

CURRICULUM VITAE ABREVIADO (CVA)

A. INFORMACIÓN PERSONAL

Nombre	ARISTEA		
Apellido	PROSMITI		
		http://fama.iff.csic.es/personas/rita/Publications-RP.html	
Indicadores de la investigación científica:	Nº Trienios: 8	Nº Quinquenios: 6	Nº Sexenios: 4

A.1. Situación profesional actual

Categoría profesional	<i>Científica Titular-Investigadora Científica</i>		
Institución	AGENCIA ESTATAL CSIC		
Departamento	<u>Procesos Atómicos, Moleculares y en Superficies (PAMS)</u>	<u>Instituto de Física Fundamental (IFF-CSIC)</u>	
País	España		
Palabras clave	Simulaciones computacionales, agregados moleculares, interacciones intermoleculares, cálculos desde primeros principios, espectroscopía computacional, técnicas de aprendizaje automático, modelos basados en datos		

A.2. Experiencia profesional previa (actividad investigadora y interrupciones en meses)

Periodo	Categoría/Institución/País/Permiso
1990-1995 (60)	EMY Post-graduate Fellow (IKY, GR)
1990-1995 (59)	Doctorate Researcher (IESL-FORTH, GR)
1994-1995(6)	PhD stay at UAM (Madrid, SP)
1996-1998 (26)	TMR Researcher/Dpt Physics-Astronomy/UCL(London, UK)
1997(1)	Research stay at CINECA (Bologna, IT)
1998(1)	Research stay at EPCC (Edinburgh, UK)
1998-1999 (14)	TMR Researcher/Dpt Chemistry/UofC(Crete, GR)
2000-2006 (67)	Research contracts/IMAFF-CSIC(Madrid, SP)
2004 (4)	Permiso de maternidad
2005(3)	Research stay at NSCR "Demokritos" (Athens, GR)
2006-2008 (20)	RyC Researcher/IFF-CSIC(Madrid, SP)
2008-2025(200)	<i>Científica Titular</i> /IFF-CSIC (Madrid, SP)
2017-2022(60)	Head of FAMA/PAMS Department/IFF-CSIC
2019(6)	Research stay at University of Southampton(UK)
2022-present	Leader of the <i>MolClu</i> research group/PAMS-IFF-CSIC
2025(6)	Research stay at Université Paris-Saclay(Orsay, FR)
2025- present	<i>Investigadora Científica</i> /IFF-CSIC (Madrid, SP)

A.3. Educación académica

PhD, Licenciado, Graduado	Universidad	
Grado en Física	Ciencias Físicas, University of Crete, GR	1987
MSc en Físico-Química Computacional	Ciencias Químicas, University of Crete, GR	1992
PhD en Ciencias Químicas	Ciencias Químicas, University of Crete, GR	1996

B. Resumen de trayectoria profesional

La Dra. Prosmi cuenta con más de 25 años de experiencia en investigación, desarrollo e innovación en el área de las Ciencias Físicas (física molecular, química cuántica y métodos computacionales y de modelización). Obtuvo su doctorado en 1996 en la Universidad de Creta (UofC, Grecia) y completó en 1998 una estancia postdoctoral financiada por el programa Marie-Curie TMR en University College London (UCL, Reino Unido). Durante este periodo, y posteriormente en su reincorporación al Departamento de Química de la UofC, desarrolló tanto técnicas teóricas como códigos numéricos para el análisis de espectros vibracionales y el estudio de la dinámica de moléculas y complejos altamente excitados. Aplicó mecánica clásica, semiclásica y cuántica para establecer conexiones entre la espectroscopía rovibracional y la dinámica no lineal (ver [[10.1063/1.470264](#)]), utilizando superficies de energía potencial (PES) globales y de alta precisión basadas en datos espectroscópicos y/o *ab initio* (ver [[10.1080/00268970009483290](#)]). Estos cálculos requirieron el uso de hardware y software de última generación, incluyendo sistemas MPP (Massively Parallel Processing), como se detalla en [[10.1016/S0010-4655\(99\)00513-5](#)] y [[10.1098/rsta.2000.0657](#)].

