

**DEPARTAMENTO DE
QUÍMICA FÍSICA**

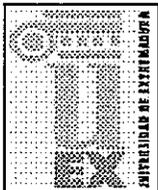
cuyos cargos unipersonales son:

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.: 924 289 400 # Fax: 924 275 576
Correo electrónico: antonio@unex.es

APARTADOS:

I. RECURSOS HUMANOS:				
I.1. Personal: Doctores			12	
I.2. Personal: No Doctores			2	15
I.3. Personal de Administración y Servicios			1	
II. LÍNEAS DE INVESTIGACION.				10
III. PROYECTOS, CONTRATOS Y CONVENIOS DE INVESTIGACIÓN.				5
IV. PUBLICACIONES:				
	INTERNACIONALES	NACIONALES		
IV.1. Artículos en Revistas	6	0	6	
IV.2. Libros o Capítulos de Libros				
Libros	0	0	0	
Capítulos de Libro	1	0	1	7
IV.3. Patentes			0	
IV.4. Otras Publicaciones			0	
V. PONENCIAS Y COMUNICACIONES A CONGRESOS:				
V.1. Presidencias de Sesión, Mesas Redondas y Conferencias o Ponencias Invitadas			0	
V.2. Comunicaciones a Congresos publicadas como Resumen	4	0	4	4
V.3. Otras Comunicaciones a Congresos	0	0	0	
VI. TESIS DOCTORALES, TRABAJOS DE GRADO Y PROYECTOS FIN DE CARRERA :				
VI.1. Tesis Doctorales			0	
VI.2. Trabajos de Grado			1	1
VI.3. Proyectos Fin de Carrera			0	
VII. ESTANCIAS:				
VII.1. Estancias de Investigadores del Dpto. em otros Centros			2	
VII.2. Profesores o Investigadores Visitantes			0	2
VIII. CURSOS Y CONGRESOS ORGANIZADOS:				
VIII.1. Cursos de Postgrado o Especialización organizados			0	
VIII.2. Congresos organizados			0	0
IX. CONFERENCIAS IMPARTIDAS EN OTROS CENTROS.				0
TOTAL REGISTROS INTRODUCIDOS EN EL DEPARTAMENTO				44



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^a ELENA MARTÍN NAVARRO
D. EVARISTO OJALVO SÁNCHEZ
D. FCO. JAVIER OLIVARES DEL VALLE
Dña. MARÍA LUZ SÁNCHEZ MENDOZA
D. JORGE ANTONIO SANSÓN MARTÍN
Dña. MARÍA MERCEDES TIRADO GARCÍA
D. SANTIAGO TOLOSA ARROYO

Puesto Docente

TU
TU
TU
TU
CU
Ramón y Cajal
TU
CU
AS III
AU II
TU
TU

I.2. Personal: No Doctores

D. IGNACIO FERNÁNDEZ GALVÁN
Dña. AURORA MUÑOZ LOSA

Puesto Docente

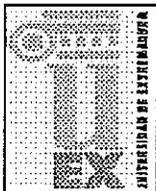
BEC - MEC
BEC - MEC

I.3. Personal de Administración y Servicios

Dña. MARÍA DOLORES FEIJOO BLANCO

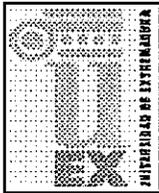
Puesto Administrativo

Técnico Esp. - Laboratorios



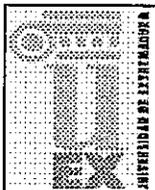
II. LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

