



UNIVERSIDAD COMPLUTENSE
MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

	Nombre y apellidos	JESUS FERNANDEZ CASTILLO		
	Categoría académica	PROFESOR TITULAR		
	Facultad	QUIMICAS		
	Departamento	QUIMICA FISICA		
	Despacho	QA-241		
	Teléfono	91 394 43 05		
	Correo electrónico	JFERNAND@UCM.ES		
	Núm. identificación del investigador	Researcher ID	F-2345-2010	
Código ORCID		https://orcid.org/0000-0003-0598-267		
Formación académica	Indicar las reseñas separadas de cada título relevante obtenido, comenzando por el más reciente. Añadir a la tabla las filas necesarias.			
	Fecha	Títulos / Universidad		
	1989	LICENCIADO EN QUIMICA/UNIVERSIDAD AUTONOMA DE MADRID		
1993	DOCTOR EN QUIMICA/UNIVERSIDAD AUTONOMA DE MADRID			
Experiencia laboral	Indicar las reseñas separadas de cada puesto relevante, comenzando por el más reciente. Indicar también, en caso que lo hubiera, cualquier experiencia laboral externa a la Universidad. Añadir a la tabla las filas necesarias.			
	Puesto	Organismo/Facultad	Tarea	Fecha
	PROFESOR T	UCM/QUIMICAS	PROFESOR	2009
	PROFESOR C	UCM/QUIMICAS	PROFESOR	2007
	INV. RAMON Y CAJAL	UCM/QUIMICAS	INVESTIGADOR	2001
	PROFESOR A	UPO/CIENCIAS	PROFESOR	2000
	PROFESOR A	UAM/CIENCIAS	PROFESOR	1999
	INV. CONTRA	UCM/QUIMICAS	INVESTIGADOR	1998
	INV. CONTRA	OXFORD/PHYSICAL CHEM	INVESTIGADOR	1996
	INV. CONTRA	NOTTINGHAM/PHYSICAL CHEM.	INVESTIGADOR	1994
BECARIO	UAM/CIENCIAS	DOCTORANDO	1990	
Docencia	1. Número de quinquenios docentes : 3 Quinquenios: 1998-2003, 2004-2009, 2010-2015			
	2. Resultados de la evaluación docente (Docencia) Programa Docencia (voluntario) Evaluación favorable en las siguientes asignaturas: Química GENERAL (cursos 2009-11 y 2010-11). Programa Docencia-UCM (obligatorio) Evaluación favorable correspondiente a los cursos 2015-16, 2016-17 , 2017-18 y 2020-21			



UNIVERSIDAD COMPLUTENSE
MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

3. Asignaturas impartidas en las diferentes titulaciones indicando nombre de asignatura, curso, tipo de actividad: teoría (T), seminarios (S), Prácticas (P), coordinador (C), etc. (Solo a partir de 2009, implantación de los Grados) (G: Grado, M: Máster, D: Doctorado).

Asignatura	Titulación: G/M/D	Actividad	Curso/s
QUIMICA GENERAL	GRADO	T/S	2009-10, 2010-11, 2017-18
QUIMICA FISICA I	GRADO	P	2010-11, 2011-12, 2012-13, 2013-14, 2014-15, 2015-16, 2016-17, 2017-18, 2018-19 2019-20 2020-21
QUIMICA FISICA II	GRADO	P	2011-12, 2012-13, 2013-14, 2014-15, 2015/16, 2017-18
QUIMICA	GRADO FISICA	T	2011-12, 2012-13, 2013-14, 2014-15, 2015-16, 2016-17, 2017-18, 2018-19 2019-20 2020-21
QUIMICA II	GRADO ING. MAT	P	2013-14, 2014-15, 2015-16, 2016-17, 2017-18, 2018-19 2019-20 2020-21

