

Fecha del CVA

12/12/2023

Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre	Susana		
Apellidos	Gómez Carrasco		
Sexo	No Contesta	Fecha de Nacimiento	
DNI/NIE/Pasaporte			
URL Web			
Dirección Email			
Open Researcher and Contributor ID (ORCID)	0000-0002-6089-5147		

A.1. Situación profesional actual

Puesto	Profesor Contratado Doctor		
Fecha inicio	2018		
Organismo / Institución	Universidad de Salamanca		
Departamento / Centro	Química Física / Facultad de Farmacia		
País		Teléfono	
Palabras clave	Superficies de energía potencial; Dinámica cuántica		

Parte B. RESUMEN DEL CV

Parte C. LISTADO DE APORTACIONES MÁS RELEVANTES

C.1. Publicaciones más importantes en libros y revistas con “peer review” y conferencias

AC: Autor de correspondencia; (nº x / nº y): posición firma solicitante / total autores. Si aplica, indique el número de citaciones

- Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; D. Felix-González; A. Aguado; O. Roncero. 2022. Spin-orbit transitions in the N+(P-3 (JA))+H2 -> NH+(X-2 Pi, (4)Sigma(-)) + H(S-2) reaction, using adiabatic and mixed quantum-adiabatic statistical approaches. Journal of Chemical Physics. 157-084301.
- Artículo científico.** P. Ortega; C. Sanz-Sanz; S. Gómez-Carrasco; L. González-Sánchez; P. Jambrina. 2021. DpgC-Catalyzed Peroxidation of 3,5-Dihydroxyphenylacetyl-CoA (DPA-CoA): Insights into the Spin-Forbidden Transition and Charge Transfer Mechanisms. Chem. Eur. J. 27, pp.1700.
- Artículo científico.** Roland Wester; Alberto M. Santadaria; Susana Gómez Carrasco; F. A. Gianturco. 2019. Collisional Quantum Dynamics for MgH- ((1)Sigma(+)) With He as a Buffer Gas: Ionic State-Changing Reactions in Cold Traps. Frontiers in Chemistry. 7-64.
- Artículo científico.** YV Suleimanov; O Roncero; S Gómez-Carrasco; A. Aguado. 2018. A Ring Polymer Molecular Dynamics Approach to Study the Transition between Statistical and Direct Mechanisms in the H-2 + H-3(+) -> H-3(+) + H-2 Reaction. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS. 9, pp.2133-2137.
- Artículo científico.** A. W. Huran; L. González-Sánchez; S. Gómez-Carrasco; J. Aldegunde. 2017. A quantum mechanical study of the k-j and k'-j' vector correlations for the H+LiH ? Li H2 reaction. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. AMER CHEMICAL SOC. 121, pp.1535-1543.
- Artículo científico.** L. González-Sánchez; S. Gómez-Carrasco; A. M. Santadaria; F. A. Gianturco; R. Wester; 1 (Optics). 2017. Investigating the electronic properties and structural features of MgH and of MgH- anions. PHYSICAL REVIEW A. AMER PHYSICAL SOC. 96, pp.042501(1)-042501(6).

- 7 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; B. Godard; F. Lique; et al; J. Cernicharo. 2014. OH+ in astrophysical media: state-to-state formation rates, einstein coefficients and inelastic collision rates with He. *ASTROPHYSICAL JOURNAL*. IOP PUBLISHING LTD. 794, pp.1-16.
- 8 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; L. González-Sánchez; N. Bulut; O. Roncero; L. Bañares; J. F. Castillo Factor de impacto (2014): 5.993 Número de veces citado (2017): 6 Cuartil: 1 23.2014. State-to-state quantum wave packet dynamics of the LiH+H reaction on two ab initio potential energy surfaces. *ASTROPHYSICAL JOURNAL*. 784, pp.1-8.
- 9 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; L. González-Sánchez; A. Aguado; C. Sanz-Sanz; A. Zanchet; O. Roncero. 2012. Dynamically biased statistical model for the ortho/para conversion in the H2+H3+ -> H3+ + H2. *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*. AMERICAN INSTITUTE PHYSICS. 137, pp.094303(1)-094303(12).
- 10 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; H. Köppel. 2012. Quantum dynamical study of low-energy photoelectron bands of 2-phenylethyl-N,N-dimethylamine. *JOURNAL OF CHEMICAL SCIENCES*. 124, pp.247-253.
- 11 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; N. Bulut; L. Bañares; O. Roncero. 2012. Wave packet calculations on nonadiabatic effects for the O(3P) + HF(1Sigma) reaction under hyperthermal conditions. *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*. 137, pp.114309(1)-114309(9).
- 12 **Artículo científico.** (1/2) S. Gómez-Carrasco; H. Köppel. 2011. Theoretical treatment of five strongly coupled electronic states of formaldehyde. *FARADAY DISCUSSIONS : GENERAL DISCUSSIONS*. 150, pp.156-158.
- 13 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; T. Müller; H. Köppel. 2010. Ab initio study of the VUV-induced multistate photodynamics of formaldehyde. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A*. AMER CHEMICAL SOC. 114, pp.11436-11449.
- 14 **Artículo científico.** A. Zanchet; T. González-Lezana; A. Aguado; S. Gómez-Carrasco; O. Roncero. 2010. Nonadiabatic state-to-state reactive collisions among open shell reactants with conical intersections: the OH(2P)+F(2P) example. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A*. AMER CHEMICAL SOC. 114, pp.9733-9742.
- 15 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; L. González-Sánchez; A. Aguado; O. Roncero; J. M. Alvariño; M. Luz Hernández; M. Paniagua. 2009. Differential cross sections and product rotational polarization in the A+BC reactions using wave packet methods: H+ + D2 and Li + HF examples. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A*. AMER CHEMICAL SOC. 113, pp.14488-14501.
- 16 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; H. Köppel. 2008. Ab initio study of the Renner-Teller effect in the X 2Pi electronic state of the OHF- anion. *CHEMICAL PHYSICS*. ELSEVIER SCIENCE BV. 346, pp.81-88.
- 17 **Artículo científico.** E. García; A. Saracibar; S. Gómez-Carrasco; A. Laganá. 2008. Modeling the global potential energy surface of the N+N2 reaction from ab initio data. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*. ROYAL SOC CHEMISTRY. 10, pp.2552-2558.
- 18 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; M. L. Hernández; J. M. Alvariño. 2007. Quantum and quasiclassical state-selected O(1D)+HF reaction dynamics and kinetics on a new MRCI ground singlet potential energy surface. *CHEMICAL PHYSICS LETTERS*. ELSEVIER SCIENCE BV. 435, pp.188-193.
- 19 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; A. Aguado; M. Paniagua; O. Roncero. 2007. Transition state spectroscopy of open shell systems: angle-resolved photodetachment spectra for the adiabatic singlet states of OHF. *JOURNAL OF PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY A-CHEMISTRY*. ELSEVIER SCIENCE SA. 190, pp.145-160.
- 20 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; O. Roncero. 2006. Coordinate transformation methods to calculate state-to-state reaction probabilities with wave packet treatments. *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*. AMERICAN INSTITUTE PHYSICS. 125, pp.054102(1)-054102(14).