<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

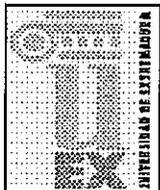


III. PROYECTOS, CONTRATOS Y CONVENIOS DE INVESTIGACIÓN

TÍTULO	Determinación de puntos estacionarios sobre superficies de energía potencial para sistemas en disolución: Obtención de geometrías óptimas, estados de transición y caminos de reacción
INVESTIGADOR PRINCIPAL	AGUILAR ESPINOSA, MANUEL ÁNGEL
MIEMBROS EQUIPO INVESTIGADOR	SANCHEZ, M.L. y FDEZ. GALVAN, I. Total Investigadores: 3
ENTIDAD FINANCIADORA	DGICYT
CAMPO CIENTÍFICO (C. Unesco)	CIENTIFICO; 2307
CLAVE REF.	2PR01A010
PRESUPUESTO TOTAL	15.750,00 €
ANUALIDAD DE 2003	5.250,00 €
TÍTULO	Estrategias teórico-computacionales para el estudio cinético y termoquímico de sistemas químicos relacionados con la contaminación atmosférica
INVESTIGADOR PRINCIPAL	ESPINOSA GARCÍA, JOAQUÍN
MIEMBROS EQUIPO INVESTIGADOR	CORCHADO, J.C.; GARCIA , J. C.; FERNANDEZ, A. y CABELLO, A. Total Investigadores: 5
ENTIDAD FINANCIADORA	Junta de Extremadura
CAMPO CIENTÍFICO (C. Unesco)	CIENTIFICO; 2307
CLAVE REF.	2PR01A010
PRESUPUESTO TOTAL	18.000,00 €
ANUALIDAD DE 2003	4.500,00 €
TÍTULO	Estudio de la influencia del disolvente en las propiedades ópticas no lineales de solutos polares
INVESTIGADOR PRINCIPAL	OLIVARES DEL VALLE, FCO. JAVIER
MIEMBROS EQUIPO INVESTIGADOR	LOPEZ PINEIRO, A.; AGUILAR, M.A.; SANCHEZ, M.L.; CORCHADO, J.C. y MARTIN DELGADO, Total Investigadores: 6
ENTIDAD FINANCIADORA	DGICYT
CAMPO CIENTÍFICO (C. Unesco)	CIENTIFICO; 2307
CLAVE REF.	BQU2000-0243
PRESUPUESTO TOTAL	18.030,36 €
ANUALIDAD DE 2003	8.113,66 €
TÍTULO	Estudio químico cuántico de procesos de absorción y emisión de radiación electromagnética en fase líquida. Refinamiento del método CASEP-QM/MM para la obtención de propiedades dinámicas en el disolvente
INVESTIGADOR PRINCIPAL	OLIVARES DEL VALLE, FCO. JAVIER
MIEMBROS EQUIPO INVESTIGADOR	LOPEZ PINEIRO, A.; CORCHADO, J.C. y MARTIN, E. Total Investigadores: 4
ENTIDAD FINANCIADORA	DGICYT
CAMPO CIENTÍFICO (C. Unesco)	CIENTIFICO; 2307
CLAVE REF.	2PR01A006
PRESUPUESTO TOTAL	16.350,00 €
ANUALIDAD DE 2003	5.450,00 €



TÍTULO	Estudios de procesos en disolución ligados al puente de Hidrógeno: Asociación y transferencia protónica
INVESTIGADOR PRINCIPAL	TOLOSA ARROYO, SANTIAGO
MIEMBROS EQUIPO INVESTIGADOR	HIDALGO, A.; OJALVO, E.A.; TIRADO, M.M. y SANSON, J.A. Total Investigadores: 5
ENTIDAD FINANCIADORA	DGICYT
CAMPO CIENTÍFICO (C. Unesco)	CIENTIFICO; 2307
CLAVE REF.	BQU2001-0750
PRESUPUESTO TOTAL	28.683,29 €
ANUALIDAD DE 2003	3.606,07 €



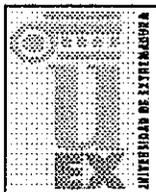
IV. PUBLICACIONES

IV.1. Artículos en Revistas

- AUTORES** ESPINOSA-GARCÍA, J. y GUTIERREZ MERINO, C.
TÍTULO The trapping of the OH radical by Coenzyme Q. A theoretical and experimental study
Revista periódica J PHYS CHEM A. J.C.R.: 2,63.
Ref.: Vol(nº), pg ini-pg fin (año) 107, 9712-9723 (2003)
- AUTORES** FDEZ. GALVAN, I.; SÁNCHEZ, M.L.; MARTÍN, E.; OLIVARES DEL VALLE, F.J. y AGUILAR, M.A.
TÍTULO Geometry optimization of molecules in solution: Joint use of the mean field approximation and the free-energy gradient method
Revista periódica J CHEM PHYS. J.C.R.: 3,147.
Ref.: Vol(nº), pg ini-pg fin (año) 118, 255- (2003)
- AUTORES** FDEZ. GALVAN, I.; SÁNCHEZ, M.L.; MARTÍN, E.; OLIVARES DEL VALLE, F.J. y AGUILAR, M.A.
TÍTULO ASEP/MD: a program for the calculation of solvent effects that combines QM/MM methods and the mean field approximation
Revista periódica COMPUT PHYS COMMUN. J.C.R.: 1,082.
Ref.: Vol(nº), pg ini-pg fin (año) 155, 244- (2003)
- AUTORES** MUÑOZ LOSA, A.; FDEZ. GALVAN, I.; MARTÍN, E. y AGUILAR, M.A.
TÍTULO An averaged solvent electrostatic potential/molecular dynamics study of the influence of the electron correlation on the properties of liquid hydrogen fluoride
Revista periódica J MOL STRUC-THEOCHEM. J.C.R.: ,919.
Ref.: Vol(nº), pg ini-pg fin (año) 632, 227- (2003)
- AUTORES** MUÑOZ LOSA, A.; FDEZ. GALVAN, I.; MARTÍN, E. y AGUILAR, M.A.
TÍTULO Theoretical study of liquid hydrogen fluoride. Application of the averaged solvent electrostatic potential/molecular dynamics method
Revista periódica J PHYS CHEM B. J.C.R.: 3,379.
Ref.: Vol(nº), pg ini-pg fin (año) 107, 5043- (2003)
- AUTORES** TOLOSA, S.; SANSÓN, J.A. y HIDALGO, A.
TÍTULO Thermodynamic and dielectric properties of aqueous solution using ESIE charges to describe small solutes
Revista periódica CHEM PHYS. J.C.R.: 1,957.
Ref.: Vol(nº), pg ini-pg fin (año) 293, 193-202 (2003)