4. Número de actividades docentes dirigidas/tutorizadas (TFM; TFG; Prácticas externas, prácticum, etc.)



UNIVERSIDAD COMPLUTENSE
MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

	<p>TFM/DEAs: TFG/Tesis Licenciatura: Prácticas Externas: 5 Prácticum: Otros:</p> <p>5. Otros méritos relacionados con la actividad docente:</p> <p>5.1. Proyectos de innovación docente</p> <table border="1"><thead><tr><th>Fecha</th><th>Títulos/ Organismo</th></tr></thead><tbody><tr><td>2011</td><td>GRADO QUIMICAS/UCM</td></tr><tr><td>2020</td><td>GRADO QUIMICAS/UCM PROY. 192</td></tr></tbody></table> <p>5.2. Participación en actividades de divulgación/difusión</p> <table border="1"><thead><tr><th>Fecha</th><th>Actividad / Organismo</th></tr></thead><tbody><tr><td>2015</td><td>PROF. EN CURSO DE ESPECTROCOPIA / CIEMAT</td></tr><tr><td></td><td></td></tr></tbody></table> <p>5.3. Participación en comisiones que tengan implicación en los títulos que imparte.</p> <table border="1"><thead><tr><th>Fecha</th><th>Comisión / Organismo</th></tr></thead><tbody><tr><td>2014-15</td><td>EVALUADOR DE TFG/UCM</td></tr><tr><td>2018-19</td><td>EVALUADOR DE PRAC. EXT. /UCM</td></tr></tbody></table> <p>5.4. Otros</p> <table border="1"><thead><tr><th>Fecha</th><th>Mérito</th></tr></thead><tbody><tr><td>1992-94</td><td>MASTER EN SISTEMAS INFORMATICOS UNIV. PONTIFICIA DE SALAMANCA EN MADRID</td></tr></tbody></table> <p>6. Cursos de formación docente</p> <table border="1"><thead><tr><th>Fecha</th><th>Título / Organismo</th></tr></thead><tbody><tr><td></td><td></td></tr><tr><td></td><td></td></tr></tbody></table> <p>7. Elaboración de material docente</p> <table border="1"><thead><tr><th>Material</th><th>Referencia</th><th>Año</th></tr></thead><tbody><tr><td>TEORIA Y PROBLEMAS Q. GENERAL</td><td></td><td>2009-2011</td></tr><tr><td>TEORIA Y PROBLEMAS QUIMICA (GRADO FISICOS)</td><td></td><td>2010-2021</td></tr><tr><td></td><td></td><td></td></tr></tbody></table>	Fecha	Títulos/ Organismo	2011	GRADO QUIMICAS/UCM	2020	GRADO QUIMICAS/UCM PROY. 192	Fecha	Actividad / Organismo	2015	PROF. EN CURSO DE ESPECTROCOPIA / CIEMAT			Fecha	Comisión / Organismo	2014-15	EVALUADOR DE TFG/UCM	2018-19	EVALUADOR DE PRAC. EXT. /UCM	Fecha	Mérito	1992-94	MASTER EN SISTEMAS INFORMATICOS UNIV. PONTIFICIA DE SALAMANCA EN MADRID	Fecha	Título / Organismo					Material	Referencia	Año	TEORIA Y PROBLEMAS Q. GENERAL		2009-2011	TEORIA Y PROBLEMAS QUIMICA (GRADO FISICOS)		2010-2021			
Fecha	Títulos/ Organismo																																								
2011	GRADO QUIMICAS/UCM																																								
2020	GRADO QUIMICAS/UCM PROY. 192																																								
Fecha	Actividad / Organismo																																								
2015	PROF. EN CURSO DE ESPECTROCOPIA / CIEMAT																																								
Fecha	Comisión / Organismo																																								
2014-15	EVALUADOR DE TFG/UCM																																								
2018-19	EVALUADOR DE PRAC. EXT. /UCM																																								
Fecha	Mérito																																								
1992-94	MASTER EN SISTEMAS INFORMATICOS UNIV. PONTIFICIA DE SALAMANCA EN MADRID																																								
Fecha	Título / Organismo																																								
Material	Referencia	Año																																							
TEORIA Y PROBLEMAS Q. GENERAL		2009-2011																																							
TEORIA Y PROBLEMAS QUIMICA (GRADO FISICOS)		2010-2021																																							
Gestión	<p>1. Desempeño de cargos de responsabilidad en gestión universitaria: Decano, Miembro de Junta, Miembro de comisiones, Director de departamento...</p> <table border="1"><thead><tr><th>Cargo</th><th>Organismo/Facultad</th><th>Duración</th></tr></thead><tbody><tr><td>MIEMBRO DE JUNTA FAC.</td><td>UCM/QUIMICAS</td><td>1 AÑO</td></tr></tbody></table>	Cargo	Organismo/Facultad	Duración	MIEMBRO DE JUNTA FAC.	UCM/QUIMICAS	1 AÑO																																		
Cargo	Organismo/Facultad	Duración																																							
MIEMBRO DE JUNTA FAC.	UCM/QUIMICAS	1 AÑO																																							