- 21 Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; A. Aguado; M. Paniagua; O. Roncero. 2006. Coupled diabatic potential energy surfaces for studying the nonadiabatic dynamics at conical intersections in angular resolved photodetachment simulations of OHF- -> OHF+e. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. AMERICAN INSTITUTE PHYSICS. 125, pp.164321(1)-164321(16).
- 22 Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; O. Roncero; L. González-Sánchez; M. L. Hernández; J. M. Alvariño; M. Paniagua; A. Aguado. 2005. F+OH reactive collisions on new excited 3A" and 3A' potential energy surfaces. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. AMERICAN INSTITUTE PHYSICS. 123, pp.114310(1)-114310(13).
- 23 Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; L. González-Sánchez; A. Aguado; O. Roncero; J. M. Alvariño; M. L. Hernández; M. Paniagua. 2004. Direct versus resonances mediated F+OH collisions on a new 3A" potential energy surface. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. AMERICAN INSTITUTE PHYSICS. 121, pp.4605-4618.
- 24 Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; L. González-Sánchez; A. Aguado; O. Roncero; J. M. Alvariño; M. L. Hernández; M. Paniagua. 2004. Dynamics and kinetics of the F+OH reaction on the ground triplet potential energy surface. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. ELSEVIER SCIENCE BV. 383, pp.25-30.
- 25 Artículo científico.** L. González-Sánchez; S. Gómez-Carrasco; A. Aguado; M. Paniagua; J. M. Alvariño; M. L. Hernández; O. Roncero. 2004. Photodetachment spectrum of OHF-: three-dimensional study of the heavy-light-heavy resonances. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. AMERICAN INSTITUTE PHYSICS. 121-1, pp.309-320.
- 26 Artículo científico.** L. González-Sánchez; S. Gómez-Carrasco; A. Aguado; M. Paniagua; M. L. Hernández; J. M. Alvariño; O. Roncero. 2004. Quantum stereodynamics of the F+OH reactive collision on the 1 3A" state. MOLECULAR PHYSICS. TAYLOR & FRANCIS LTD. 102, pp.2381-2392.
- 27 Artículo científico.** L. González-Sánchez; S. Gómez-Carrasco; A. Aguado; M. Paniagua; M. L. Hernández; J. M. Alvariño; O. Roncero. 2004. Transition state dynamics of OHF on several electronic states: Photodetachment spectrum of OHF- and conical intersections. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. AMERICAN INSTITUTE PHYSICS. 121-20, pp.9865-9875.
- 28 Capítulo de libro.** 2019. Radiative Processes in Astrophysical Molecules. GAS-PHASE CHEMISTRY IN SPACE: FROM ELEMENTARY PARTICLES TO COMPLEX ORGANIC MOLECULES.
- 29 Capítulo de libro.** H. Köppel; S. Gomez-Carrasco; S. Faraji. 2011. Multistate vibronic dynamics and multiple conical intersections. CONICAL INTERSECTIONS. W. Domcke, D. R. Yarkony, H. Köppel. pp.249-301.
- 30 Capítulo de libro.** O. Roncero; S. Gómez-Carrasco; L. González-Sánchez; M. Paniagua; A. Aguado. 2004. Reaction dynamics on conical intersections for the OHF system. QUANTUM DYNAMICS AT CONICAL INTERSECTIONS (CCP 6). S. C. Althorpe, G. A. Worth, Collaborative Computational Project on Molecular Quantum Dynamics (CCP6). pp.87-98.
- 31 Abstract de congreso.** H. Köppel; S. Kopec; S. Gómez-Carrasco; P. Ottiger; S. Leutwyler. 2012. Vibronic coupling and quenching of excitonic energy splittings in H-bonded molecular dimers. ABSTRACTS OF PAPERS OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 244-30-Phys.

C.3. Proyectos o líneas de investigación

- 1 Proyecto.** "DINAMICA DE REACCION CUANTICA Y SEMICLASICA (PID2021-122549NB-C21). Ministerio de Ciencia e Innovación. Investigación. Octavio Roncero Villa. (Consejo Superior de Investigaciones Científicas). 01/09/2022-31/08/2025. 96.800 €.
- 2 Proyecto.** Colisional excitation of hydrides in the interstella medium (PIC2017FR7). francois Lique. (CNRS / CSIC). 01/01/2018-31/12/2020.
- 3 Proyecto.** Colisiones y Fotodisociación de interés astrofísico en fase gas y en hielos y dinámica en superficies (FIS2017-83473-C2-1-P). Ministerio de Economía, Industria y Competitividad. (Universidad Autónoma de Madrid). 01/01/2018-31/12/2020. 48.400 €.
- 4 Proyecto.** Intersystem Crossing in systems lacking metal cofactors -. (Universidad de Salamanca). 01/01/2018-2020.