IV.2. Libros o Capítulos de Libros

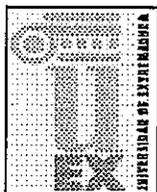
- AUTORES** TOLOSA, S.; SANSÓN, J.A. y HIDALGO, A.
TÍTULO DEL LIBRO Recent Research Developments in Chemical Physics
Título del Capítulo Simulation of Chemical Processes in Solution using ab initio energies
EDITORES Transworld Research Network
I.S.B.N.; pg ini-pg fin (año) 81-7895-066-9; 291-314 (2003)



V. PONENCIAS Y COMUNICACIONES A CONGRESOS

V.2. Comunicaciones a Congresos publicadas como resumen

AUTORES	AGUILAR, M.A. y FDEZ. GALVAN, I.
TÍTULO	Aplicación de la aproximación campo medio a la búsqueda de estados de transición
CONGRESO	CHI I EL
Publicado en	Libro de Resúmenes, 117-117.
Ciudad (PAÍS)	Marraquech (Marruecos)
Fecha de celebración	7-12 Septiembre, 2003
TIPO de participación	Póster o Panel
AUTORES	FDEZ. GALVAN, I.; OLIVARES DEL VALLE, F.J.; MARTÍN, E. y AGUILAR, M.A.
TÍTULO	Estudio del equilibrio anomérico de la d-xilosa en disolución acuosa
CONGRESO	CHI I EL
Publicado en	Libro de Resúmenes, 72-72.
Ciudad (PAÍS)	Marraquech (Marruecos)
Fecha de celebración	7-12 Septiembre, 2003
TIPO de participación	Póster o Panel
AUTORES	MUÑOZ LOSA, A.; FDEZ. GALVAN, I.; MARTÍN, M.E. y AGUILAR, M.A.
TÍTULO	Optimización de geometrías en disolución: Estudio del fluoruro de hidrógeno
CONGRESO	CHI I EL
Publicado en	Libro de Resúmenes, 75-75.
Ciudad (PAÍS)	Marraquech (Marruecos)
Fecha de celebración	7-12 Septiembre, 2003
TIPO de participación	Póster o Panel
AUTORES	OLIVARES DEL VALLE, F.J.; CORCHADO, J.C.; SÁNCHEZ, M.L. y AGUILAR, M.A.
TÍTULO	D-glucopiranososa en disolución acuosa. Influencia del disolvente
CONGRESO	CHI I EL
Publicado en	Libro de Resúmenes, 77-77.
Ciudad (PAÍS)	Marraquech (Marruecos)
Fecha de celebración	7-12 Septiembre, 2003
TIPO de participación	Póster o Panel



VI. TESIS DOCTORALES, TRABAJOS DE GRADO Y PROYECTOS FIN DE CARRERA

VI.2. Trabajo de Grado

AUTOR	CIPRIANO RANGEL DELGADO
TÍTULO	Contribución al estudio teórico de reacciones de interés atmosférico. La reacción $\text{BrCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3 + \text{OH}$
DIRECTORES	Dr. D. JOAQUIN ESPINOSA GARCIA y Dr. D. JOSE CARLOS CORCHADO MARTIN-ROMO.
Fecha de Lectura	19/12/2003
Calificación	Calificación obtenida: SOBRESALIENTE. Defendido el 19/12/2003.



VII. ESTANCIAS

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

INVESTIGADOR	M^a ELENA MARTÍN NAVARRO
CENTRO RECEPTOR	Università degli Studi di Siena
Ciudad (PAÍS)	Siena (Italia)
Duración	Del 01/03/2002 al 30/03/2003
INVESTIGADOR	JORGE ANTONIO SANSÓN MARTÍN
CENTRO RECEPTOR	Departement de Physique et Modelisation - Université d'Evry-Val-D'Essonne
Ciudad (PAÍS)	Evry (Francia)
Duración	Del 01/02/2003 al 31/12/2003