

**DEPARTAMENTO DE  
QUÍMICA FÍSICA**

*cuyos cargos unipersonales son:*

Director

**D. SANTIAGO TOLOSA ARROYO**  
Facultad de Ciencias  
Tel.: 924 289 021 # Fax: 924 275 576  
Correo electrónico: santi@unex.es

Secretario

**D. ANTONIO HIDALGO GARCÍA**  
Facultad de Ciencias  
Tel.: 924 289 684 # Fax: 924 275 576  
Correo electrónico: antonio@unex.es

**APARTADOS:**

<b>I. RECURSOS HUMANOS:</b>				
I.1. Personal: Doctores			13	
I.2. Personal: No Doctores			1	15
I.3. Personal de Administración y Servicios			1	
<b>II. LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN.</b>				<b>10</b>
<b>III. PROYECTOS, CONTRATOS Y CONVENIOS DE INVESTIGACIÓN.</b>				<b>4</b>
<b>IV. PUBLICACIONES:</b>				
		<b>INTERNACIONALES</b>	<b>NACIONALES</b>	
IV.1. Artículos en Revistas		8	0	8
IV.2. Libros o Capítulos de Libros				
	Libros	0	0	0
	Capítulos de Libro	0	0	0
				<b>8</b>
IV.3. Patentes				0
IV.4. Otras Publicaciones				0
<b>V. PONENCIAS Y COMUNICACIONES A CONGRESOS:</b>				
V.1. Presidencias de Sesión, Mesas Redondas y Conferencias o Ponencias Invitadas				0
V.2. Comunicaciones a Congresos publicadas como Resumen		2	0	2
V.3. Otras Comunicaciones a Congresos		0	0	0
<b>VI. TESIS DOCTORALES, TRABAJOS DE GRADO Y PROYECTOS FIN CARRERA :</b>				
VI.1. Tesis Doctorales				0
VI.2. Trabajos de Grado				0
VI.3. Proyectos Fin de Carrera				0
<b>VII. ESTANCIAS:</b>				
VII.1. Estancias de Investigadores del Dpto. em otros Centros				1
VII.2. Profesores o Investigadores Visitantes				0
<b>VIII. CURSOS Y CONGRESOS ORGANIZADOS:</b>				
VIII.1. Cursos de Postgrado o Especialización organizados				0
VIII.2. Congresos organizados				0
<b>IX. CONFERENCIAS IMPARTIDAS EN OTROS CENTROS.</b>				<b>0</b>
<b>TOTAL REGISTROS INTRODUCIDOS EN ESTE DEPARTAMENTO . . . . .</b>				<b>40</b>

## **I. RECURSOS HUMANOS**

### *I.1. Personal: Doctores*

D. MANUEL ÁNGEL AGUILAR ESPINOSA  
D. JOSÉ CARLOS CORCHADO MARTÍN-ROMO  
D. JOAQUÍN ESPINOSA GARCÍA  
D. ANTONIO HIDALGO GARCÍA  
D. ÁNGEL LÓPEZ PIÑEIRO  
Dña. M<sup>a</sup> ELENA MARTÍN NAVARRO  
D. EVARISTO OJALVO SÁNCHEZ  
D. FCO. JAVIER OLIVARES DEL VALLE  
Dña. MARÍA LUZ SÁNCHEZ MENDOZA  
D. JORGE ANTONIO SANSÓN MARTÍN  
D. JORGE ANTONIO SANSÓN MARTÍN  
Dña. MARÍA MERCEDES TIRADO GARCÍA  
D. SANTIAGO TOLOSA ARROYO

### **Puesto Docente**

TU  
TU  
TU  
TU  
TU  
CU  
AS I  
TU  
CU  
AS III  
AU I  
AU II  
TU  
TU

### *I.2. Personal: No Doctores*

D. IGNACIO FERNÁNDEZ GALVÁN

### **Puesto Docente**

BEC - MEC

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

Dña. MARÍA DOLORES FEIJOO BLANCO

### **Puesto Administrativo**

Oficial Oficinas - Laboratorios



## II. LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

<i>Título</i>	<i>Clase de Investigación</i>	<i>Campo Científico</i>
* Espectroscopía molecular	Investigación Básica	CIENTIFICO
* Interacciones moleculares	Investigación Básica	CIENTIFICO
* Propiedades conformacionales de macromoléculas	Investigación Básica	CIENTIFICO
* Propiedades hidrodinámicas de macromoléculas	Investigación Básica	CIENTIFICO
* Química Cuántica	Investigación Básica	CIENTIFICO
* Reactividad Química Teórica	Investigación Básica	CIENTIFICO
* Simulación de macromoléculas	Investigación Básica	CIENTIFICO
* Simulación del puente de hidrógeno y procesos asociados	Investigación Básica	CIENTIFICO
* Solvatación	Investigación Básica	CIENTIFICO
* Termoquímica Teórica	Investigación Básica	CIENTIFICO

