



## **Curriculum vitae**

Nombre: ALBERTINA CABAÑAS POVEDA

Fecha 28 Marzo 2017

## Datos personales

<b>Apellidos: Cabañas Poveda</b>		
<b>Nombre: Albertina</b>	<b>Sexo: Mujer</b>	
<b>DNI: -</b>	<b>Fecha de nacimiento : - -</b>	<b>Nº Funcionario :</b>
<b>Dirección particular</b>		
<b>Ciudad:</b>	<b>Código Postal :</b>	<b>Teléfono:</b>
<b>Especialización:</b>	<b>Química Física</b>	

<b>Researcher ID</b>	<b>C-1776-2016</b>
<b>Código Orcid</b>	<b>0000-0001-7922-5752</b>

## Formación Académica

Titulación Superior	Centro	Fecha
Licenciatura en C.C. Químicas Especialidad Química- Física	Universidad Complutense de Madrid	1988-1993
Tesis de Licenciatura Calificación: Sobresaliente	Universidad Complutense de Madrid	Julio –1993

Doctorado	Centro	Fecha
Doctorado en C.C. Químicas. Dept. Química Física I	Universidad Complutense de Madrid	1994-1998
Tesis doctoral Calificación: Cum Laude	Universidad Complutense de Madrid	Dic. 1998
Premio extraordinario de doctorado	Universidad Complutense de Madrid	1998-1999

**Tesis de Licenciatura:** *Predicción del equilibrio líquido-vapor en mezclas alcohol-alcano a partir de datos de entalpía de exceso*, A. Cabañas, Madrid, Julio 1993.

Directores: Baudilio Coto García y Juan Antonio Rodríguez Renuncio.

**Tesis Doctoral:** *Estudio Termodinámico de Mezclas de Óxido Nitroso con hidrocarburos en las regiones Crítica y Supercrítica*, A. Cabañas, Madrid, Diciembre 1998

Directores: Juan Antonio Rodríguez Renuncio y Concepción Pando García-Pumarino

**Situación profesional actual****Organismo:** Universidad Complutense de Madrid**Facultad, Escuela o Instituto:** Facultad de C.C. Químicas**Dept./Secc./Unidad estr.:** Química-Física I**Categoría profesional:** Profesor Titular de Universidad      **Fecha de inicio:** 05-11-2007**Dirección postal**      Departamento Química-Física I  
Facultad de C.C: Químicas  
Ciudad Universitaria S/N  
28040 Madrid**Teléfono** (indicar prefijo, número y extensión):91-3945225/4200

Fax: 91 3944135

**Correo electrónico:** a.cabanas@quim.ucm.es**Actividades anteriores de carácter científico profesional**

Fechas	Puesto	Institución
1991-1993	Becario Colaboración	Dpto. Química-Física I Universidad Complutense de Madrid
1994	Becario Colaboración Biblioteca y Colaborador Honorífico	Dpto. Química-Física I Universidad Complutense de Madrid
1995-1998	Becario Predoctoral UCM	Dpto. Química-Física I Universidad Complutense de Madrid
Enero 1999- Diciembre 2000	Investigador post-doctoral	Universidad de Nottingham, Reino Unido
Enero 2001- Mayo 2003	Investigador post-doctoral	Universidad de Massachusetts, USA
Mayo 2003- 23 Nov. 2003	Ayudante UCM	Dpto. Química-Física I Universidad Complutense de Madrid
24 Nov. 2003- 4 Nov. 2007-	Investigador Ramón y Cajal	Dpto. Química-Física I Universidad Complutense de Madrid
5 Nov. 2007- actualidad	Profesor Titular de Universidad	Dpto. Química-Física I Universidad Complutense de Madrid

**Idiomas de interés científico (R = regular, B = bien, C = correctamente)**

Idioma	Habla	Lee	Escribe
Español	C	C	C
Inglés	C	C	C
Alemán	R	R	R

**Inglés:**

Certificado del Trinity College London. Nivel Avanzado. Grado 10. Calificación: Distinction. Junio 1995

De Enero 1999 a Mayo 2003 trabajando en países de habla inglesa.

**Alemán:**1º y 2º cursos de Alemán por al Escuela Oficial de Idiomas (Jesús Maestro en Madrid).  
Certificado del Instituto Alemán. Nivel: MI. Diciembre 1997.

---

### **Participación en Proyectos de I+D Financiados**

---

Título del proyecto: Preparación de nanomateriales en CO<sub>2</sub> supercrítico y su aplicación en catálisis y farmacología. CTQ2013-41781-P

Entidad financiadora: MICNN

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2014 hasta: Sep. 2017 Financiación recibida 119.790 €

Investigador responsable: **Albertina Cabañas Poveda** y Concepción Pando García-Pumarino

Número de investigadores participantes: 5

---

Título del proyecto: Síntesis de materiales Nanoestructurados y precipitación de micro y nanopartículas utilizando CO<sub>2</sub> supercrítico. CTQ2010-16940

Entidad financiadora: MICNN

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2011 hasta: 2014 Financiación recibida 101.000 €

Investigador responsable: Concepción Pando García-Pumarino

Número de investigadores participantes: 5

---

Título del proyecto: Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación BSCH-UCM GR35/10- Grupo Preparación y actividad de materiales multifuncionales y procesos fisicoquímicos en Química Sostenible - 910632

Entidad financiadora: BSCH-UCM

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2014 hasta: 2015 Financiación recibida: 1867.51€

Investigador responsable: Juan Antonio Rodríguez Renuncio

Número de investigadores participantes: 5

---

Título del proyecto: Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación BSCH-UCM GR35/10- Grupo Preparación y actividad de materiales multifuncionales y procesos fisicoquímicos en Química Sostenible - 910632

Entidad financiadora: BSCH-UCM

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2011 hasta: 2012 Financiación recibida: €

Investigador responsable: Juan Antonio Rodríguez Renuncio

Número de investigadores participantes: 5

---

Título del proyecto: Micronización y síntesis de materiales en CO<sub>2</sub> supercrítico. CTQ2009-09707

Entidad financiadora: MICINN

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2010 hasta: 2010

Investigador responsable: Concepción Pando García-Pumarino

Número de investigadores participantes: 5

---

Título del proyecto: Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación BSCH-UCM GR58/08- Grupo Preparación y actividad de materiales multifuncionales y procesos fisicoquímicos en Química Sostenible - 910632

Entidad financiadora: BSCH-UCM

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2009 hasta: 2010 Financiación recibida: 4860 €

Investigador responsable: Juan Antonio Rodríguez Renuncio

Número de investigadores participantes: 5

---

Título del proyecto: 3ª Reunión de Expertos en Tecnologías con Fluidos Comprimidos (ayudas complementarias organización de congresos)

Entidad financiadora: MEC

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid y CSIC

Duración, desde: 2009 hasta: 2009

Investigador responsable: Lourdes Calvo Garrido

Número de investigadores participantes: 4

---

Título del proyecto: Deposición de metales sobre sustratos en fluidos supercríticos. CCG08-UCM/MAT-4247. *Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación Universidad Complutense-Comunidad de Madrid*

Entidad financiadora: UCM-CAM

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2009 hasta: 2009

Investigador responsable: **Albertina Cabañas Poveda**

Financiación recibida: 24.000 €

Número de investigadores participantes: 3

---

Título del proyecto: Fabricación de materiales cerámicos porosos estructurados en fluidos supercríticos. CTQ2006-07172

Entidad financiadora: MEC

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2006 hasta: 2009

Investigador responsable: **Albertina Cabañas Poveda**

Financiación recibida: 52.000 €

Número de investigadores participantes: 3

---

Título del proyecto: Topological Engineering. A technology for the rational design and organisation of functional 3D templated nanomaterials

Entidad financiadora: Basic Technology Grant (Reino Unido)

Entidades participantes: Universidad Nottingham, University of Southampton, University of Manchester (U.K.) and Universidad Complutense (Spain)

Duración, desde: 2005 hasta: 2009

Investigador responsable: Dr. D.C. Smith

Número de investigadores participantes: 10 (U.K.)

La participación en el proyecto se realiza en calidad de asesor internacional. Fruto de la colaboración, la UCM firmó en Enero 2006 un acuerdo de colaboración con las Universidades de Nottingham, Southampton y Manchester.

---

Título del proyecto: Materiales para la energía.

Entidad financiadora: Comunidad Autónoma de Madrid. *Ayuda a grupos de excelencia de la CAM*

Entidades participantes: Universidad Complutense, CEU, Universidad Carlos III, Instituto de Materiales del CSIC.

Duración, desde: 2006 hasta: 2009

Investigador responsable: Prof. Miguel Alario Franco

Número de investigadores participantes: 35

---

Título del proyecto: Tratamiento de Materiales en Fluidos Supercríticos PR3/04-12375

Entidad financiadora: Universidad Complutense de Madrid

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2004 hasta: 2004

Investigador responsable: **Albertina Cabañas Poveda**

Financiación recibida: 7.200 €

Número de investigadores participantes: 3

---

Título del proyecto: Modificadores para la mejora de procesos de separación y tratamiento de materiales con fluidos supercríticos” PPQ2002-04143

Entidad financiadora: MEC

Entidades participantes:

Duración, desde: 2002 hasta: 2005

Investigador responsable: José Santiago Urieta Navarro y Juan. Antonio Rodríguez Renuncio

Número de investigadores participantes: Proyecto coordinado Universidad Complutense de Madrid y Universidad de Zaragoza

---

Título del proyecto: Red europea TMR Superclean-Chemistry 2- Spectroscopic monitoring of Chemical reactions in Supercritical fluids- The optimization of Clean Processes for Clean Chemistry. Contract No. ERBCHRXCT97-0104

Entidad financiadora: EU

Entidades participantes: Universidad de Nottingham (Inglaterra U.K.), Universidad Nova de Lisboa (Portugal), Instituto de Tecnología Química e Biológica, (Oeiras, Portugal) Max Planck Institut für Polymerforschung (Alemania), Universidad de St. Andrews (Escocia, U.K.), Universidad de Göttingen (Alemania), Scientific Centre fore Technological Lasers of the Russian Academy of Sciences (Rusia), Thomas Swan & Co. Ltd, (U.K.).

Duración: 1997-2001

Investigador responsable: Martyn Poliakoff

---

Título del proyecto: Fisicoquímica de procesos de extracción supercrítica. PB-97-315

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 1998 hasta: 2001

Investigador responsable: Juan Antonio Rodríguez Renuncio

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Fisicoquímica de procesos de extracción supercrítica. PB-94-320

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 1995 hasta: 1997

Investigador responsable: Juan Antonio Rodríguez Renuncio

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Fisicoquímica de procesos de extracción supercrítica. PB-91-0392

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 1992 hasta: 1994

Investigador responsable: Juan Antonio Rodríguez Renuncio

Número de investigadores participantes:

---

Título del proyecto: Estudio termodinámico de mezclas supercríticas con interés en procesos de extracción. PB-88-0412

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, curso 1991-1992 (becario colaboración)

Investigador responsable: Juan Antonio Rodríguez Renuncio

Número de investigadores participantes:

---

---

## Publicaciones o Documentos Científico-Técnicos

---

( CLAVE: L = libro completo, CL = capítulo de libro, A = artículo, R = “review”, E = editor,

S = Documento Científico-Técnico restringido. )

## LIBROS

---

1. AUTORES/AS (p.o. de firma): **A. Cabañas**

TITULO: Capítulo Libro: “Tratamiento de materiales con Fluidos Supercríticos”, pg. 105-115.

LIBRO: Desafíos de la Sociedad Científico Tecnológica Actual, Ed. Ana Cremades Rodríguez, I.S.B.N.:84-608-0418-6 CLAVE: CL

---

2. AUTORES/AS (p.o. de firma): **A. Cabañas**

TITULO: Capítulo Libro: “Reacciones Químicas en Fluidos Supercríticos”, pg. 95-104.

LIBRO: Desafíos de la Sociedad Científico Tecnológica Actual, Ed. Ana Cremades Rodríguez, I.S.B.N.:84-608-0418-6 CLAVE: CL

---

## PUBLICACIONES PERIÓDICAS

---

1. AUTORES/AS (p.o. de firma): **A. Cabañas**, B. Coto, C. Pando and J.A.R. Renuncio.

TITULO: Prediction of Vapor-Liquid Equilibrium Data from Excess Enthalpy Data for Alkanol/Alkane Mixtures by the Extended Real Associated Solution Model

REF. REVISTA/LIBRO: *Ber. Bunsen. Phys. Chem.*, **98**, 777-784 (1994) CLAVE: A

---

2. AUTORES/AS (p.o. de firma): B. Coto, **A. Cabañas**, C. Pando, C. Menduiña, R.G. Rubio, and J.A.R. Renuncio

TITULO: Bulk and Surface Properties of the Highly Non-Ideal Associated Mixtures Formed by Methanol and Propanal System

REF. REVISTA/LIBRO: *J. Chem. Soc. Faraday Trans.*, **91**, 2779-2787 (1995) CLAVE: A

---

3. AUTORES/AS (p.o. de firma): J.A.R. Renuncio, **A. Cabañas**, B. Coto, C. Menduiña, and C. Pando

TITULO: Excess Enthalpies of ethanol-propanal binary mixtures at 298.15 and 318.15 K

REF. REVISTA/LIBRO: *Fluid Phase Equilibria.*, **108**, 153-158 (1995) CLAVE: A

---

4. AUTORES/AS (p.o. de firma): **A. Cabañas**, J.A.R. Renuncio and C. Pando

TITULO: Simultaneous Description of Vapor-Liquid Equilibrium and Excess Enthalpies for Methanol and Ethanol Binary Mixtures with Propanal

REF. REVISTA/LIBRO: *J. Solution Chem.*, **25**, 267-278 (1996) CLAVE: A

---



---

**5. AUTORES/AS** (p.o. de firma): J.A.R. Renuncio, B. Coto, **A. Cabañas**, C. Menduiña, R.G. Rubio and C. Pando

TITULO: Excess Enthalpies, Vapor-Liquid Equilibrium and Surface Properties of the highly non-ideal associated mixtures formed by an alcohol and propanal

REF. REVISTA/LIBRO: *Fluid Phase Equilibria.*, **126**, 177-194 (1996) CLAVE: A

---

**6. AUTORES/AS** (p.o. de firma): E. Colino, B. Coto, **A. Cabañas**, C. Pando and J.A.R. Renuncio

TITULO: The excess Enthalpies of binary mixtures of Methanol with Heptanone Isomers at 298.15 and 323.15 K

REF. REVISTA/LIBRO: *J.Chem. Eng. Data.*, **42**, 735-737 (1997) CLAVE: A

Índice Impacto: 0.885 Posición: 20/105 Engineering, Chemical

---

**7. AUTORES/AS** (p.o. de firma): **A. Cabañas**, C. Pando, C. Menduiña y J.A.R. Renuncio  
TITULO: The Excess Enthalpies of Nitrous Oxide + Cyclohexane at 308.15 and 318.15 K from 7.60 to 15.00 MPa

REF. REVISTA/LIBRO: *J. Supercrit. Fluids*, **10**, 75-86 (1997) CLAVE: A

Índice Impacto: 1.182 Posición: 11/105 Engineering, Chemical

---

**8. AUTORES/AS** (p.o. de firma): **A. Cabañas**, B. Pittau, C. Pando and J.A.R. Renuncio

TITULO: Excess Enthalpies of nitrous oxide-octane in the liquid and supercritical regions

REF. REVISTA/LIBRO: *J.Chem. Soc., Faraday Trans.*, **93**, 3067-3071 (1997) CLAVE: A

Índice Impacto: 1.708 Posición: 27/86 Chemistry, Physical

---

**9. AUTORES/AS** (p.o. de firma): B. Pittau, **A. Cabañas**, C. Pando and J.A.R. Renuncio

TITULO: Excess Molar Enthalpies of Nitrous Oxide-Heptane Mixtures in the liquid and supercritical regions

REF. REVISTA/LIBRO: *Ber. Bunsen. Phys. Chem.*, **102**, 7-13 (1998) CLAVE: A

Índice Impacto: 1.355 Posición: 45/92 Chemistry, Physical

---

**10. AUTORES/AS** (p.o. de firma): **A. Cabañas**, C. Pando and J.A.R. Renuncio

TITULO: Excess Enthalpies of Nitrous Oxide-Cyclohexane Mixtures in the Liquid and Supercritical Regions

REF. REVISTA/LIBRO: *High Temp.-High Press*, **30**, 547-554 (1998) CLAVE: A

---

**11. AUTORES/AS** (p.o. de firma): **A. Cabañas**, C. Menduiña, C. Pando and J.A.R. Renuncio

TITULO: Excess Molar Enthalpies of Nitrous Oxide/Hexane Mixtures in the Liquid and Supercritical Regions

REF. REVISTA/LIBRO: *Ind. Eng. Chem. Res*, **37**, 3036-3042 (1998) CLAVE: A

Índice Impacto: 1.229 Posición: 10/11390 Engineering, Chemical

---

---

**12.** AUTORES/AS (p.o. de firma): D. Mock, **A. Cabañas**, J.A.R. Renuncio and C. Pando  
TITULO: The Excess Enthalpies of mixtures of olive oil and supercritical carbon dioxide  
REF. REVISTA/LIBRO: *J. Supercrit. Fluids*, **14**, 173-180 (1999) CLAVE: A  
Índice Impacto: 1.414 Posición: 44/90 Engineering, Chemical

---

**13.** AUTORES/AS (p.o. de firma): S. Figueroa-Gerstenmaier, **A. Cabañas** and M. Costas  
TITULO: Self-association and complex formation in alcohol-unsaturated hydrocarbon systems. Heat capacities of linear alcohols mixed with alkenes and alkynes  
REF. REVISTA/LIBRO: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **1**, 665-674 (1999) CLAVE: A

---

**14.** AUTORES/AS (p.o. de firma): J.A.R. Renuncio, **A. Cabañas** and C. Pando  
TITULO: Calorimetry in the near critical and supercritical regions. Nitrous oxide + hydrocarbon mixtures  
REF. REVISTA/LIBRO: *Pure Appl. Chem.*, **71**, 1197-1205 (1999) CLAVE: A  
Índice Impacto: 1.141

---

**15.** AUTORES/AS (p.o. de firma): **A. Cabañas**, J.A.R. Renuncio and C. Pando  
TITULO: Thermodynamic study of N<sub>2</sub>O + CO<sub>2</sub> and N<sub>2</sub>O + CO<sub>2</sub> + Cyclohexane systems in the near-critical and supercritical regions  
REF. REVISTA/LIBRO: *Ind. Eng. Chem. Res.*, **39**, 3536-3575 (2000) CLAVE: A  
Índice Impacto: 1.294 Posición: 13/117 Engineering, Chemical

---

**16.** AUTORES/AS (p.o. de firma): **A. Cabañas**, J.A. Daar., E. Lester and Martyn Poliakoff  
TITULO: A Continuous and Clean One-Step Synthesis of Nano-Particulate Ce<sub>1-x</sub>Zr<sub>x</sub>O<sub>2</sub> Solid Solutions in Near-Critical Water  
REF. REVISTA/LIBRO: *Chem. Commun.*, **11**, 901-902 (2000) CLAVE: A  
Índice Impacto: 3.695 Posición: 11/118 Chemistry/Multidisciplinary

---

**17.** AUTORES/AS (p.o. de firma): **A. Cabañas**, J.A. Daar, E. Lester and Martyn Poliakoff  
TITULO: Continuous Hydrothermal Synthesis of Inorganic Materials in a Near Critical Water Flow Reactor; The One-step Synthesis of Nano-particulate Ce<sub>1-x</sub>Zr<sub>x</sub>O<sub>2</sub> (x=0-1) Solid Solutions  
REF. REVISTA/LIBRO: *J. Mater. Chem.*, **11**, 10-19 (2001) CLAVE: A  
Índice Impacto: 2.736 Posición: 6/170 Material Science/Multidisciplinary

---

**18.** AUTORES/AS (p.o. de firma): **A. Cabañas** and Martyn Poliakoff  
TITULO: The Continuous Hydrothermal Synthesis of nano-particulate ferrites in near critical and supercritical water  
REF. REVISTA/ LIBRO: *J. Mater. Chem.*, **11**, 1408-1416 (2001) CLAVE: A  
Índice Impacto: 2.736 Posición: 6/170 Material Science/Multidisciplinary

---

---

**19.** AUTORES/AS (p.o. de firma): J.M. Blackburn, D.P. Long, **A. Cabañas** and J.J. Watkins

TITULO: Deposition of Conformal Copper and Nickel Films from Supercritical Carbon Dioxide

REF. REVISTA/LIBRO: *Science*, **294**, 141-145 (2001) CLAVE: A

Índice Impacto: 23.329 Posición: 2/45 Multidisciplinary Science

---

**20.** AUTORES/AS (p.o. de firma): **A. Cabañas**, J.M. Blackburn and J.J. Watkins

TITULO: Deposition of Cu Films from Supercritical Fluids using Cu(I)  $\beta$ -diketonate Precursors

REF. REVISTA/LIBRO: *Microelectronic Engineering*, **64**, 53-61 (2002) CLAVE: A

Índice Impacto: 1.723 Posición: 66/2003 Engineering, Electrical and Electronics

---

**21.** AUTORES/AS (p.o. de firma): **A. Cabañas**, X. Shan and J.J. Watkins

TITULO: Alcohol-assisted deposition of Cu from Supercritical Carbon Dioxide

REF. REVISTA: *Chemistry of Materials*, **15**, 2910-2916 (2003) CLAVE: A

Índice Impacto: 4.374 Posición: 10/177 Material Science/Multidisciplinary

---

**22.** AUTORES/AS (p.o. de firma): **A. Cabañas**, D.P. Long y J.J. Watkins

TITULO: Deposition of Gold Films and nanostructures from Supercritical Carbon Dioxide

REF. REVISTA: *Chemistry of Materials*, **16**, 2028-2033 (2004) CLAVE: A

Índice Impacto: 4.103 Posición: 9/177 Material Science/Multidisciplinary

---

**23.** AUTORES/AS (p.o. de firma): E. Pérez-Velilla E., Y. Sánchez-Vicente, **A. Cabañas**, C. Pando, J.A.R. Renuncio.

TITULO: Excess molar enthalpies for mixtures of supercritical carbon dioxide and water + ethanol solutions

REF. REVISTA: *J. Supercrit. Fluids*, **36**, 23-30 (2005) CLAVE: A

Índice Impacto: 2.144 Posición: 8/116 Engineering Chemical

---

**24.** AUTORES/AS (p.o. de firma): **A. Cabañas**

TITULO: "Síntesis de Materiales en Fluidos Supercríticos: Nanopartículas, Películas metálicas y Nanoestructuras"

REF. REVISTA: *Anales de Química*, 101, 11-18, (2005) CLAVE: A

---

**25.** AUTORES/AS (p.o. de firma): **A. Cabañas**, E. Enciso, M.C. Carbajo, M.J. Torralvo, C. Pando and J.A.R. Renuncio.

TITULO: Synthesis of ordered macroporous SiO<sub>2</sub> in supercritical CO<sub>2</sub> using 3D-latex array templates

REF. REVISTA: *Chem. Commun.*, 2618-1620 (2005) CLAVE: A

Índice Impacto: 4.426 Posición: 9/125 Chemistry/Multidisciplinary

---

---

---

**26.** AUTORES/AS (p.o. de firma): **A. Cabañas**, E. Enciso, M.C. Carbajo, M.J. Torralvo, C. Pando and J.A.R. Renuncio.

TITULO: "Synthesis SiO<sub>2</sub>-aerogel inverse opals in supercritical carbon dioxide"

REF. REVISTA: *Chem. Mater*, **17**, 6137-6145 (2005)

CLAVE: A

Índice Impacto: 4.818

Posición: 9/178 Material Science/Multidisciplinary

---

**27.** AUTORES/AS (p.o. de firma): E. Pérez, Y. Sánchez-Vicente, **A. Cabañas**, C. Pando, J.A.R. Renuncio.

TITULO: "Excess molar enthalpies for mixtures of carbon dioxide + a modifier (5 mol% methanol or octanol) and hexane at 308.15 K and 12.40 MPa."

REF. REVISTA: *Fluid Phase Equilibria*, **240**, 197-203 (2006)

CLAVE: A

Índice Impacto: 1.68

Posición: 4/42 Thermodynamics

---

**28.** AUTORES/AS (p.o. de firma): Y. Sánchez-Vicente, E. Pérez, **A. Cabañas**, C. Pando, J.S. Urieta y J.A.R. Renuncio.

TITULO: "Excess molar enthalpies for mixtures of supercritical carbon dioxide and limonene"

REF. REVISTA: *Fluid Phase Equilibria*, **246**, 153-157 (2006)

CLAVE: A

Índice Impacto: 1.68

Posición: 4/42 Thermodynamics

---

**29.** AUTORES/AS (p.o. de firma): Y. Sánchez-Vicente, E. Pérez, **A. Cabañas**, C. Pando, J.S. Urieta y J.A.R. Renuncio.

TITULO: "Excess molar enthalpies for mixtures of supercritical carbon dioxide and 1,8-cineole"

REF. REVISTA: *J. Supercrit. Fluids*, **40**, 331-335 (2007)

CLAVE: A

Índice Impacto: 2.189

Posición: 9/114 Engineering Chemical

---

**30.** AUTORES/AS (p.o. de firma): **A. Cabañas**, J. Li, P. Blood, T. Chudoba, W. Lojkowski, M. Poliakoff y E. Lester

TITULO: "Synthesis of nanoparticulate Yttrium Aluminum Garnet in Supercritical Water-Ethanol mixtures"

REF. REVISTA: *J. Supercrit. Fluids*, **40**, 284-292 (2007)

CLAVE: A

Índice Impacto: 2.189

Posición: 9/114 Engineering Chemical

---

**31.** AUTORES/AS (p.o. de firma): **A. Cabañas**, E. Enciso, M.C. Carbajo, M.J. Torralvo, C. Pando and J.A.R. Renuncio.

TITULO: "Effect of supercritical CO<sub>2</sub> in modified polystyrene 3D-latex arrays"

REF. REVISTA: *Langmuir*, **22**, 8966-8974 (2006)

CLAVE: A

Índice Impacto: 3.902

Posición: 19/108 Chemistry, Physical

---

---

**32.** AUTORES/AS (p.o. de firma): **A. Cabañas**, E. Enciso, M.C. Carbajo, M.J. Torralvo, C. Pando and J.A.R. Renuncio.

TITULO: "Studies on the porosity of SiO<sub>2</sub>-aerogel inverse opals synthesized in supercritical CO<sub>2</sub>"

REF. REVISTA: *Microporous and Mesoporous Materials*, **99(1-2)** 23-29 (2007) CLAVE: A

Índice Impacto: 2.210 Posición: 29/110 Material Science, Multidisciplinary

---

**33.** AUTORES/AS (p.o. de firma): M.J. Dávila, **A. Cabañas** y C. Pando

TITULO: "Excess molar enthalpies for binary mixtures related to supercritical antisolvent precipitation: carbon dioxide + N-methyl-2-pyrrolidone"

REF. REVISTA: *J. Supercrit. Fluids*, **42**, 172-179 (2007) CLAVE: A

Índice Impacto: 2.189 Posición: 9/114 Engineering Chemical

---

**34.** AUTORES/AS (p.o. de firma): M. H. Nilsen, C. Nordhei, A. L. Ramstad, D.G. Nicholson, M. Poliakoff y **A. Cabañas**.

TITULO: "XAS (XANES and EXAFS) Investigations of nanoparticulate ferrites synthesised continuously in near critical and supercritical water",

REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. C*, **111**, 6252-6262 (2007). CLAVE: A

---

**35.** AUTORES/AS: Y. Sánchez-Vicente, C. Pando, E. Pérez, **A. Cabanas**, J.A.R. Renuncio

TITULO: "Excess molar enthalpies for Mixture of Supercritical CO<sub>2</sub> and Linalool".

REF. REVISTA: *J. Supercrit. Fluids*, **46**, 265-271(2008). CLAVE: A

Índice Impacto: 2.428 Posición: 10/116 Engineering Chemical

---

**36.** AUTORES/AS: E. Pérez, **A. Cabañas**, Y.Sánchez-Vicente, J.A.R. Renuncio y C. Pando

TITULO: "High-Pressure Phase behaviour for the Binary System Carbon Dioxide + Dibenzofuran"

REF. REVISTA: *J. Supercrit. Fluids*, **46**, 238-244(2008) CLAVE: A

Índice Impacto: 2.428 Posición: 10/116 Engineering Chemical

---

**37.** AUTORES/AS: E. Pérez, **A. Cabañas**, J.A.R. Renuncio, Y.Sánchez-Vicente, y C. Pando

TITULO: "Cosolvent Effect of Methanol and Acetic Acid on Dibenzofuran Solubility in Supercritical Carbon Dioxide"

REF. REVISTA: *J. Chem. Eng. Data*, **53**, 2649-2653 (2008) CLAVE: A

Índice Impacto: 2.063 Posición: 17/116 Engineering Chemical

---

**38.** AUTORES/AS: Y.Sánchez-Vicente, **A. Cabañas**, J.A.R. Renuncio y C. Pando

TITULO: "Extraction of Peach (*Prunus persica*) Seed Oil using Carbon Dioxide and Ethanol"

REF. REVISTA: *J. Supercrit. Fluids*, **49**, 167-173 (2009) CLAVE: A

Índice Impacto: 2.639 Posición: 15/128 Engineering Chemical

---

---

**39. AUTORES/AS** (p.o. de firma): M.J. Tenorio, M.J. Torralvo, E. Enciso, C. Pando and J.A.R. Renuncio y **A. Cabañas**.

TITULO: “Supercritical CO<sub>2</sub> as a reaction and impregnation medium in the synthesis of Pd-SiO<sub>2</sub> aerogel inverse opals”

REF. REVISTA: *J. Supercrit. Fluids*, **49**, 369-376 (2009) Doi:10.1016/j.supflu.2009.03.011

**CLAVE:** A

Índice Impacto: 2.639

Posición: 15/128 Engineering Chemical

---

**40. AUTORES/AS** (p.o. de firma): V. Salazar, Y. Sánchez-Vicente, C. Pando, J.A.R. Renuncio y **A. Cabañas**

TITULO: “Enthalpies of Absorption of Carbon Dioxide in Aqueous Sodium Glycinate Solutions at Temperatures of (313.15 and 323.15) K”

REF. REVISTA: *J. Chem. Eng. Data*, **55**, 1215–1218 (2010) 10.1021/je9005954

**CLAVE:** A

Índice Impacto: 2.089

Posición: 28/135 Engineering Chemical

---

**41. AUTORES/AS** (p.o. de firma): F. Zahran, C. Pando, J.A.R. Renuncio y **A. Cabañas**

TITULO: “Excess Molar Enthalpies of CO<sub>2</sub> + Acetone at Pressures from (9.00 to 18.00) MPa and Temperatures from (313.15 to 333.15) K”

REF. REVISTA: *J. Chem. Eng. Data* **55** (9), 3649–3654 (2010)

**CLAVE:** A

Índice Impacto: 2.089

Posición: 28/135 Engineering Chemical

---

**42. AUTORES/AS** (p.o. de firma): F. Zahran, C. Pando, J.A.R. Renuncio y **A. Cabañas**

TITULO: “Measurements and modeling of high-pressure excess molar enthalpies and isothermal vapor-liquid equilibria of the carbon dioxide + N,N-dimethylformamide system”

REF. REVISTA: *J. Supercrit. Fluids* **55** (2), 566-572 (2010)

Índice Impacto: 2.986

Posición: 12/135 Engineering Chemical

---

**43. AUTORES/AS:** J. Morere, M.J. