

Fecha del CVA

21/05/2020

## Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre y Apellidos	Susana Gómez Carrasco		
DNI/NIE/Pasaporte		Edad	
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	E-7295-2012	
	Scopus Author ID	8878814300	
	Código ORCID	0000-0002-6089-5147	

### A.1. Situación profesional actual

Organismo	Universidad de Salamanca		
Dpto. / Centro	Química Física / Facultad de Farmacia		
Dirección			
Teléfono		Correo electrónico	
Categoría profesional	Profesor Contratado Doctor	Fecha inicio	2018
Espec. cód. UNESCO	230700 - Química física		
Palabras clave	Superficies de energía potencial; Dinámica cuántica		

### A.2. Formación académica (título, institución, fecha)

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Doctor en Ciencias Químicas	Universidad de Salamanca	2005
Programa Oficial de Doctorado en Química Teórica y Computacional	Universidad de Salamanca	2005
Diploma de Estudios Avanzados (DEA)	Universidad de Salamanca	2001
Grado de Salamanca	Universidad de Salamanca	2001
Licenciado en Ciencias Químicas	Universidad de Salamanca	1999

### A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica

## Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

### Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (ordenados por tipología)

#### C.1. Publicaciones

- Artículo científico.** Roland Wester; et al. 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; et al. 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; et al. 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; et al. 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).
- Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; et al. 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.
- Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; et al. 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.

- 7 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; et al. 2012. Dynamically biased statistical model for the ortho/para conversion in the  $H_2+H_3^+ \rightarrow H_3^+ + H_2$  JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. AMERICAN INSTITUTE PHYSICS. 137, pp.094303(1)-094303(12).
- 8 **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.
- 9 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; et al. 2012. Wave packet calculations on nonadiabatic effects for the  $O(3P) + HF(1\Sigma)$  reaction under hyperthermal conditions. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 137, pp.114309(1)-114309(9).
- 10 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; H. Köppel. (2/1). 2011. Theoretical treatment of five strongly coupled electronic states of formaldehyde FARADAY DISCUSSIONS : GENERAL DISCUSSIONS. 150, pp.156-158.
- 11 **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.
- 12 **Artículo científico.** A. Zanchet; et al. 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.
- 13 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; et al. 2009. Differential cross sections and product rotational polarization in the A+BC reactions using wave packet methods:  $H^+ + D_2$  and  $Li + HF$  examples. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. AMER CHEMICAL SOC. 113, pp.14488-14501.
- 14 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; H. Köppel. 2008. Ab initio study of the Renner-Teller effect in the  $X^2\Pi$  electronic state of the  $OH^-$  anion CHEMICAL PHYSICS. ELSEVIER SCIENCE BV. 346, pp.81-88.
- 15 **Artículo científico.** E. García; et al. 2008. Modeling the global potential energy surface of the  $N+N_2$  reaction from ab initio data PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. ROYAL SOC CHEMISTRY. 10, pp.2552-2558.
- 16 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; M. L. Hernández; J. M. Alvarino. 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.
- 17 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; et al. 2007. Transition state spectroscopy of open shell systems: angle-resolved photodetachment spectra for the adiabatic singlet states of  $OH^-$  JOURNAL OF PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY A-CHEMISTRY. ELSEVIER SCIENCE SA. 190, pp.145-160.
- 18 **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).
- 19 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; et al. 2006. Coupled diabatic potential energy surfaces for studying the nonadiabatic dynamics at conical intersections in angular resolved photodetachment simulations of  $OH^- \rightarrow OH^- + e^-$  JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. AMERICAN INSTITUTE PHYSICS. 125, pp.164321(1)-164321(16).
- 20 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; et al. 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).
- 21 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; et al. 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.
- 22 **Artículo científico.** S. Gómez-Carrasco; et al. 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.
- 23 **Artículo científico.** L. González-Sánchez; et al. 2004. Photodetachment spectrum of  $OH^-$ : three-dimensional study of the heavy-light-heavy resonances JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. AMERICAN INSTITUTE PHYSICS. 121-1, pp.309-320.

- 24 Artículo científico.** L. González-Sánchez; et al. 2004. Quantum stereodynamics of the F+OH reactive collision on the 1 3A" state MOLECULAR PHYSICS. TAYLOR & FRANCIS LTD. 102, pp.2381-2392.
- 25 Artículo científico.** L. González-Sánchez; et al. 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.
- 26 Capítulo de libro.** 2019. Radiative Processes in Astrophysical Molecules GAS-PHASE CHEMISTRY IN SPACE: FROM ELEMENTARY PARTICLES TO COMPLEX ORGANIC MOLECULES.
- 27 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.
- 28 Capítulo de libro.** O. Roncero; et al. 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.
- 29 Abstract de congreso.** H. Köppel; et al. 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.2. Proyectos

- 1 Colisional excitation of hydrides in the interstella medium (PIC2017FR7) francois Lique. (CNRS / CSIC). 01/01/2018-31/12/2020.
- 2 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 €.
- 3 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 €.
- 4 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 €.
- 5 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 €.
- 6 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 €.
- 7 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 €.
- 8 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 €.
- 9 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 €.
- 10 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 €.
- 11 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 €.

- 12** 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 €.
- 13** 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 €.

### **C.3. Contratos**

### **C.4. Patentes**