En el año 2000, se incorporó al Instituto de Matemáticas y Física Fundamental (IMAFF–CSIC, España) mediante un contrato de movilidad TMR. Posteriormente, en 2006, obtuvo una plaza RyC (Ramón y Cajal) en el Departamento de Física Atómica, Molecular y de Agregados (IFF–CSIC), y en 2008 alcanzó una plaza permanente de investigadora científica en el CSIC.

Sus intereses científicos son amplios y en constante evolución, abordando el estudio estructural, espectroscópico, dinámico y de transporte de sistemas moleculares desde la fase gaseosa hasta medios condensados. A lo largo de su carrera ha realizado simulaciones computacionales, desarrollado métodos e implementado algoritmos para tratar agregados iónicos de hidrógeno (ver [[10.1021/jp200392w](#)]), agregados de van der Waals (ver [[10.1063/1.2737782](#)]), nanogotas de helio dopadas (ver [[10.1021/jp502994g](#)], [[10.1140/epjd/s10053-023-00691-9](#)]), y moléculas encapsuladas en hidratos/clatratos (ver [[10.1002/chem.201800497](#)]) y fullerenos (ver [[10.1002/cphc.202200034](#)]). Sus estudios abarcan procesos de formación, espectroscopía, predisiociación, fotofragmentación, así como simulaciones de dinámica molecular en agua líquida pura (ver [[10.1021/jp211952y](#)]) y, más recientemente, en soluciones acuosas (ver [[10.1021/acs.jpch.5b09562](#)]). Ha trabajado con especial interés en las interacciones débiles y el desarrollo de modelos de potencial basados en aprendizaje automático (*machine learning*) para el cálculo de efectos de solvatación/hidratación y propiedades macroscópicas (ver [[10.3390/molecules27051654](#)] y [[10.1039/D2CP01396G](#)]).

La actividad investigadora de la Dra. Prosmi ha sido financiada por instituciones como la Unión Europea, el Ministerio de Educación de Grecia, el EPSRC (Reino Unido), la Comunidad de Madrid (CM) y el Ministerio de Ciencia e Innovación de España. Ha participado en más de 37 proyectos de investigación, actuando como investigadora principal en 15 de ellos, coordinadora en 3 contratos de movilidad, y miembro del comité de gestión en 2 acciones COST, estableciendo colaboraciones científicas fructíferas en Europa, África y América.

También ha sido evaluadora experta de proyectos nacionales e internacionales (ANPCyT, FRA/Future, FWF, ANEP, AEI). Desde 2017 colabora estrechamente con la empresa [Atelgraphics S.L.](#) en el desarrollo de herramientas científicas user-friendly y una base de datos de interés astrofísico, CYGNUS, en el marco de dos contratos predoctorales industriales financiados por la CM, aplicando estándares de ingeniería de software y conocimientos científicos de vanguardia.

Ha dirigido varios contratos postdoctorales y supervisado 8 tesis doctorales (dos de ellas con mención industrial y otras dos galardonadas con Premio Extraordinario de Doctorado en

UAM y en CSIC), así como 10 trabajos de máster/TFM y numerosos proyectos de grado y de iniciación a la investigación (JAE-intro, TFG, etc.). Fue directora del Departamento de Física Atómica, Molecular y Agregados (PAMS) y miembro de la junta del IFF entre 2017 y 2022, y desde 2022 lidera el grupo científico MolClu en el IFF-CSIC.

La Dra. Prosmi ha publicado más de 160 artículos científicos (con más de 2900 citas; índice h = 32, i10 = 84), y ha trabajado como revisora para revistas como JCP, JPC, JPCL, JCTC, JCC, PCCP, CPC, entre otras; además de actuar como editora invitada (EPJD, CPC) y miembro del comité editorial (Frontiers, Molecules). Ha participado en más de 100 congresos internacionales, con más de 50 conferencias invitadas, formando parte del comité organizador en 15 de ellos y del comité científico internacional en 7 ocasiones.

C. MERITOS RELEVANTES

C.1. Publicaciones (*seleccionados durante los últimos 10 años*)

1. Autores: R. YANES-RODRÍGUEZ, P. VILLARREAL, R. PROSMITI

Título: Microsolvation of cationic alkali dimers in helium: quantum delocalization and solidlike/ liquidlike behaviors of He shells. **Revista:** *Phys. Chem. Chem. Phys.* 27, 8259-8263 (2025).

[DOI:10.1039/D5CP00318K](https://doi.org/10.1039/D5CP00318K)

2. Autores: R. PROSMITI, T. GONZÁLEZ-LEZANA

Título: Computational modeling: up-to-date approaches and cutting-edge applications from clusters, nanostructures to bulk systems. **Revista:** *ChemPhysChem* 25, e2024002(2024)

[DOI:10.1002/cphc.202400207](https://doi.org/10.1002/cphc.202400207)

3. Autores: A. VALDÉS, A. CABRERA-RAMÍREZ, R. PROSMITI

Título: Confining CO₂ inside sl clathrate-hydrates: the impact of the CO₂ -water interaction on quantized dynamics. **Revista:** *J. Comput. Chem.* 44, 1587-1598 (2023)

[DOI: 10.1002/jcc.27110](https://doi.org/10.1002/jcc.27110)

4. Autores: R. RODRÍGUEZ-SEGUNDO, A. GIJÓN-GIJÓN, R. PROSMITI

Título: Quantum molecular simulations of micro-hydrated halogen anions. **Revista:** *Phys. Chem. Chem. Phys.* 24, 13119-13129(2022) [DOI: 10.1039/D2CP013966](https://doi.org/10.1039/D2CP013966)

5. Autores: A. CABRERA-RAMÍREZ, R. PROSMITI

Título: Modeling of Structure H Carbon Dioxide Clathrate Hydrate: Guest-Lattice, Crystal Structure and Pressure Dependencies. **Revista:** *J. Phys. Chem. C* 126, 14832-14842 (2022)

[DOI:10.1021/acs.jpcc.2c04140](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.2c04140)

6. Authors: CARRILLO-BOHÓRQUEZ, A. VALDÉS, R. PROSMITI

Title: Encapsulation of a water molecule inside C₆₀ fullerene: The impact of confinement on quantum features. **Journal:** *J. Chem. Theory Comput.* 17, 5839-5848 (2021)

[DOI:10.1021/acs.jctc.1c00662](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.1c00662)

7. Autores: M.J. MONTES DE OCA-ESTÉVEZ, R. PROSMITI

Título: Computational characterization of astrophysical species: the case of noble-gas hydride cations. **Revista:** *Front. Chem.* 9, 187 (2021) [DOI: 10.3389/fchem.2021.664693](https://doi.org/10.3389/fchem.2021.664693)

8. Autores: N. ALHARZALI, R. RODRÍGUEZ-SEGUNDO, R. PROSMITI

Título: Modelling interactions of cationic dimers in He droplets: microsolvation trends in He_nK₂⁺ clusters. **Revista:** *Phys. Chem. Chem. Phys.* 23, 7849 (2020)

[DOI: 10.1039/D0CP05406B](https://doi.org/10.1039/D0CP05406B)

9. Autores: R. YANES-RODRÍGUEZ, D.J. ARISMENDI-ARRIETA, R. PROSMITI

Título: He inclusion in ice-like and clathrate-like frameworks: a benchmark quantum chemistry of guest-host interactions. **Revista:** *J. Chem. Inf. Model.* 60, 3043 (2020)

[DOI: 10.1021/acs.jcim.0c00349](https://doi.org/10.1021/acs.jcim.0c00349)

10. Autores: R. PROSMITI, Á. VALDÉS **Título:** The smallest proton-bound dimer H₅⁺ : theoretical progress. **Revista:** *Phil. Trans. R. Soc. A* 377, 20180396 (2019)

[DOI: 10.1098/rsta.2018.0396](https://doi.org/10.1098/rsta.2018.0396)

11. Autores: D.J. ARISMENDI-ARRIETA, M. RIERA, P. BAJAJ, R. PROSMITI, F. PAESANI

Título: The i-TTM model for ab initio-based ion-water interaction-potentials. I. Halide-water potential energy functions. **Revista:** *J. Phys. Chem. B* 120, 1822-1832 (2016)

[DOI: 10.1039/D2CP00701K](https://doi.org/10.1039/D2CP00701K)

C.2. Congresos (seleccionados durante los últimos 10 años)

- 1. Autores:** R. PROSMITI **Título/Participación:** Local Organizing & Scientific Advisory Committee **Congreso:** 2nd Southern European Conference on the Science of Molecules (SECSMol-2025) Madrid (ES) Sep 2025
Web: <http://fama.iff.csic.es/SECSMol2025.html>
- 2. Autores:** R. PROSMITI **Título/Participación:** Quantum Chemistry Approaches to Guest-Host(Lattice) Systems: Inclusion of Gas Atoms/Molecules in Hydrates / Invited talk **Congreso:** MRS Fall meeting - EN07: Clathrates and Clathrate-Like Materials Boston (USA) Dec 2025 **Web:** <https://www.mrs.org/2025-mrs-fall-meeting/Symposium-EN07-Clathrates-and-Clathrate-Like-Materials-->
- 3. Autores:** R. PROSMITI **Título/Participación:** Confining He atoms in diverse ice-phases: Stability and energetics of hydrate crystals / Invited talk & GDB Prize Award committee **Congreso:** IBER-2025 Vigo (Spain) Sep 2025 **Web:** <https://iber2025.uvigo.es/>
- 4. Autores:** R. PROSMITI **Título/Participación:** Quantum chemistry computations on guest-host(lattice) systems: He inclusion in hydrates / *Invited talk & International Advisory Board* **Congreso:** XII International Meeting of Photodynamics Santiago(Chile) Nov 2024 **Web:** <https://www.photodynamics2024.com/>
- 5. Autores:** R. PROSMITI **Título/Participación:** Modeling microsolvation of charged alkali dimers in He-droplets: quantum delocalization and solid/liquid-like He shells / *Invited talk* **Congreso:** HCI-21 Egmond aan Zee (NL) Sep 2024 **Web:** <https://arcnl.nl/hci2024/program-and-book-of-abstracts>
- 6. Autores:** R. PROSMITI **Título/Participación:** Data-driven potential models and quantum simulation on ion hydration / *Invited talk & Managment Committee* **Congreso:** MD-GAS General Meeting Dubrovnik (CR) Sep 2023 **Web:** <https://www2.irb.hr/korisnici/nadja/MDGAS2023/schedule.html>
- 7. Autores:** R. PROSMITI **Título/Participación:** Exploring ion microhydration through quantum simulations: a bottom-up approach from nanoscale clusters to bulk solutions / *Invited talk* **Congreso:** XI International Meeting of Photodynamics La Havana(Cuba) Nov 2022 **Web:** <https://photodynamics.instec.cu/pages/program.php>
- 8. Autores:** R. PROSMITI **Título/Participación:** Quantum simulations of halogen anions hydration: data-driven potential models from aqueous clusters to bulk solutions / *Invited talk & GDB Prize Award committee* **Congreso:** IBER-2022 Malaga (Spain) Sep 2022 **Web:** <http://www.iber2022.com/>
- 9. Autores:** R. PROSMITI **Título/Participación:** Modelling interactions for determining molecular properties of aqueous systems / *Invited talk* **Congreso:** WaterEurope: Multiscale simulations and coarse-grained models for water and aqueous systems CECAM-Laussane (Switzerland) Oct 2019 **Web:** <https://isiac2019.sciencesconf.org/resource/page/id/7.html>
- 10. Autores:** R. PROSMITI **Título/Participación:** Intermolecular interactions and stability of cationic alkali-dimers in He clusters / *Invited talk & International Scientific committee* **Congreso:** ISIAC2019 Paris (France) Jul 2019 **Web:** <https://isiac2019.sciencesconf.org/resource/page/id/7>
- 11. Autores:** R. PROSMITI **Título/Participación:** Quantum computations on H₅⁺ and H₇⁺ ions / *Invited talk* **Congreso:** Advances in hydrogen ions: H₃⁺, H₅⁺ and beyond London (UK) Jan 2019 **Web:** <https://royalsociety.org/science-events-and-lectures/2019/01/advances-in-hydrogen/>
- 12. Autores:** R. PROSMITI **Título/Participación:** Quantum computations of nanoconfined molecules/ *Invited talk & Scientific Committee* **Congreso:** HDQD 2018 Lille (FR) Aug 2018 **Web:** <https://hdqd18.sciencesconf.org/>
- 13. Autores:** R. PROSMITI **Título/Participación:** Modeling the ion-water interactions from first-principle computations / *Invited talk* **Congreso:** ISIAC 2017 Palm Cove (Australia) Jul 2017 **Web:** <http://atom.curtin.edu.au/isiac/scope.html>

C.3. Proyectos de Investigación (seleccionados durante los últimos 5 años)

1. Título: Desafíos actuales en Física Molecular Computacional: modelización automatizada basada en datos.

Financiado: MICIN, PID2024-155666NB-I00 (70.000 €)

Duración: 2025-2028

Investigadores principales: R. Prosmiiti/T.González-Lezana (IFF-CSIC, ES)

2. Título: Física Molecular Computacional: Aplicaciones punteras a agregados, nanoestructuras y sistemas macroscópicos.

Financiado: DGICT-MICIN., PID2020-14654GB-I00 (99.200 €)

Duración: 2021-2025

Investigadores principales: T.González-Lezana/R. Prosmiiti (IFF-CSIC, ES)

3. Título: Molecular Dynamics In the Gas phase (MD-GAS)

Financiado: European Cooperation in the field of Scientific and Technical Research - COST - CMST Action CA18212

Duración: 2019-2024

Investigador principal: H. Zettergren (SE)

MC: R. Prosmiiti (IFF-CSIC, ES)

4. Título: Descifrando la naturaleza de la hidratación/nucleación de iones a través del modelado computacional.

Financiado: MICINN, PRX18/00291 (22.000 €)

Duración: 2019

Investigador principal: R. Prosmiiti (IFF-CSIC, ES)

5. Título: Entrando en la era del "big data" en astroquímica cuántica: Base de datos/"biblioteca" de nuevas moléculas potencialmente detectables en medio interestelar.

Financiado: Comunidad de Madrid, IND2018/TIC-9467 (149.000 €)

Duración: 2019-2022

Investigador principal: R. Prosmiiti (IFF-CSIC, ES)

6. Título: Procesos Moleculares en fase gas, agregados y diferentes nanoestructuras.

Financiado: DGICT-MINECO FIS2017-83157-P (87.500 €)

Duración: 2018-2021

Investigadores principales: T.González-Lezana/R. Prosmiiti (IFF-CSIC, ES)

7. Título: Desarrollo de software científico e investigaciones en sistemas moleculares acuosos de impacto medioambiental y energético.

Financiado: Comunidad de Madrid, IND2017/AMB-7696 (136.500 €)

Duración: 2018-2021

Investigador principal: R. Prosmiiti (IFF-CSIC, ES)

C.4. Contratos, méritos tecnológicos o de transferencia

(seleccionados durante los últimos 5 años)

1. Título: Desafíos computacionales en la caracterización de especies moleculares.

Contratado: M. MORALES-QUIJANO **Financiado:** CSIC, Ref:JAEIntroICU-2024-IFF-08

Duración: 2/2025 – 4/2025

2. Título: Diseño y validación de modelos computacionales basados en datos para hidruros catiónicos de gases nobles

Contratado: M. HERRERO-MOLINA **Financiado:**

CSIC-UAM Programa prácticas externas **Duración:** 2/2025 – 6/2025

3. Título: Aplicación de nuevas herramientas computacionales de ciencias de datos al modelado molecular.

Contratada: M. JUDIT MONTES DE OCA-ESTÉVEZ

Financiado: Comunidad de Madrid, Ref: INV23_ IFF_ M2_ 09 **Duración:** 10/2024 – 10/2025

4. Título: Simulaciones moleculares en agregados y colisiones reactivas

Contratado: B. GARCÍA-RUÍZ

Financiado: CSIC, Ref:JAEIntroICU-2021-IFF-07

Duración: 10/2022 – 12/2022 (co-directed with T. González-Lezana)

5. Título: Designing a database for new molecular species.

Contratada: M. J. MONTES

DE OCA-ESTÉVEZ

Financiado: Atelgraphics S.L.

Duración: 3/2019 – 2/2022

6. Título: Computational approaches in nanoconfined molecular systems.

Contratado: O. CARRILLO-BOHÓRQUEZ

Financiado: Fundación Carolina

Duración: 2/2021 – 7/2021

7. Título: Scientific software development for efficient computer simulations.

Contratado: R. RODRÍGUEZ-SEGUNDO

Financiado: Atelgraphics S.L.

Duración: 4/2018 – 3/2021.

8. Título: Appropriate description of intermolecular interactions in clathrate-like clusters: First-principles computations.

Contratado: I. LEÓN MERINO **Financiado:** CSIC, Ref:

JAEINT17_EX_0020 **Duración:** 9/2019 - 12/2019