: Prof. Benoit Soep
CENTROS DE EJECUCIÓN: Instituto de Matemáticas y Física Fundamental y C.E.A. (Saclay), Francia.

23. TÍTULO DEL PROYECTO: Propiedades Mecánicas, eléctricas y catalíticas de nanoobjetos: síntesis, caracterización y modelización
ENTIDAD FINANCIADORA: Comunidad de Madrid: programas de actividades de I+D entre grupos de investigación
PERIODO: 2006-2009 REFERENCIA: S-0505/MAT/0303
COORDINADOR Fernando Flores
INVESTIGADOR PRINCIPAL DEL GRUPO: Octavio Roncero
PRESUPUESTO DEL GRUPO: 43500 Euros
CENTROS DE EJECUCIÓN: Universidad Autónoma d Madrid, Universidad Complutense de Madrid y C.S.I.C.
24. TÍTULO DEL PROYECTO: “Dinámica cuántica de sistemas moleculares complejos”
ENTIDAD FINANCIADORA: Comisión mixta CSIC/CNRS Presupuesto: aproximadamente 5686 Euros
PERIODO: 1-1-2006 a 31-12-2007 REFERENCIA: 2005FR0031
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Dr. Octavio Roncero Villa
CENTRO DE EJECUCIÓN: Instituto de Matemáticas y Física Fundamental (C.S.I.C.) y Universidad Paul Savatier
25. TÍTULO DEL PROYECTO: “DINÁMICA CUANTICA DE REACCIONES, PROCESOS NO ADIABÁTICOS Y DE TRANSFERENCIA DE ENERGIA EN FASE GAS Y EN NANOESTRUCTURAS”
ENTIDAD FINANCIADORA: D.G.I del Ministerio de Educación y Ciencia
PRESUPUESTO: 150000 Euros
PERIODO: 12-12-2007 a 12-12-2010 REFERENCIA: CTQ2007-62898
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Dr. Marta Hernández Hernández
CENTRO DE EJECUCIÓN: Instituto de Matemáticas y Física Fundamental (C.S.I.C.)
26. TÍTULO DEL PROYECTO: NanoObjects: from atoms to viruses
ENTIDAD FINANCIADORA: Comunidad de Madrid: programas de actividades de I+D entre grupos de investigación
PERIODO: 2010-2014 REFERENCIA: S-2009/MAT-1467
COORDINADOR Julio Gómez Herrero
INVESTIGADOR PRINCIPAL DEL GRUPO: Octavio Roncero
PRESUPUESTO DEL GRUPO: 30000 Euros
CENTROS DE EJECUCIÓN: Universidad Autónoma d Madrid, Universidad Complutense de Madrid y C.S.I.C.
27. TÍTULO DEL PROYECTO: Molecular Astrophysics
ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia e Innovación: programa Consolider-Ingenio 2010
PERIODO: 2010-2015 REFERENCIA: CSD2009-00038
COORDINADOR José Cernicharo Quintanilla
INVESTIGADOR PRINCIPAL DEL GRUPO: Octavio Roncero
PRESUPUESTO DEL GRUPO: 101000 Euros
CENTROS DE EJECUCIÓN: CSIC, Universidad Autónoma d Madrid, Universidad Complutense de Madrid, Universidad de Valladolid, Universidad de Murcia, Centro de Astrofísica de Canarias, etc
28. TÍTULO DEL PROYECTO: ESTRUCTURA, ESPECTROSCOPIA Y DINÁMICA DE MOLÉCULAS Y AGREGADOS MOLECULARES EN FASE GAS E INTERFASES GAS/MATERIA CONDENSADA.
ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia e Innovación
PERIODO: 2011 REFERENCIA: FIS2010-18132
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Gerardo Delgado Barrio
PRESUPUESTO DEL GRUPO: 60000 Euros
CENTROS DE EJECUCIÓN: CSIC,
29. TÍTULO DEL PROYECTO: Proyecto con empresa privada
EMPRESA FINANCIADORA: CYRTA emissions
PERIODO: 2011
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Octavio Roncero Villa

PRESUPUESTO DEL GRUPO: 8000 Euros
CENTROS DE EJECUCIÓN: CSIC,

PUBLICACIONES A) Revistas Nacionales
(no incluir proceedings ni abstracts de Congresos)

Indicar: volumen, páginas inicial y final (año) y clave.

CLAVE: L = libro completo, CL = capítulo de libro, A = artículo, R = review, E = editor.

1. AUTORES(p.o. firma): O. Roncero, J.A. Beswick N. Halberstadt & B. Soep

TITULO: Modelo Teórico de Potencial para Agregados de van der Waals en estados electrónicas excitados del $Hg...Ar_n$

REF. REVISTA/LIBRO: Anales de Física A Vol. 86 (1990) 177–192

CLAVE: A

PUBLICACIONES B) Revistas Internacionales
(no incluir proceedings ni abstracts de Congresos)

Indicar: volumen, páginas inicial y final (año) y clave.

CLAVE: L = libro completo, CL = capítulo de libro, A = artículo, R = review, E = editor.

2. AUTORES (p.o. firma): C. Serrano O. Roncero, P. Mareca P. Villarreal, & G. Delgado–Barrio
TITULO: Applications of an adiabatic rotational model to the $Ar \cdots O_2$ van der Waals molecule.
REF. REVISTA/LIBRO: Chem. Phys. 92 (1985) 155-162 CLAVE: A

3. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, P. Villarreal, G. Delgado–Barrio & S. Miret–Artés,
TITULO: Study of bound and quasibound levels of $Ne, He \cdots H_2$ using a rotational distorted–wave approximation .
REF. REVISTA/LIBRO: J. of Mol. Struct. 142 (1986) 509–512 CLAVE: A

4. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, S. Miret–Artés, G. Delgado–Barrio P. Villarreal,
TITULO: Application of a diabatic rotational distorted wave approximation to the study of $X \cdots H_2$ ($X = He, Ne, Ar$) van der Waals molecules.
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys. 85 (1986) 2084–2088 CLAVE: A

5. AUTORES (p.o. firma): P. Villarreal, G. Delgado–Barrio O. Roncero, F.A. Gianturco & A. Palma
TITULO: Rotational predissociation of strongly anisotropic van der Waals complexes: The $HeCO$ example.
REF. REVISTA/LIBRO: Phys. Rev. A 36 (1987) 617–625 CLAVE: A

6. AUTORES (p.o. firma): P. Villarreal, G. Delgado–Barrio O. Roncero, F.A. Gianturco & A. Palma
TITULO: Rotational predissociation of (rare gas atom)–(slow rotating diatomic molecule) complexes.
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys. 87 (1987) 1054 CLAVE: A

7. AUTORES (p.o. firma): F.A. Gianturco G. Delgado–Barrio O. Roncero, P. Villarreal,
TITULO: Rotational predissociation dynamics in weakly bound molecular systems: The $Ar–N_2$ and $Ar–O_2$ examples.
REF. REVISTA/LIBRO: Int. Journal of Quantum Chemistry 21 (1987) 389–405 CLAVE: A

8. AUTORES (p.o. firma): S. Miret–Artés, O. Roncero, P. Villarreal, & G. Delgado–Barrio
TITULO: Rotational predissociation of the $Ne–HF$ complex: A study of its bound and quasi–bound levels.
REF. REVISTA/LIBRO: J. Phys. Chem. 91 (1987) 5623 CLAVE: A

9. AUTORES (p.o. firma): F.A. Gianturco A. Palma G. Delgado–Barrio P. Villarreal, & O. Roncero,
TITULO: Dynamical coupling and energy transfer in weakly bound molecular complexes.
REF. REVISTA/LIBRO: International Review Physical Chemistry 7 (1988) 1–17 CLAVE: A

10. AUTORES (p.o. firma): P. Villarreal, G. Delgado–Barrio J. Campos–Martínez, & O. Roncero,
TITULO: Energy levels and dynamics of vibrational predissociation of $Ne–Cl_2$: Approximate quantum mechanical calculations.
REF. REVISTA/LIBRO: J. of Mol. Struct. THEOCHEM 166 (1988) 325–333 CLAVE: A

11. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, J. Campos–Martínez, A.M. Cortina P. Villarreal, & G. Delgado–Barrio
TITULO: Anharmonicity effects on the vibrational predissociation of the $Ne–I_2(B^3\pi_v^+v)$ complex: A close–coupling infinite order sudden treatment.
REF. REVISTA/LIBRO: Chem. Phys. Lett. 148 (1988) 62–67 CLAVE: A

12. AUTORES (p.o. firma): M. Hernández, O. Roncero, S. Miret–Artés, P. Villarreal, & G. Delgado–Barrio
 TITULO: Study of the diffraction mediated selective adsorption through the close–coupling and diabatic distorted wave formalisms. Application to the ${}^4\text{He} - \text{Cu}(110)$.
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys. 90 (1989) 3823–3830 CLAVE: A

13. AUTORES (p.o. firma): J. Campos–Martínez, O. Roncero, S. Miret–Artés, P. Villarreal, & G. Delgado–Barrio
 TITULO: Study of the electronic–to–vibrational energy transfer in the quenching process of $\text{Na}^*(3^2P)$ with $\text{N}_2(1^1\Sigma_g^+, v = 0)$. A quantal close–coupling calculation .
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys. 91 (1989) 155–161 CLAVE: A

14. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, J.A. Beswick N. Halberstadt P. Villarreal, G. Delgado–Barrio
 TITULO: Theoretical study of vibrational predissociation of van der Waals complexes: The $\text{Ne} \cdots \text{Cl}_2$ and $\text{Ne} \cdots \text{ICl}$ examples.
 REF. REVISTA/LIBRO: Bull. Soc. Roy. Sciences de Liege, 58^e (1989) 227 CLAVE: A

15. AUTORES (p.o. firma): N.Halberstadt O. Roncero, J.A. Beswick
 TITULO: Decay of vibrational excited states of the $\text{Ne} \cdots \text{Cl}_2$ complex
 REF. REVISTA/LIBRO: Chem. Phys. 129 (1989) 83–92 CLAVE: A

16. AUTORES (p.o. firma): F.A.Gianturco, M . Patriarca y O. Roncero,
 TITULO: Resonant States and Photodissociation Cross-Section in Protonated Rare Gases. The NeH^+ and ArH^+ systems.
 REF. REVISTA/LIBRO: Molecular Physics 90 (1989) 3823 CLAVE: A

17. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, J.A. Beswick N. Halberstadt P. Villarreal, & G. Delgado–Barrio
 TITULO: Photofragmentation of the $\text{Ne} \cdots \text{ICl}$ complex: A three–dimensional quantum mechanical study.
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys. 92 (1990) 3348–3358 CLAVE: A

18. AUTORES (p.o. firma): P. Villarreal, S. Miret–Artés, O. Roncero, S. Serna, J. Campos–Martínez, & G. Delgado–Barrio
 TITULO: Double continuum fragmentation in the vibrational predissociation $X \cdots \text{BC}(v) \cdots \cdots Y \rightarrow \text{BC}(v' < v) + X + Y$ of van der Waals complexes: A perturbative treatment.
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys. 93 (1990) 4016–4023 CLAVE: A

19. AUTORES (p.o. firma): F.A. Gianturco G. Delgado–Barrio O. Roncero, & P. Villarreal,
 TITULO: Alternative decoupled representations for the dynamics of van der Waals molecules: Atest for the $\text{Ne} - \text{O}_2$ systems.
 REF. REVISTA/LIBRO: Mol. Phys. 71 (1990) 1405–1428 CLAVE: A

20. AUTORES (p.o. firma): M. Hernández, S. Serna, O. Roncero, P. Villarreal, & G. Delgado–Barrio
 TITULO: Time–dependent Golden–Rule of the ${}^4\text{He} - \text{Cu}(110)$ elastic scattering.
 REF. REVISTA/LIBRO: Surf. Science 251/252 (1991) 373–376 CLAVE: A

21. AUTORES (p.o. firma): Leforestier, Bisseling, Cerjan, Feit, Friesner, Culdberg, Hammerich, Jolicard, Karrelein, Meuyer, Lipkin, Roncero, Kosloff
 TITULO: A comparison of different propagation schemes for the time dependent Schrödinger Equation.
 REF. REVISTA/LIBRO: Journal of Computational Physics 94 (1991) 59–80

22. AUTORES (p.o. firma): P. Villarreal, S. Miret–Artés, O. Roncero, G. Delgado–Barrio J.A. Beswick N. Halberstadt y R.D. Coalson
 TITULO: A wavepacket Golden Rule treatment of vibrational predissociation
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys. 94 (1991) 4230–4233 CLAVE: A

23. AUTORES (p.o. firma): P. Villarreal, S. Serna, O. Roncero, & G. Delgado–Barrio
 TITULO: The diabatic approximation in the classical frame.
 REF. REVISTA/LIBRO: J. of Mol. Struct. THEOCHEM 254 (1992) 117–123 CLAVE: A

24. AUTORES(p.o. firma): N. Halberstadt J.A. Beswick O. Roncero, & K.C. Janda
 TITULO: Intramolecular vibrational relaxation (IVR) in a triatomic van der Waals molecule: *Ar..Cl₂*
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys. 96 (1992) 2404–2407 CLAVE: A
25. AUTORES (p.o. firma): J.A. Beswick M. Glass-Maujean & O. Roncero,
 TITULO: On the orientation of molecular photofragments produced in highly excited rotational states
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys. 96 (1992) 7514–7527 CLAVE: A
26. AUTORES(p.o. firma): N. Halberstadt S. Serna, O. Roncero, & K.C. Janda
 TITULO: Vibrational Predissociation of *Ar..Cl₂* van der Waals complex: the small molecule limit for IVR
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys. 97 (1992) 341 CLAVE: A
27. AUTORES(p.o. firma): G. Delgado–Barrio S. Serna, S. Miret–Artés, O. Roncero, J. Campos–Martínez, & P. Villarreal,
 TITULO: Theoretical approaches to study the vibrational predissociation of van der Waals molecules
 REF. REVISTA/LIBRO: Laser Chemistry 12 (1992) 103–121 CLAVE: A
28. AUTORES(p.o. firma): O. Roncero, P. Villarreal, G. Delgado–Barrio N. Halberstadt & K.C. Janda
 TITULO: Coherence effects between intramolecular vibrational relaxation and dissociation in triatomic van der Waals systems
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys. 99, (1993), 1035. CLAVE: A
29. AUTORES(p.o. firma): L.D.A. Siebbeles , M. Glass-Maujean, O.S. Vasyutinskii, J.A. Beswick and O. Roncero,
 TITULO: Vector properties in photodissociation: Quantum treatment of the correlation between the spatial anisotropy and the angular momentum of the fragments
 REF. REVISTA/LIBRO: J.Chem. Phys., 100, (1994), 3610. CLAVE: A
30. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, ,P. Villarreal, ,G. Delgado–Barrio , N. Halberstadt and J.A. Beswick
 TITULO: Vector correlations in the photopredissociation of van der Waals clusters
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Phys. Chem., 98, (1994), 3307. CLAVE: A
31. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, , J.A. Beswick and N. Halberstadt
 TITULO: Electronic predissociation in Ar-I₂ complex
 REF. REVISTA/LIBRO: Faraday Discuss. 97, (1994), 211. CLAVE: A
32. AUTORES (p.o. firma): P. Villarreal, ,O. Roncero, and G. Delgado–Barrio
 TITULO: Energy levels and structure of tetra-atomic van der Waals clusters
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., 101, (1994), 2217. CLAVE: A
33. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, , N. Halberstadt and J.A. Beswick
 TITULO: A wavepacket study of $Ar \cdot \cdot I_2(B) \rightarrow Ar+I +I$ electronic predissociation
 REF. REVISTA/LIBRO: Chem. Phys. Lett., 226, (1994), 82. CLAVE: A
34. ATORES (p.o. firma): S.K. Gray and O. Roncero,
 TITULO: Vibrational predissociation and intramolecular vibrational energy redistribution: three-dimensional quantum dynamics of ArI₂.
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Phys. Chem., 99, (1995), 2512 CLAVE: A
35. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, , G. Delgado–Barrio , M. Hernández, ,J. Campos–Martínez, & P. Villarreal,
 TITULO: Wave packet study of the Ne₂I₂ fragmentation dynamics: a four degrees of freedom model
 REF. REVISTA/LIBRO: Chem. Phys. Lett., 246, 187, (1995) CLAVE: A
36. AUTORES (p.o. firma): J. Campos–Martínez, ,M. Hernández, ,O. Roncero, ,P. Villarreal, ,& G. Delgado–Barrio
 TITULO: Time–dependent Hartree study of lifetimes for the Ne₂I₂ van der Waals cluster.
 REF. REVISTA/LIBRO: Chem. Phys. Lett., 246, 197, (1995) CLAVE: A

37. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, and S.K. Gray
 TITULO: Quantum dynamics of of Ar · · I₂ vibrational predissociation including low total angular momenta: The role of intramolecular vibrational energy redistribution.
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys, **104**, 4999, (1996). CLAVE: A
38. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, , N. Halberstadt & J.A. Beswick
 TITULO: A 3-dimensional wave packet study of Ar · · I₂(B) → Ar+I+I electronic predissociation.
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **104**, 7554, (1996) CLAVE: A
39. AUTORES (p.o. firma): K.J. Janda, O. Roncero and N. Halberstadt
 TITULO: Vibrational Predissociation of ArCl₂: toward the determination of the potential energy surface of the B state.
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **105**, 5830, (1996) CLAVE: A
40. AUTORES (p.o. firma): A. Aguado, M. Paniagua, M. Lara and O. Roncero.
 TITULO: Potential energy surface and wavepacket calculations on the Li+ HF → LiF + H reaction.
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **106**, 1013, (1997) CLAVE: A
41. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, D. Caloto, J.C. Janda and N. Halberstadt
 TITULO: From the sparse to the statistical limit of intramolecular vibrational redistribution in vibrational predissociation: ArCl₂ as an example.
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **107**, 1406, (1997) CLAVE: A
42. AUTORES (p.o. firma): A. Aguado, M. Paniagua, M. Lara and O. Roncero.
 TITULO: Quantum study of the Li+ HF → LiF + H reaction.
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **107**, 10085,(1997) CLAVE: A
43. AUTORES (p.o. firma): F.X. Gadea, H. Berriche, O. Roncero, P. Villarreal and G. Delgado-Barrio.
 TITULO: Non radiative lifetimes for LiH in the A state using adiabatic and diabatic schemes.
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **107**, 10515, (1997) CLAVE: A
44. AUTORES (p.o. firma): M. Paniagua, A. Aguado, M. Lara and O. Roncero.
 TITULO: Transition state spectroscopy of the Li+ HF system.
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **109**, 2971,(1998) CLAVE: A
45. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, P. Villarreal, G. Delgado-Barrio, J. González-Platas and J. Bretón.
 TITULO: Potential energy surface and spectroscopy of clusters of rare-gas atoms with cyclopropane.
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **109**, 9288,(1998) CLAVE: A
46. AUTORES (p.o. firma): K.C. Janda, D. Djahandideh, O. Roncero and N. Halberstadt.
 TITULO: The B ← Spectrum of ArCl₂: linear and perpendicular isomers.
 REF. REVISTA/LIBRO: Chem. Phys., **239**, 177,(1998). CLAVE: A
47. AUTORES (p.o. firma): M. Lara, A. Aguado, O. Roncero and M. Paniagua.
 TITULO: Quantum stereodynamics of the Li+HF(v,j) reactive collision for different initial states of the reagent.
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **109**, 9391,(1998) CLAVE: A
48. AUTORES (p.o. firma): M. Paniagua, A. Aguado, M. Lara and O. Roncero
 TITULO: Transition state spectroscopy via infrared excitation of Li-HF and Li-DF van der Waals precursors.
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **111**, 6712, (1999)
49. AUTORES (p.o. firma): A. Aguado, O. Roncero, C. Tablero, C. Sanz and M. Paniagua.
 TITULO: Global potential energy surfaces for the H₃⁺ system. Analytical representation of the adiabatic ground state 1¹A' potential.
 REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **112**, 1240,(2000) CLAVE: A

50. AUTORES (p.o. firma): M. Lara, A. Aguado, M. Paniagua and O. Roncero.
TITULO: State-to-state probabilities using bond coordinates: Application to the Li+HF(v,j) reactive collision.
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **113**, 1781,(2000) CLAVE: A
51. AUTORES (p.o. firma): E. Carmono-Novillo, J. Campos-Martínez, M.I. Hernández, O. Roncero, P. Villarreal and G. Delgado-Barrio.
TITULO: Application of a time-dependent Hartree approach on several surfaces to the vibrational predissociation of Ne₂I₂.
REF. REVISTA/LIBRO: Molecular Physics., **98**,1783, (2000) CLAVE: A
52. AUTORES(p.o. firma): A.A. Buchachenko, O. Roncero and N.F. Stepanov.
TITULO: Improved diatomics-in-molecule perturbation theory for the ground-state potential energy surface of ArI₂.
REF. REVISTA/LIBRO: Russian J. Phys. Chem., **74**, pp.S193 (2000) CLAVE: A
53. AUTORES (p.o. firma): C. Sanz , O. Roncero, C. Tablero, A. Aguado and M. Paniagua.
TITULO: The lowest triplet state ³A' of H₃⁺: Global potential energy surface and vibrational calculations
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **114** , 2182, (2001) CLAVE: A
54. AUTORES (p.o. firma): A. Aguado, M. Lara, M. Paniagua and O. Roncero.
TITULO: Exploring the transition state for the Li+HF→ LiF+H reaction through the A←X absorption spectrum and X←A stimulated emission pumping.
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **114** ,3440, (2001) CLAVE: A
55. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, J. Campos-Martínez, M.I. Hernández, G. Delgado-Barrio, P. Villarreal and J. Rubayo-Soneira.
TITULO: Photodissociation of NeBr₂(B) below and above the dissociation limit of Br₂(B).
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **115**, 2566 (2001). CLAVE: A
56. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, B. Lepetit, J.A. Beswick, N. Halberstadt and A. A. Buchachenko.
TITULO: ArI₂(X)→ Ar + I₂(B) photodissociation: comparison between linear and T-shaped isomers dynamics.
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **115**, 6961, (2001). CLAVE: A
57. AUTORES (p.o. firma): C. Sanz, O. Roncero, M. Paniagua and A. Aguado
TITULO: Transition state spectroscopy of the excited electronic states of Li-HF
REF. REVISTA/LIBRO: Chemical Physics Letters, **351**, 295, (2002). CLAVE: A
58. AUTORES (p.o. firma): B. Lepetit, O. Roncero A. A. Buchachenko and N. Halberstadt,
TITULO: Electronic and vibrational predissociation in the ArI₂ photodissociation
REF. REVISTA/LIBRO: Journal of Chemical Physics, **116**, 8367,(2002). CLAVE: A
59. AUTORES (p.o. firma): R. Prosimiti, P. Villarreal, G. Delgado-Barrio and O. Roncero
TITULO: A combined Quantum/Classical study of the photodissociation dynamics of NeBr₂ near Br₂ dissociation limit
REF. REVISTA/LIBRO: Chemical Physics Letters, **359**, 229, (2002). CLAVE: A