### III. PROYECTOS, CONTRATOS Y CONVENIOS DE INVESTIGACIÓN

<b>TÍTULO</b>	<b>Determinación de puntos estacionarios sobre superficies de energía potencial para sistemas en disolución: Obtención de geometrías óptimas, estados de transición y caminos de reacción</b>
<b>INVESTIGADOR PRINCIPAL</b>	AGUILAR ESPINOSA, MANUEL ÁNGEL
<b>MIEMBROS EQUIPO INVESTIGADOR</b>	SÁNCHEZ, M.L. y FDEZ. GALVAN, I. <b>Total Investigadores: 3</b>
<b>ENTIDAD FINANCIADORA</b>	DGICYT
<b>CAMPO CIENTÍFICO (C. Unesco)</b>	CIENTIFICO; 2307
<b>CLAVE REF.</b>	2PR01A010
<b>PRESUPUESTO TOTAL</b>	17.750,00 €
<b>ANUALIDAD DE 2002</b>	5.250,00 €
<b>TÍTULO</b>	<b>Estudio de la influencia del disolvente en las propiedades ópticas no lineales de solutos polares</b>
<b>INVESTIGADOR PRINCIPAL</b>	OLIVARES DEL VALLE, FCO. JAVIER
<b>MIEMBROS EQUIPO INVESTIGADOR</b>	<b>Total Investigadores: 6</b>
<b>ENTIDAD FINANCIADORA</b>	DGICYT
<b>CAMPO CIENTÍFICO (C. Unesco)</b>	CIENTIFICO; 2307
<b>CLAVE REF.</b>	BQU2000-0243
<b>PRESUPUESTO TOTAL</b>	18.030,36 €
<b>ANUALIDAD DE 2002</b>	8.113,66 €
<b>TÍTULO</b>	<b>Estudio químico cuántico de procesos de absorción y emisión de radiación electromagnética en fase disolvente</b>
<b>INVESTIGADOR PRINCIPAL</b>	OLIVARES DEL VALLE, FCO. JAVIER
<b>MIEMBROS EQUIPO INVESTIGADOR</b>	LÓPEZ PIÑEIRO, A.; CORCHADO, J.C. y MARTÍN, E. <b>Total Investigadores: 4</b>
<b>ENTIDAD FINANCIADORA</b>	DGICYT
<b>CAMPO CIENTÍFICO (C. Unesco)</b>	CIENTIFICO; 2307
<b>CLAVE REF.</b>	2PR01A006
<b>PRESUPUESTO TOTAL</b>	16.350,00 €
<b>ANUALIDAD DE 2002</b>	5.450,00 €
<b>TÍTULO</b>	<b>Estudios de procesos en disolución ligados al puente de Hidrógeno: Asociación y transferencia protónica</b>
<b>INVESTIGADOR PRINCIPAL</b>	TOLOSA ARROYO, SANTIAGO
<b>MIEMBROS EQUIPO INVESTIGADOR</b>	HIDALGO, A.; OJALVO, E.A.; TIRADO, M.M. y SANSÓN, J.A. <b>Total Investigadores: 5</b>
<b>ENTIDAD FINANCIADORA</b>	DGICYT
<b>CAMPO CIENTÍFICO (C. Unesco)</b>	CIENTIFICO; 2307
<b>CLAVE REF.</b>	BQU2001-0750
<b>PRESUPUESTO TOTAL</b>	28.683,29 €
<b>ANUALIDAD DE 2002</b>	21.080,49 €