UNIVERSIDAD COMPLUTENSE
MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

	2. Otros puestos de gestión (pertenencia a Agencias de evaluación, organismos...)		
	Cargo	Organismo/Facultad	Duración
Investigación	<p>1. Número de sexenios (indicando la fecha del último concedido) 4 SEXENIOS DE INVESTIGACION. ULTIMO CONCEDIDO: 2018</p> <p>2. Líneas de investigación ESTUDIO TEORICO DE REACCIONES QUIMICAS.</p> <p>3. Equipos de investigación</p> <p>4. Publicaciones destacadas (incluya la reseña completa de las 5-10 publicaciones más relevantes).</p> <p>1. J F Castillo, D E Manolopoulos, K. Stark, H-J Werner 1996 Quantum mechanical angular distributions for the F+ H2 reaction JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 104, 6531-6546</p> <p>Se ha llevado a cabo el cálculo de distribuciones angulares y secciones eficaces totales estado a estado para la reacción $F + H_2 (v=0, j=0-3) \rightarrow HF(v', j') + H$. Este estudio fue realizado usando la metodología de canales acoplados en coordenadas hiperesféricas y empleando una nueva superficie de potencial ab initio calculada por Stark y Werner. El objetivo de estos cálculos fue calibrar la fiabilidad de los cálculos de trayectorias quasiclásicas realizados sobre la misma superficie e investigar la importancia de efectos mecanocuánticos en esta reacción. Así mismo se han comparado las distribuciones angulares teóricas en el centro de masas con las obtenidas experimentalmente por Lee et al en 1985 (premio Nobel de Química en 1986). En general el acuerdo con los resultados experimentales es muy satisfactorio. Los cálculos confirmaron que el principal producto de reacción es $HF(v'=2)$ y la peculiar distribución angular de los productos en el estado $HF(v'=3)$. Nº Citas: 224</p> <p>2. D. Skouteris, J. F. Castillo, D. E. Manolopoulos 2000 ABC: a quantum reactive scattering program COMPUTER PHYSICS COMMUNICATIONS 133,128-135</p> <p>Esta aportación presentó y puso a disposición de la comunidad científica internacional un programa que permite resolver la ecuación de Schrödinger que describe la dinámica reactiva de una reacción elemental $A + BC(v, j) \rightarrow AB(v', j') + C$ y/o $(AC(v', j') + B)$. El programa ABC resuelve exactamente las ecuaciones diferenciales acopladas (close-coupling) que se originan al representar las funciones de onda de los núcleos en un desarrollo en ondasparciales y en coordenadas hiperesféricas Nº Citas: 343</p> <p>3. Aoiz FJ, Banares L, Castillo JF, Brouard M, Denzer W, Vallance C, Honvault P, Launay JM, Dobbyn AJ, Knowles PJ 2001 Insertion and abstraction pathways in the reaction O(D-1(2))+H-2 -> OH+H PHYSICAL REVIEW LETTERS 86,1729-1732</p> <p>La reacción $O(1D)+H_2$ y sus variantes isotópicas han recibido una atención muy especial. Existen al menos tres superficies de energía potencial ab initio de muy alta calidad, no sólo del estado fundamental (1 1A') sino también de los dos primeros estados excitados (1 1A'' y 2 1A') relevantes en la dinámica de la reacción. Un punto crucial de cualquier estudio de esta reacción es el</p>		