- 5 Proyecto.** Moléculas frías como plataforma para la computación cuántica y el desarrollo de nuevos materiales. Fundación Memoria de D. Samuel Solórzano Barruso. Susana Gómez Carrasco. (Universidad de Salamanca). 01/01/2019-31/12/2019. 401 €.
- 6 Proyecto.** Procesos dinámicos y estocásticos en astrofísica molecular y en la interacción gas superficie (FIS2014-52172-C2-2-P). Ministerio de economía y competitividad. Alfredo Aguado Gómez. (Universidad Autónoma de Madrid). 01/01/2015-31/12/2018. 36.300 €.
- 7 Proyecto.** Estructura, Espectroscopía y Dinámica de Moléculas y Agregados Moleculares en Fase Gas, InterFase Gas/Materia Condensada y Sistemas Abiertos (FIS2011-29596-C02-02). Ministerio de Economía y Competitividad. Alfredo Aguado Gómez. (Universidad Autónoma de Madrid). 01/01/2012-31/12/2015. 20.570 €.
- 8 Proyecto.** Astrofísica Molecular: la Era de Herschel y Alma (CDS2009-00038). Ministerio de Ciencia e Innovación. Investigación. José Cernicharo Quintanilla. (Consejo Superior de Investigaciones Científicas). 01/01/2014-31/12/2014. 84.424,43 €.
- 9 Proyecto.** Estructura, Espectroscopía y Dinámica de Moléculas y Agregados Moleculares en Fase Gas e Interfaces Gas/ Materia Condensada (FIS2010-18132). MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA. Gerardo Delgado Barrio. (Consejo Superior de Investigaciones Científicas). 01/01/2011-31/12/2014. 72.600 €.
- 10 Proyecto.** Estudio de reacciones elementales: superficies de energía potencial, dinámica adiabática y no adiabática (SA244B12-1). Junta de Castilla y León. María Dolores González Sánchez. (Universidad de Salamanca). 08/08/2012-31/12/2013. 12.760 €.
- 11 Proyecto.** Propiedades mecánicas, eléctricas y catalíticas de nanoobjetos: síntesis, caracterización y modelización (S-0505/MAT/0303). Miguel Paniagua Caparrós. (Universidad Autónoma de Madrid). 01/01/2006-31/12/2009. 83.250 €.
- 12 Proyecto.** Dinámica cuántica de sistemas moleculares complejos (2005FR0031). Consejo Superior de Investigaciones Científicas. Bruno Lepetit. (Consejo Superior de Investigaciones Científicas). 01/01/2006-31/12/2007. 2.400 €.
- 13 Proyecto.** Dinámica cuántica de reacciones (CTQ2004-02415). MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA. Octavio Roncero Villa. (Consejo Superior de Investigaciones Científicas). 13/12/2004-13/12/2007. 65.550 €.
- 14 Proyecto.** Estructura electrónica, dinámica y cinética de reacciones triatómicas no adiabáticas y poliatómicas (BQU2002-04462-C02-01). Dirección General de Investigaciones Científicas. Jose María Alvariño Herrero. (Universidad de Salamanca). 20/09/2002-31/03/2005. 72.300 €.
- 15 Proyecto.** AYUDA DE LA FUNDACIÓN D. SAMUEL SOLÓRZANO BARRUSO FS/15-2018. SUSANA GOMEZ CARRASCO. Desde 01/01/2018.
- 16 Proyecto.** Estudio Teórico de Reacciones Elementales en Química Atmosférica y Combustión (PB-0281-C02-01). Dirección General de Investigaciones Científicas. (Universidad de Salamanca). Desde 01/01/2000. 21.035,42 €.