## IV. PUBLICACIONES

### IV.1. Artículos en Revistas

- AUTORES** ALHAMBRA, C.; SÁNCHEZ, M.L.; CORCHADO, J.C.; GAO, J. y TRUHLAR, D.G.  
**TÍTULO** Erratum to : "Quantum mechanical tunneling in methylamine dehydrogenase"  
**Revista periódica** **CHEM PHYS LETT. J.C.R.: 2,364.**  
**Ref.: Vol(nº), pg ini-pg fin (año)** **355** , 388-394 (2002)
- AUTORES** GARRETT, B.C. y CORCHADO, J.C.  
**TÍTULO** POTLIB 2001: A potential energy surface library for chemical systems  
**Revista periódica** **COMPUT PHYS COMMUN. J.C.R.: 1,082.**  
**Ref.: Vol(nº), pg ini-pg fin (año)** **144** , 169-187 (2002)
- AUTORES** FERNANDEZ-RAMOS, A.; TRUHLAR, D.G.; CORCHADO, J.C. y ESPINOSA-GARCÍA, J.  
**TÍTULO** Interpolated Algorithm for Large-Curvature Tunneling Calculations of Transmission Coefficients for Variational Transition State Theory Calculations of Reaction Rates  
**Revista periódica** **J PHYS CHEM A. J.C.R.: 2,63.**  
**Ref.: Vol(nº), pg ini-pg fin (año)** **106** , 4957-4960 (2002)
- AUTORES** MARTÍN, M.E.; SÁNCHEZ, M.L.; OLIVARES DEL VALLE, F.J. y AGUILAR, M.A.  
**TÍTULO** A theoretical study of liquid alcohols using averaged solvent electrostatic potentials obtained from molecular dynamics simulations: Methanol, ethanol and propanol  
**Revista periódica** **J CHEM PHYS. J.C.R.: 3,147.**  
**Ref.: Vol(nº), pg ini-pg fin (año)** **116** (4), 1613-1620 (2002).
- AUTORES** MARTÍN, M.E.; AGUILAR, M.A.; CHALMET, S. y RUIZ-LOPEZ, M.F.  
**TÍTULO** An iterative procedure to determine Lennard-Jones parameters for their use in quantum mechanics/molecular mechanics liquid state simulations  
**Revista periódica** **CHEM PHYS. J.C.R.: 1,957.**  
**Ref.: Vol(nº), pg ini-pg fin (año)** **284** , 607-614 (2002)
- AUTORES**  
**TÍTULO** Theoretical Calculation of the Stark Component of the Solute-Solvent Interaction Energy. Validity of the Mean Field Approximation in the Study of Liquids and Solutions  
**Revista periódica** **J PHYS CHEM B. J.C.R.: 3,379.**  
**Ref.: Vol(nº), pg ini-pg fin (año)** **106** , 4813-4817 (2002)
- AUTORES** TOLOSA, S.; SANSÓN, J.A. y HIDALGO, A.  
**TÍTULO** The N-H...O=C proton transfer in aqueous solution: a suitable procedure for extracting atomic charges  
**Revista periódica** **CHEM PHYS LETT. J.C.R.: 2,364.**  
**Ref.: Vol(nº), pg ini-pg fin (año)** **357** , 279-286 (2002)



**AUTORES**

y VILLÀ, J.

**TÍTULO**

The Incorporation of Quantum Effects in Enzyme Kinetics Modelling

**Revista periódica**

ACCOUNTS CHEM RES. J.C.R.: 12,781.

**Ref.: Vol(nº), pg ini-pg fin (año)**

35 , 341-349 (2002)



## V. PONENCIAS Y COMUNICACIONES A CONGRESOS

### *V.2. Comunicaciones a Congresos publicadas como resumen*

**AUTORES**

**TÍTULO**

Geometry optimization of molecules in solution: joint use of the mean field approximation and the free-energy gradient method

**CONGRESO**

**World Association of Theoretically Oriented Chemists**

**Publicado en**

**Book of Abstracts, 197-197.**

**Ciudad (PAÍS)**

Lugano (SUIZA)

**Fecha de celebración**

4-9 Agosto, 2002

**TIPO de participación**

**Póster o Panel**

**AUTORES**

FDEZ. GALVAN, I. y AGUILAR, M.A.

**TÍTULO**

Geometry optimization of molecules in solution

**CONGRESO**

**ESPA 2002**

**Publicado en**

**Libro de Actas, B-30-B-30.**

**Ciudad (PAÍS)**

Sevilla (ESPAÑA)

**Fecha de celebración**

11-13 Septiembre, 2002

**TIPO de participación**

**Póster o Panel**



## **VII. ESTANCIAS**

### *VII.1. Estancias de Investigadores del Departamento en otros Centros*

<b>INVESTIGADOR</b>	<b>M<sup>a</sup> ELENA MARTÍN NAVARRO</b>
<b>CENTRO RECEPTOR</b>	Universidad de Siena
<b>Ciudad (PAÍS)</b>	<b>Siena (ITALIA)</b>
<b>Duración</b>	Del 01/04/2002 al 31/03/2003