60. AUTORES (p.o. firma): M.I. Hernández, A. García-Vela, J. Campos-Martínez, O. Roncero, P. Villarreal and G. Delgado-Barrio
TITULO: Time dependent methods to study the dissociation dynamics of tri and tetra-atomic clusters
REF. REVISTA/LIBRO: Computer Physics Communications, **145**,97,(2002). CLAVE: A
61. AUTORES (p.o. firma): E. Cuervo-Reyes, J. Rubayo-Soneira, A. Aguado, M. Paniagua, C. Tablero, C. Sanz and O. Roncero
TITULO: D_3^+ rovibrational levels and spectra for the adiabatic $1^1A'$ and $1^3A'$ electronic states
REF. REVISTA/LIBRO: Phys. Chem. Chem. Phys., **4**, 6012, (2002). CLAVE: A
62. AUTORES (p.o. firma): A.A. Buchachenko, N. Halberstadt, B. Lepetit and O. Roncero
TITULO: ArI_2 : A model system for complex dynamics
REF. REVISTA/LIBRO: Int. Rev. Phys. Chem., **22**,(2003),153. CLAVE: A
63. AUTORES (p.o. firma): A. Aguado, M. Paniagua, C. Sanz and O. Roncero
TITULO: Electronic transition state spectroscopy of LiHF
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **119**,10088,(2003) CLAVE: A
64. AUTORES (p.o. firma): S. Gómez-Carrasco, L. González-Sánchez, A. Aguado, M. Paniagua, O. Roncero, M. Luz Hernández and J.M. Alvariño
TITULO: Dynamics and kinetics of the F+OH reaction on the ground triplet potential energy surface
REF. REVISTA/LIBRO: Chem. Phys. Lett., **383**,(2004), 25. CLAVE: A
65. AUTORES (p.o. firma): L. González-Sánchez, S. Gómez-Carrasco, A. Aguado, M. Paniagua, M. Luz Hernández, J.M. Alvariño and O. Roncero,
TITULO: Photodetachment spectrum of OHF^- : Three-dimensional study of the heavy-light-heavy resonances.
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **121**,(2004), 309. CLAVE: A
66. AUTORES (p.o. firma): S. Gómez-Carrasco, L. González-Sánchez, A. Aguado, O. Roncero, M. Luz Hernández, J.M. Alvariño and M. Paniagua,
TITULO: Direct versus resonances mediated F+OH collisions on a new $^3A''$ potential energy surface
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys. **121**,(2004), 4605. CLAVE: A
67. AUTORES (p.o. firma): L. González-Sánchez, S. Gómez-Carrasco, A. Aguado, M. Paniagua, M. Luz Hernández, J.M. Alvariño and O. Roncero
TITULO: Quantum Stereodynamics of the F+OH(v,j) reactive collision on the $1^3A''$ state
REF. REVISTA/LIBRO: Molecular Phys. **102**,(2004),2381. CLAVE: A
68. AUTORES (p.o. firma): L. González-Sánchez, S. Gómez-Carrasco, A. Aguado, M. Paniagua, M. Luz Hernández, J.M. Alvariño and O. Roncero,
TITULO: Transition state dynamics of OHF on several electronic states: Photodetachment spectrum of OHF^- and conical intersections.
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **121**,(2004), 9865 CLAVE: A
69. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, A.A. Buchachenko and B. Lepetit
TITULO: Competition between adiabatic and non-adiabatic fragmentation pathways in the $ArI_2(B)$ van der Waals complex.
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys. **122**, (2005), 034303. CLAVE: A

70. AUTORES (p.o. firma): M.P. de Lara-Castells, A.O. Mitrushenkov, O. Roncero and J.L. Krause
TITULO: Adsorption and non-adiabatic processes in the photodesorption of molecular oxygen from the reduced TiO₂(110) surface.
REF. REVISTA/LIBRO: Israel J. Phys., **45**, (2005), 59. CLAVE: A
71. AUTORES (p.o. firma): G. Verbockhaven, C. Sanz, G. C. Gronenboom, O. Roncero and A. van der Avoird
TITULO: Ab initio Potential Energy Surface for the Ca+HCl → CaCl + H.
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **122**, (2005), 204307. CLAVE: A
72. AUTORES (p.o. firma): C. Sanz, A. van der Avoird and O. Roncero
TITULO: Collisional and photoinitiated reaction dynamics in the ground electronic state of CaHCl.
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **123**, (2005), 064301. CLAVE: A
73. AUTORES (p.o. firma): S. Gomez-Carrasco, O. Roncero, L. Gonzalez-Sanchez, M. Luz Hernandez, J. M. Alvariño, M. Paniagua and A. Aguado
TITULO: F+OH reactive collisions on new excited ³A'' and ³A' potential energy surfaces.
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **123**, (2005), 114310. CLAVE: A
74. AUTORES (p.o. firma): T. Gonzalez-Lezana, A. Aguado, M. Paniagua and O. Roncero
TITULO: Quantum approaches for the insertion dynamics of the H⁺+D₂ and D⁺+H₂ reactive collisions
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **123**, (2005), 194309. CLAVE: A
75. AUTORES (p.o. firma): Susana Gómez-Carrasco and Octavio Roncero
TITULO: Coordinate transformation methods to calculate state-to-state reaction probabilities with wave packet treatments
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **125**, (2006), 054102 CLAVE: A
76. AUTORES (p.o. firma): Tomás González-Lezana, Octavio Roncero, Pascal Honvault, Jean-Michel Launay, Niyazi Bulut, F. Javier Aoiz and Luis Bañares
TITULO: A detailed quantum mechanical and quasiclassical trajectory study on the dynamics of the H⁺+H₂ → H₂+H⁺ exchange reaction
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **125**, (2006), 094314. CLAVE: A
77. AUTORES (p.o. firma): Susana Gómez-Carrasco, A. Aguado, M. Paniagua and Octavio Roncero
TITULO: Coupled Diabatic Potential Energy Surfaces for studying the non-adiabatic dynamics at conical intersections in angular resolved photodetachment simulations of OHF⁻ → OHF+e⁻.
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **125**, (2006), 164321 CLAVE: A
78. AUTORES (p.o. firma): Susana Gómez-Carrasco, A. Aguado, M. Paniagua and Octavio Roncero
TITULO: Transition state spectroscopy of open shell systems: photodetachment spectra for the adiabatic singlet states of OHF.
REF. REVISTA/LIBRO: J. Photochemistry and Photobiology A, **190**, (2007), 145 CLAVE: A
79. AUTORES (p.o. firma): Octavio Roncero, R. Pérez-Tudela, M.P. de Lara-Castells, R. Prosmiti, G. Delgado-Barrio and P. Villarreal
TITULO: Exact and quantum chemistry-like calculations in helium doped cluster: The He₂Br₂(X).
REF. REVISTA/LIBRO: Int. J. Quantum Chem., **107**, (2007), 2756. CLAVE: A

80. AUTORES (p.o. firma): Jose Cabrera, C. R. Bieler, N. McKinney, W. E. van der Veer, J. Pio, K.C. Janda and Octavio Roncero
TITULO: Time and frequency resolved dynamics of ArBr₂.
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **127**, (2007), 164309. CLAVE: A
81. AUTORES (p.o. firma): E. Carmona-Novillo, T. Gonzalez-Lezana, Octavio Roncero, P. Honvault, J.M. Lannay, N. Bulut, F.J. Aoiz, L. Bañares, A. Trottier and E. Wrede
TITULO: On the dynamics of the H⁺+D₂(v=0,j=0) → HD+D⁺ reaction: a comparison between theory and experiment
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **128**, (2008), 014304. CLAVE: A
82. AUTORES (p.o. firma): E. Gloaguen, C. Sanz-Sanz, M. Collier, M.-A. Gaveau, B. Soep, Octavio Roncero and J.-M. Mestdagh
TITULO: Transition state spectroscopy of the photoinduced Ca+CH₃F reaction III. The tunneling reaction mechanism after local excitation to Ca(4s3d ¹D).
REF. REVISTA/LIBRO: J. Phys. Chem. A, **112**, (2008), 1408-1420 CLAVE: A
83. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, M.P. de Lara-Castells, G. Delgado-Barrio, P. Villarreal, T. Stoecklin, A. Voronin and J.C. Rayez
TITULO: Exact, Born-Oppenheimer and quantum chemistry-like calculations in Helium clusters doped with light molecules: the He₂N₂(X) system.
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **128**, (2008), 164313 CLAVE: A
84. AUTORES (p.o. firma): M. Márquez-Mijares, T. González-Lezana, O. Roncero, S. Miret-Artés, G. Delgado-Barrio and P. Villarreal
TITULO: Symmetry assignment in the distributed Gaussian functions method to study homonuclear rotating trimers.
REF. REVISTA/LIBRO: Chem. Phys. Lett., **460**, (2008), 417. doi:10.1016/j.cplett.2008.06.052 CLAVE: A
85. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, M.P. de Lara-Castells, P. Villarreal, F. Flores, J. Ortega, M. Paniagua and A. Aguado
TITULO: An inversion technique for the calculation of embedding potentials
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **129**,(2008), 184104. CLAVE: A
86. AUTORES (p.o. firma): R. Pérez de Tudela, M. Márquez-Mijares, T. González-Lezana, O. Roncero, S. Miret-Artés, G. Delgado-Barrio and P. Villarreal
TITULO: A study of the Ar₃ System at low temperatures
REF. REVISTA/LIBRO: Few-Body Syst., **45**,(2009),237 CLAVE: A
87. AUTORES (p.o. firma): M. Márquez-Mijares, R. Pérez de Tudela, T. González-Lezana, O. Roncero, S. Miret-Artés, G. Delgado-Barrio, P. Villarreal, I. Baccarelli, F.A. Gianturco and J. Rubayo-Soneira
TITULO: A theoretical investigation on the spectrum of the Ar trimer for high rotational excitations
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys. , **130**,(2009), 154301 CLAVE: A
88. AUTORES (p.o. firma): A. Zanchet, A. Dorta-Urra, O. Roncero, F. Flores C. Tablero, M. Paniagua and A. Aguado
TITULO: Mechanism of molecular hydrogen dissociation on gold chains and clusters as model prototypes of nanostructures
REF. REVISTA/LIBRO: Phys. Chem. Chem. Phys., **11**, (2009), 10123. CLAVE: A

89. AUTORES (p.o. firma): A. Zanchet, O. Roncero, T. González-Lezana, A. Rodríguez-López, A. Aguado, C. Sanz-Sanz and S. Gómez-Carrasco
TITULO: Differential cross sections and product rotational polarization in A+BC reactions using wave packet methods
REF. REVISTA/LIBRO: J. Phys. Chem. A , **113**,(2009), 14488 CLAVE: A
90. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, A. Zanchet, P. Villarreal and A. Aguado
TITULO: A density-division embedding potential inversion technique
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **131**, (2009), 234110 CLAVE: A
91. AUTORES (p.o. firma): C. R. Bieler, K.C. Janda, R. Hernández-Lamoneda and O. Roncero
TITULO: NeCl₂ and ArCl₂: the transition from direct vibrational predissociation to intramolecular vibrational relaxation and electronic non-adiabatic effects
REF. REVISTA/LIBRO: J. Phys. Chem. A , **114** ,(2010),3050 CLAVE: A
92. AUTORES (p.o. firma): A. Zanchet, O. Roncero, S. Omar, M. Paniagua and A. Aguado
TITULO: Potential energy surface and reactive collisions for the Au+H₂ system
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys., **132**, (2010), 034301 CLAVE: A
93. AUTORES (p.o. firma): C. Sanz-Sanz, O. Roncero, R. Hernandez-Lamoneda, J. M. Pio, M. A. Taylor and K.C. Janda
TITULO: A model study on the electronic predissociation of the NeBr₂ van der Waals complex
REF. REVISTA/LIBRO: Communication in J. Chem. Phys , **132** ,(2010), 221103 CLAVE: A
94. AUTORES (p.o. firma): R. Pérez de Tudela, M. Márquez-Mijares, T. González-Lezana, O. Roncero, S. Miret-Artés, G. Delgado-Barrio and P. Villarreal
TITULO: A path-integral Monte Carlo study of a small cluster: the Ar trimer
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys.,**132**, (2010), 244303. CLAVE: A
95. AUTORES (p.o. firma): A. Zanchet, T. González-Lezana, A. Aguado, S. Gómez-Carrasco and O. Roncero
TITULO: Nonadiabatic State-to-State Reactive Collisions among Open Shell Reactants with Conical Intersections: The OH(²II) + F(²P) Example
REF. REVISTA/LIBRO: J. Phys. Chem.A **114** (2010), 9733 CLAVE: A
96. AUTORES (p.o. firma): A. Aguado, P. Barragán, R. Prosmiti, G. Delgado-Barrio, P. Villarreal and O. Roncero
TITULO: A new accurate and full dimensional potential energy surface of H₅⁺ based on a triatomics-in-molecules analytic functional form.
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys. **133** (2010),024306 CLAVE: A
97. AUTORES (p.o. firma): P. Barragán, R. Prosmiti, O. Roncero, A. Aguado, P. Villarreal and G. Delgado-Barrio
TITULO: Towards a realistic potential energy surface of H₅⁺ cluster.
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys. **133**, (2010), 054303. CLAVE: A
98. AUTORES (p.o. firma): A. Zanchet, A. Dorta, A. Aguado and O. Roncero
TITULO: Understanding structure, size and charge effects on H₂ dissociation mechanism on planar gold clusters.
REF. REVISTA/LIBRO: J. Phys. Chem. C **115**, (2011), 47. CLAVE: A

99. AUTORES (p.o. firma): L. González-Sánchez, O. Vasyutinskii, A. Zanchet, C. Sanz-Sanz and O. Roncero
TITULO: Quantum stereodynamics of Li+HF reactive collisions: the role of reactants polarization on the differential cross section.
REF. REVISTA/LIBRO: Phys. Chem. Chem. Phys. **13**, (2011), 13656. CLAVE: A
100. AUTORES (p.o. firma): A. Dorta-Urra, A. Zanchet, O. Roncero , A. Aguado and P. B. Armentrout
TITULO: Theoretical exploration of Au⁺+H₂, D₂ and HD reactive collisions
REF. REVISTA/LIBRO: Communication J. Chem. Phys. **135**, (2011), 091102 CLAVE: A
101. AUTORES (p.o. firma): N. Bulut, O. Roncero, M. Jorfi and P. Honvault
TITULO: Accurate time dependent wave packet calculations for the N+OH reaction
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys. **135**, (2011), 104307 CLAVE: A
102. AUTORES (p.o. firma): A. Aguado, C. Sanz-Sanz, P. Villarreal and O. Roncero
TITULO: Simulation of the infrared predissociation spectra of H₅⁺
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Phys. (2011), en prensa CLAVE: A
103. AUTORES (p.o. firma): R. Hernández-Lamoneda, C. Sanz-Sanz, O. Roncero, J. M. Pio, M. A. Taylor and K. C. Janda
TITULO: A theoretical study on electronic predissociation in the NeBr₂ van der Waals molecule
REF. REVISTA/LIBRO: Chem. Phys. (2011), en prensa CLAVE: A
104. AUTORES (p.o. firma): C. Sanz-Sanz, A. S. Sanz, T. González-Lezana, O. Roncero and S. Miret-Artés
TITULO: Quantum Zeno-based control mechanism for molecular fragmentation
REF. REVISTA/LIBRO: Phys. Rev. Lett. (2011) enviado, arXiv:1106.4143 CLAVE: A

PUBLICACIONES C) Volúmenes Colectivos

Indicar: volumen, páginas inicial y final (año) y clave.

CLAVE: L = libro completo, CL = capítulo de libro, A = artículo, R = review, E = editor.

105. AUTORES (p.o. firma): P. Villarreal, G. Delgado-Barrio O. Roncero, E. de Pablo & S. Miret-Artés,
TITULO: Dissociations Dynamics of the $Ar..H_2$ van der Waals complex.
LIBRO: *Structure and Dynamics of Weakly Bound Molecular Complexes*
EDITOR: D. Reidel Publishing Co., Dordrecht 1987
REF. NATO ASI Series C: 212 (1987) 583–592 CLAVE: A
106. AUTORES (p.o. firma): J. Campos-Martínez, O. Roncero, S. Miret-Artés, P. Villarreal, & G. Delgado-Barrio
TITULO: Some theoretical aspects of infrared molecular lasers pumped by electronic-to-vibrational energy transfer
LIBRO: *Atomic and molecular processes with short intense laser pulses.*
EDITOR: A.D. Bandrauk; Plenum Press, New York 1987
REF. NATO ASI Series B: 171 (1987) 461 CLAVE: A
107. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, J.A. Beswick N. Halberstadt & B. Soep
sc título: A theoretical study of $Hg..Ar_n$ ($n = 1, 2, 3$) clusters excited in the $Hg(^3P \leftarrow ^1S)$ spectral region.
LIBRO: *Dynamics of Polyatomic van der Waals Complexes*
EDITOR: N. Halberstadt & K. C. Janda
REF. NATO ASI Series B 227 (1990) 471–491 CLAVE: A
108. AUTORES (p.o. firma): J.A. Beswick M. Glass-Maujean O. Roncero,
TITULO: Coherent excitation effects in Photodissociation strong orientation of molecular products
LIBRO: *Mode Selective Chemistry*
EDITOR: J. Jortner, R.D. Levine & B. Pullman
REF. Kluwer Academic, Dordrecht, 1991, Vol. 24 307–322 CLAVE: A
109. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, , N. Halberstadt and J.A. Beswick
TITULO: Caging and nonadiabatic electronic transitions in I_2 -M complexes
LIBRO: *Reaction dynamics in clusters and condensed phases*
EDITOR: B. Pullman, J. Jortner & R.D. Levine
REF. Kluwer Academic, Dordrecht, 1994, pg. 73 CLAVE: A
110. AUTORES (p.o. firma): G. Delgado-Barrio, A. Garcia-Vela, J. Rubayo-Soneira, J. Campos-Martinez, S. Miret-Artes, O. Roncero and P. Villarreal
TITULO: Theoretical spectroscopy and dynamics of tetra-atomic van der Waals clusters
LIBRO: *Reaction dynamics in clusters and condensed phases*
EDITOR: B. Pullman, J. Jortner & R.D. Levine
REF. Kluwer Academic, Dordrecht, 1994, pg. 57 CLAVE: A
111. AUTORES (p.o. firma): G. Delgado-Barrio, M.I. Hernández, O. Roncero, J. Campos-Martínez, A. García-Vela, J. Rubayo-Soneira y P. Villarreal.
TITULO: Dinámica de fragmentación de agregados tetra-atómicos $X_2...BC$.
LIBRO: *Temas Actuales de la Química Cuántica.*
EDITOR: J. Fernández-Rico and J.M. García de la Vega.
REF. UAM Ediciones, Madrid, 1998, pg. 263 CLAVE: A
112. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, N. Halberstadt and J.A. Beswick
TITULO: Photofragmentation of weakly bound complexes.
LIBRO: *Advances in multi-photon processes and spectroscopy, Vol.11.*
EDITOR: S.H. Lin, A.A. Villaeys and F.Y. Fujimura.

REF. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 1998, pag. 99.

CLAVE: CL

113. AUTORES (p.o. firma): O. Roncero, S. Gómez-Carrasco, L. González-Sánchez, M. Paniagua and A. Aguado

TITULO: Reaction dynamics on conical intersections for the OHF system

LIBRO: Quantum dynamics at conical intersections

EDITOR: S. Althorpe and G. Worth

REF. Collaborative Computational Project on Molecular Quantum Dynamics, Daresbury (2004) CLAVE: A

114. AUTORES (p.o. firma): A. Aguado, M. Paniagua, C. Sanz and O. Roncero

TITULO: Understanding chemical reactions involving non-adiabatic transitions: predissociation of the electronically excited Li-HF complex

LIBRO: "Recent Advances in the Theory of Chemical and Physical Systems" in the series "Progress in theoretical chemistry and Physics" vol. 15, pg. 385

EDITOR: J. P. Julien, J. Maruani, D. Mayou, S. Wilson and G. Delgado-Barrio.

REF. (2006)

CLAVE: A

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

TITULO DEL CONTRATO:

EMPRESA/ADMINISTRACION FINANCIADORA:

DURACION DESDE: HASTA

INVESTIGADOR RESPONSABLE:

PATENTES Y MODELOS DE UTILIDAD
(que estén o hayan estado en explotación)

AUTORES (P.O. FIRMA):

TITULO:

Nº DE REGISTRO:

AÑO:

ENTIDAD TITULAR:

PAISES:

ESTANCIAS EN CENTROS EXTRANJEROS
(superiores a cuatro semanas)

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

CENTRO: Universidad de Roma			
LOCALIDAD: Roma	PAIS:Italia	AÑO:1987	DURACION:4 meses
TEMA: Dinamica de predisociacin rotacional de complejos de van der Waals			CLAVE:P
CENTRO: L.U.R.E. – Univ. Paris-Sud			
LOCALIDAD: Paris	PAIS:Francia	AÑO:1988	DURACION:2 años, 6 meses
TEMA: Estudios de la dinmica de fotofragmentacin			CLAVE:P
CENTRO: L.U.R.E.– Univ. Paris-Sud			
LOCALIDAD: Paris	PAIS:Francia	AÑO:1990	DURACION:6 semanas
TEMA: Estudios de dinmica molecular			CLAVE: P
CENTRO: U. Pittsburgh			
LOCALIDAD: Pittsburgh	PAIS:EE.UU.	AÑO:1991	DURACION:4 meses
TEMA: Mtodos temporales en dinamica molecular			CLAVE:P
CENTRO: L.U.R.E.– Univ. Paris-Sud			
LOCALIDAD: Paris	PAIS:Francia	AÑO:1992	DURACION:2 meses
TEMA: Estudios de dinmica molecular			CLAVE: P
CENTRO: L.U.R.E.– Univ. Paris-Sud			
LOCALIDAD: Paris	PAIS:Francia	AÑO:1993	DURACION:1 mes
TEMA: Estudios de dinámica molecular			CLAVE: P
CENTRO: Argonne National Laboratory			
LOCALIDAD: Chicago	PAIS:EE.UU.	AÑO:1994	DURACION:1 mes
TEMA: Estudios de dinámica molecular			CLAVE: P
CENTRO: IRSAMC- Université Paul Sabatier			
LOCALIDAD: Toulouse	PAIS:Francia	AÑO:1994	DURACION:1 mes
TEMA: Estudios de dinámica molecular			CLAVE: P
CENTRO: IRSAMC- Université Paul Sabatier			
LOCALIDAD: Toulouse	PAIS:Francia	AÑO:1995	DURACION:1 mes y 2 semanas
TEMA: Estudios de dinámica molecular			CLAVE: P
CENTRO: University of California, Irvine			
LOCALIDAD: Irvine, California	PAIS:USA	AÑO:2005	DURACION:3 meses
TEMA: Dinámica cuántica de fragmentación de agregados de van der Waals			CLAVE: P

CONTRIBUCIONES INVITADAS EN CONGRESOS

Reseñar solamente contribuciones relevantes (conferencias invitadas, presidencias de sesión internacionales)

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada

TITULO: Vibrational Predissociation Dynamics of $Ne..ICl$ and $Ne..Cl_2$
van der Waals Complexes

CONGRESO: V European workshop on Molecular Spectroscopy and photons

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Liege (Bélgica)

AÑO:1989

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada

TITULO: Modelo Teórico de Potencial para Agregados de van der Waals
en estados Electrónicos Excitados del $Hg..Ar_n$

CONGRESO: XXII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Palma (España)

AÑO:1989

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación invitada TITULO: A Time Dependent Golden Rule Approach for the Study
of Vibrational Predissociation

CONGRESO: VIII European conference on dynamics of molecular collisions

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Bernkastel-Kues (R.F.A.)

AÑO:1990

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada

CONGRESO: Escuela de Verano de Química Teórica de Pinar del Rio

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Pinar del Río (Cuba)

AÑO:1992

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada

TITULO: Coherence Effects between IVR and Dissociation in small van der Waals clusters

CONGRESO: CECAM Workshop on "Dynamics of van der Waals Complexes"

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Paris (Francia)

AÑO:1992

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada

TITULO: Vector Properties in Photodissociation: Application to ICN

CONGRESO: NATO Advanced Workshop on
Orientation and Polarization Effects in Chemical Reaction Dynamics

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Assisi (Perugia, Italia)

AÑO:1992

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada

TITULO: Intramolecular vibrational relaxation and fragmentation dynamics
of tri- and tetra-atomic van der Waals clusters

CONGRESO: 3rd South European Conference on Atomic and Molecular Physics

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Island of Kos (Greece)

AÑO:1996

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada

TITULO: "Vibrational Predissociation of $ArCl_2$ as an example of IVR:
from the small to the large molecule limit".

CONGRESO: Workshop titulado "Journée de Calcul Intensif et Dynamique Réactionnelle Quantique (CUTIS)"

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Université Paul Sabatier (Toulouse, Francia)

AÑO:1996

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada

TITULO: Photoinitiated Reaction and Reactive Collisions in the LiHF system

CONGRESO: International Workshop on "reaction Dynamics and Photochemistry".

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Avila (Spain)

AÑO:1998

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada

TITULO: Photoinitiated Reaction and Reactive Collisions in the LiHF system

CONGRESO: 5th Workshop on "Quantum Reactive Scattering".

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Perugia (Italy) AÑO:1999

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
TITULO: Photoinitiated Reaction and Reactive Collisions in the LiHF system
CONGRESO: DYNAM2000, Satellite meeting of the Xth Internation Conference on Quantum Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Arcachon (France) AÑO:2000

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
TITULO: Photoinitiated Reaction and Reactive Collisions in the LiHF system
CONGRESO: Gordon Conference on "Atomic and Molecular Interactions"
LUGAR DE CELEBRACIÓN: New London (USA) AÑO:2000

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
TITULO: Transition State Dynamics in Li-HF:
The effect on the collision and photoinitiated processes
CONGRESO: Second International meeting on Photodynamics
LUGAR DE CELEBRACIÓN:La Habana (Cuba) AÑO:2002

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
TITULO: Transition State Dynamics and spectroscopy in Metal-hydrogen halides systems
CONGRESO: European Conference on Dynamics of Molecular Collisions, MOLEC XIV
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Istanbul (Turquía) AÑO:2002

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
TITULO: Transition State Spectroscopy as a tool for understanding Non-Adiabatic effects on the Reaction Dynamics of Li-HF
CONGRESO: XVIII nternational Conference on Molecula Energy Transfer, COMET XVIII
LUGAR DE CELEBRACIÓN: El Escorial (España) AÑO:2003

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
TITULO: Reaction dynamics at conical intersections for the OHF system
CONGRESO: CCP6 Workshop on "Quantum dynamics at conical intersections
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Nunspeet (The Netherlands) AÑO:September 2-5, 2004

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
TITULO: Reaction dynamics at conical intersections for the OHF system
CONGRESO: 9th European workshop on "Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP-IX)"
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Les Houches-Grenoble (France) AÑO:September 25-30, 2004

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
TITULO: Collisional and photoinitiated reaction dynamics at conical intersections: application to the OH+F system
CONGRESO: 8th Workshop on Quantum Reactive Scattering
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santa Cruz (California, USA) AÑO:July 15-19, 2005

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
TITULO: Coupled diabatic energy surfaces to study reaction dynamics at conical intersections: application to the photodetachment of OHF-
CONGRESO:Telluride Workshop on "Intermolecular Interactions: New Challenges for ab Initio Theory"
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Telluride (Colorado, USA) AÑO June 26 - June 30, 2006

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
TITULO: Vector properties in transition state spectroscopy to unravel the non-adiabatic reaction dynamics at conical intersections in OHF

CONGRESO: 11th European Workshop on “Quantum Systems in Chemistry and Physics” (QSCP-X11)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: St. Petersburg (Russia) AÑO August, 20-25, 2006

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
TITULO: Angle-resolved photodetachment spectra and non-adiabatic dynamics on open-shell systems:
application to $\text{OHF}^- h\nu \rightarrow \text{OHF} + e$ reactive process
CONGRESO: 9th International Workshop on “Quantum Reactive Scattering” (Qrs-ix)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Cambridge (United Kindom) AÑO July, 18-22, 2007

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
TITULO: Angle-resolved photodetachment spectra and non-adiabatic dynamics on open-shell systems:
application to $\text{OHF}^- h\nu \rightarrow \text{OHF} + e$ reactive process
CONGRESO: 5th International Workshop on “Photodynamics”
LUGAR DE CELEBRACIÓN: la Habana (Cuba) AÑO February, 1-8, 2008

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
TITULO: H_2 reactivity on Gold Nano-structures: A cluster and embedding potential approach
CONGRESO: 9th International Workshop on “Quantum Reactive Scattering” (QRS-X)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Dalian (China) AÑO June, 6-10, 2009

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
TITULO: H_2 reactivity on Gold Nano-structures: A cluster and embedding potential approach
CONGRESO: 4th International Symposium on Atomic Cluster Collisions (ISACC 2009)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Ann Arbor, Michigan (USA) AÑO July, 14-18, 2009

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
TITULO: Quantum reactive scattering using time-dependent wave packet methods
CONGRESO: 4th Meeting on High Performance Computing in Molecular Simulations
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid (Spain) AÑO September 30th, October 1st, 2010

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
TITULO: A density division embedding potential inversion technique
CONGRESO: PACIFICHEM 2010, “2010 international Chemical Congress of Pacific Basin Societies
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Honolulu, Hawaii (USA) AÑO December 15-20th, 2010

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
TITULO: Quantum Stereodynamics of $\text{Li} + \text{HF}$ reactive collisions:
the role of reagents polarization on differential cross section
CONGRESO: Spin Networks in atomic and molecular Physics, Quantum Chemistry and Quantum Computing
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Zurich, Suiza AÑO June, 26-29th, 2011

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
TITULO: Simulation of the infrared predissociation spectra of H_5^+
CONGRESO: Quantum Reactive Scattering XI
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santa Fe, New Mexico, USA AÑO July, 17-21th, 2011

ORGANIZACION DE CONGRESOS

- TIPO DE PARTICIPACIÓN: Miembro del comité local
CONGRESO: workshop on "Dynamics of polyatomics van der Waals clusters
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Bonas (Francia) AÑO:1989
- TIPO DE PARTICIPACIÓN: Miembro del comité local
CONGRESO: workshop on 1st. E.P.S. European School of Physics on
Dynamical processes in Molecular Physics
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Avila (España) AÑO:1991
- TIPO DE PARTICIPACIÓN: Miembro del comité organizador
CONGRESO: Tenth European Conference on dynamics of Molecular Collisions
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Salamanca (España) AÑO:1994
- TIPO DE PARTICIPACIÓN: Miembro del comité organizador
CONGRESO: 5th FEMTOCHEMISTRY CONFERENCE
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Toledo (España) AÑO:2001
- TIPO DE PARTICIPACIÓN: Co-chairman
CONGRESO: 14TH INTERNATIONAL WORKSHOP ON QUANTUM SYSTEMS IN CHEMISTRY
AND PHYSICS (QSCP XIV)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: San Lorenzo de El Escorial (España) AÑO:2009, 13-19 Septiembre

CONFERENCIAS

- Seminario invitado en “Argonne National Laboratory, Chemistry Division Seminar” que tuvo lugar en Argonne National Laboratory (Chicago, U.S.A.) en 1994. Título: “Vector Properties in Photodissociation: Application to ICN”
- Seminario invitado titulado “Fragmentation dynamics of tri and tetra-atomic van der Waals clusters”, IRSAMC informal meeting, que tuvo lugar en IRSAMC-Université Paul Sabatier (Toulouse, Francia) en 1995.
- Seminario invitado titulado “On the numerical methods to solve the time dependent Schödinger equation”, IRSAMC informal meeting, que tuvo lugar en IRSAMC-Université Paul Sabatier (Toulouse, Francia) en 1995.
- Conferencia invitada en el departamento de Matemáticas Aplicada de la facultad de ciencias de la Universidad de Valladolid el 20 de noviembre de 1996 titulada: “ Predissociacion vibracional en complejos de van der Waals triatómicos y tetra-atómicos”.
- Conferencia invitada con motivo de una reunión de un Proyecto INTAS europeo en San Petersburgo, Julio de 2001, sobre “Comparative study of the vector properties in reactive collisions and photoinitiated reactions from van der Waals complexes precursors: application to Li+HF”.
- Conferencia invitada en el departamento de Química Teórica de la Universidad Católica de Nijmegen, Holanda, el 26 de marzo de 2002 titulada: “ Quantum dynamics on reactive processes of M+HX systems: the role of the transition state structure”.
- “Tutorial Lecture” en el encuentro de la “Reaction Dynamics Network”, (RTN european network), celebrada en Segovia del 20 al 22 de junio de 2002, titulada “Reaction dynamics and transition state spectroscopy on systems composed by alkali (or alkali-earth) atoms hydrogen halides using quantum time dependent methods”.
- Conferencia en el “Reduced Workshop Paris-Madrid on Quantum Chemistry and Astrophysics”, celebrado en Madrid los días 21-22 de Octubre de 2004, titulada “Non-adiabatic reaction dynamics”.
- Conferencia en la reunión de grupos del proyecto de la CAM “Propiedades Mecánicas, eléctricas y catalíticas de nanoobjetos: síntesis, caracterización y modelización” en Marzo 2006, titulada “Dinámica cuántica de procesos moleculares”.
- Conferencia en el “workshop” del proyecto de la CAM “Propiedades Mecánicas, eléctricas y catalíticas de nanoobjetos: síntesis, caracterización y modelización” en Diciembre 2006, titulada “Técnicas de “embedding” para la simulación de la reactividad en nanoobjetos”.
- Conferencia en el “workshop” del proyecto de la CAM “Propiedades Mecánicas, eléctricas y catalíticas de nanoobjetos: síntesis, caracterización y modelización” el 12 de Febrero 2008, titulada “Aplicacion de técnicas de “embedding” para la reactividad de nano-objetos metálicos”
- Conferencia en el “workshop” del proyecto de la CAM “Propiedades Mecánicas, eléctricas y catalíticas de nanoobjetos: síntesis, caracterización y modelización” el 14 de diciembre de 2009, titulada “Reactividad sobre nanoobjetos de oro”

CURSOS

- Curso de Doctorado en “International School of Theoretical Chemistry in Pinar del Río (Cuba)”. Pinar del Río y la Habana (Cuba) del 6 al 17 de julio de 1992.

- Curso de doctorado en el departamento de Química Física Aplicada de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma, curso 96/97. Título: “Superficies de energía potencial y dinámica molecular cuántica” (Código 71313), con una duración de 60 horas (6 créditos) impartido conjuntamente con el Prof. Miguel Paniagua.

- Invitación para impartir dos horas de curso en la escuela de verano de la Universidad Complutense de Madrid titulada “Photodynamics of molecules and clusters” que tuvo lugar en el Escorial del 10 al 14 de Agosto de 1998.

- Curso de doctorado en el departamento de Química Física Aplicada de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma, curso 99/00. Título: “Superficies de energía potencial y dinámica molecular cuántica y espectroscopia” (Código 71313), con una duración de 50 horas (5 créditos) impartido conjuntamente con los Profesores Miguel Paniagua y Alfredo Aguado.

- Invitación para impartir una hora de curso en la escuela de verano de la Universidad Complutense de Madrid titulada “Femtoquímica y femtobiología” que tuvo lugar en el Escorial del 24 al 28 de Julio del 2000.

- Curso de doctorado en el departamento de Química Física Aplicada de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma, curso 00/01. Título: “Superficies de energía potencial y dinámica molecular cuántica y espectroscopia” (Código 71313), con una duración de 50 horas (5 créditos) impartido conjuntamente con los Profesores Miguel Paniagua y Alfredo Aguado.

- Curso de doctorado en el departamento de Química Física Aplicada de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma, curso 01/02. Título: “Superficies de energía potencial y dinámica molecular cuántica y espectroscopia” (Código 71313), con una duración de 50 horas (5 créditos) impartido conjuntamente con los Profesores Miguel Paniagua y Alfredo Aguado.

- Curso de doctorado en el departamento de Química Física Aplicada de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma, curso 02/03. Título: “Superficies de energía potencial y dinámica molecular cuántica y espectroscopia” (Código 71313), con una duración de 50 horas (5 créditos) impartido conjuntamente con los Profesores Miguel Paniagua y Alfredo Aguado.

- Curso de doctorado titulado “Dinámica de Reacciones Químicas y Femtoquímicas”, en el programa de doctorado interuniversitario “Química Física Aplicada” con MENCION DE CALIDAD, coordinado con la Univ. Complutense de Madrid, cuyos coordinadores Ernesto Díez Villanueva (UAM) y Emilio Aicart (Universidad Complutense). Cursos 2004/05, 2005/06, 2006/07 y 2008/09

- Curso de 4 créditos (40 horas) titulado “Teoría Cuántica de Colisiones Moleculares” en el master de doctorado de la Univ. Autónoma de Madrid titulado “Simulación de procesos moleculares” con mención de calidad, impartido en el curso 2006/2007

- Curso de 1h30m y tutoriales prácticos titulado “Dynamique réactionnelle et processus photoinitiés” en la escuela titulada “Dynamique Réactionnelle” du Réseau Français de Chimie Théorique (RFCT), 10^{ème} Université d’Eté de Physico-Chimie Théorique (UEPCT10), Dynamique des processus moléculaires et chimiques en phase gazeuse et aux interfaces gaz-surface Presqu’île de Giens, 2-7 septembre 2007

TESIS DOCTORALES DIRIGIDAS

TITULO: Reactividad por colisión e inducida por láser: Aplicación al sistema LiHF

DOCTORANDO: Manuel Lara Garrido

UNIVERSIDAD: COMPLUTENSE DE MADRID FACULTAD/ESCUELA: CIENCIAS FÍSICAS AÑO: 3 DE JUNIO DE 2002 CALIFICACION: Sobresaliente Cum Laude

TITULO: Probing ground and excited electronic states of LiHF and CaHCl systems to understand the harpoon mechanisms in collision and photoinitiated processes

DOCTORANDO: Cristina Sanz Sanz

UNIVERSIDAD: AUTÓNOMA DE MADRID FACULTAD/ESCUELA: CIENCIAS AÑO: 18 DE FEBRERO DE 2005 CALIFICACION: Sobresaliente Cum Laude

TITULO: Dinámica del estado de transición del OHF en varios estados electrónicos con intersecciones cónicas. Estudio del espectro de fotoeliminación electrónica del OHF⁻

DOCTORANDO: M. Dolores González Sánchez

UNIVERSIDAD: SALAMANCA FACULTAD/ESCUELA: QUÍMICAS AÑO: 16 DE MARZO 2005 CALIFICACION: Sobresaliente Cum Laude

TITULO: Propiedades catalíticas de agregados metálicos de oro

DOCTORANDO: Anais Dorta-Urra

UNIVERSIDAD: AUTÓNOMA DE MADRID FACULTAD/ESCUELA: CIENCIAS AÑO: EN DESARROLLO CALIFICACION:

TESIS DE LICENCIATURA DIRIGIDAS

• Dirección de la tesina realizada por D. David Caloto Suárez en diciembre de 1995 en la Universidad Autónoma de Madrid, titulada “Estudio teórico de la relajación vibracional intramolecular”, que obtuvo la calificación de sobresaliente.

• Dirección de la tesina realizada por Dña. Maria Dolores Gonzalez Sanchez (defendida el 18 julio del 2002) en la Universidad de Salamanca, titulada “Procesos no adiabáticos y representación diabática en moléculas”.

• Dirección del trabajo de DEA por Dña. Anais Dorta Urra (defendida el 28 junio del 2010) en la Universidad de Autonoma de Madrid, titulada “Mecanismos de disociación de hidrógeno molecular en cadenas y agregados de oro como prototipos modelo de nanoestructuras”.

OTROS MERITOS O ACLARACIONES QUE SE DESEE HACER CONSTAR

- Premio del programa Volkswagen-CSIC de Investigación y formación medioambiental a jóvenes investigadores en su convocatoria del año 1996
- “Referee” de la revistas “Journal of Physical Chemistry”, “Journal of Molecular Structure”, “Journal of Computational Chemistry”, “Physical Chemistry, Chemical Physics”, “ J. Chemical Physics”, “Journal of Physics”, etc.
- “Profesor Honorario” de la Universidad Autónoma de Madrid desde el curso 2000/2001
- Dirección y creación de una Unidad Asociada con el Departamento de Química-Física Aplicada de la Universidad Autónoma de Madrid, desde el año 2003
- Obtención de una ayuda del programa “Estancias de profesores de universidad e investigadores del CSIC y de OPIS en centros de enseñanza superior y de investigación extranjeros y españoles” ”Salvador de Madariaga”, para una estancia de 3 meses en la Universidad de California, Irvine, durante el año 2005
- Representante de personal en la Junta de Gobierno del IMAFF desde el año 2000
- Jefe del departamento de “Física Atómica, Molecular y de Agregados” del IFF desde enero de 2009.
- Las citas recibidas son más de 2300 en el “**Citation Index**” (ISI)
- Mi parámetro H es 26.