UNIVERSIDAD COMPLUTENSE
MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

dedilucidar el grado de participación de las diferentes superficies excitadas en la dinámica global de la reacción. De otra parte, los estudios experimentales de diversos grupos (M. Brouard en Oxford, P. Casavecchia en Perugia y K. Liu y X. Yang en Taiwan) van dirigidos en esta dirección y sus resultados no son enteramente compatibles. Hasta el momento en nuestro grupo de investigación se han realizado cálculos QCT adiabáticos (superficies $1\ 1A'$ y $1\ 1A''$) y cálculos QM exactos en la superficie $11A''$ para las reacciones $O(1D)+H_2$, y $O(1D)+HD$. Los cálculos QCT no adiabáticos (surface hopping) se han realizado para lavariantes isotópicas $O(1D)+HD$ y $O(1D)+D_2$. En todos los casos el objetivo ha sido la simulación de los experimentos de haces moleculares de los grupos de Perugia, Oxford (M. Brouard y colaboradores) y Taiwan disponibles con el fin de comprobar la calidad de las PES y el grado de participación de las distintas superficies.

Nº Citas: 84

4. M. P. DE MIRANDA, D. C. CLARY, J. F. CASTILLO, D. E. MANOLOPOULOS
1998
USING QUANTUM ROTATIONAL POLARIZATION MOMENTS TO DESCRIBE THE STEREODYNAMICS OF THE $H + D_2 \rightarrow HD + H$ REACTION
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS
108, 3142-3153

La reactividad química no sólo depende de los estados internos de los reactivos y productos y de la energía de colisión (propiedades escalares) sino de su orientación relativa y direcciones de movimiento (propiedades vectoriales). Es por tanto necesario conocer como depende la dinámica química de las direcciones en el espacio (lo que se conoce como estereoquímica dinámica de la colisión reactiva) para comprender completamente una reacción química elemental. La estereodinámica de una reacción bimolecular es descrita por un conjunto de cuatro vectores $\{k, j, j', k'\}$, siendo k es el momento relativo de los reactivos y j el momento angular de la molécula BC y análogamente k' es el momento relativo de los productos y j' el momento angular de AB. Nº Citas: 73

5. Castillo JF, Aoiz FJ, Banares L, Martínez-Núñez E, Fernández-Ramos A, Vázquez S
2005
Quasiclassical trajectory study of the $F+CH_4$ reaction dynamics on a dual-level interpolated potential energy surface
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS
109, 8459-8470

Las reacciones del tipo $Cl + CH_4 \rightarrow HCl + CH_3$ y $F + CH_4 \rightarrow HF + CH_3$ están siendo objeto de detallados estudios experimentales recientemente. Para estas reacciones no existen cálculos teóricos que consideren todos los grados de libertad y las SEP disponibles son en general poco fiables. Por ello se ha procedido a la construcción de las correspondientes SEP utilizando el método de interpolación ya empleado con éxito para las reacciones $H+H_2O$ y $H+N_2O$. Para ello han sido necesarios cálculos intensivos de Química cuántica (Gaussian). Cálculos de trayectorias cuasi-clásicas han sido llevado a cabo con el objetivo de elucidar el mecanismo de ambas reacciones. Para la reacción $Cl + CH_4$ se ha empleado el método QCISD/aug-cc-pVDZ para construir la SEP. Los cálculos QCT sobre esta SEP reproducen en buena medida las distribuciones vibracionales y rotacionales

5. Tesis doctorales dirigidas o codirigidas (incluya la reseña completa)

6. Participación en proyectos de I+D+i (incluya la reseña completa de los más recientes).

Nombre del proyecto: DINAMICA DE PROCESOS MOLECULARES MEDIANTE EXPERIMENTOS CON LASER Y METODOS TEORICOS
Modalidad de proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional
Ámbito geográfico: Nacional
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): FRANCISCO JAVIER AOIZ MOLERES
Nº de investigadores/as: 8
Entidad/es financiadora/s: MINISTERIO DE ECONOMÍA Y HACIENDA
Fecha de inicio-fin: 01/01/2014 - 31/12/2016 Duración: 3 años
Cuantía total: 217.000

Nombre del proyecto: Molecular Astrophysics: The Herschel and Alma era. CDS2009-00038
Modalidad de proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional



UNIVERSIDAD COMPLUTENSE
MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

	<p>Ámbito geográfico: Nacional Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): FRANCISCO JAVIER AOIZ MOLERES Nº de investigadores/as: 9 Entidad/es financiadora/s: MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACIÓN Fecha de inicio-fin: 01/01/2010 - 31/12/2014 Duración: 5 años Cuantía total: 4.000.000 Nombre del proyecto: DINÁMICA DE PROCESOS QUÍMICOS: EXPERIMENTOS FOTOINICIADOS CON LÁSERES DE NANOSEGUNDO Y FEMTOSEGUNDO Y MÉTODOS TEÓRICOS. Modalidad de proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional Ámbito geográfico: Nacional Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): FRANCISCO JAVIER AOIZ MOLERES Nº de investigadores/as: 18 Entidad/es financiadora/s: MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACIÓN Fecha de inicio-fin: 01/01/2009 - 31/12/2013 Duración: 5 años Cuantía total: 453.000</p> <p>Nombre del proyecto: PREPARACION, CARACTERIZACION Y POSIBLES APLICACIONES DE NUEVOS SÓLIDOS POROSOS INORGÁNICOS OBTENIDOS A PARTIR DE ÓPALOS POLIMÉRICOS Y DE NUEVOS MATERIALES NANOCOMPUESTOS POLÍMERO-INORGÁNICOS. PR34/07-15895 Modalidad de proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional Entidad de realización: FUNDACION NEUROCIENCIA Y ENVEJECIMIENTO Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): JOSEFA ISASI MARIN Nº de investigadores/as: 6 Entidad/es financiadora/s: Universidad Complutense de Madrid Tipo de entidad: Universidad Fecha de inicio-fin: 01/01/2008 - 31/12/2009 Duración: 2 años Cuantía total: 10.000</p> <p>Nombre del proyecto: ESTUDIO DE LA DINAMICA MOLECULAR DE PROCESOS QUIMICOS MEDIANTE TECNICAS LASER DE NANOSEGUNDO Y FEMTOSEGUNDO Y METODOS TEORICOS Modalidad de proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): LUIS BAÑARES MORCILLO Nº de investigadores/as: 10 Entidad/es financiadora/s: MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACIÓN Fecha de inicio-fin: 31/12/2005 - 30/12/2008 Duración: 3 años Cuantía total: 160.000</p> <p>7. Participación en contratos de I+D+i (incluya la reseña completa de los más recientes). 8. Patentes</p>
Otros	<p>Censor de revistas : Chemical Physics Letters, Journal of Physical Chemistry A y PCCP, Astrophysical Journal. desde el 2001 IMPACTO DE MIS PUBLICACIONES: CITAS TOTALES: 2800 PUBLICACIONES EN Q1: 70 PROMEDIO CITAS AÑO (2013-2021): 18 INDICE H: 28</p>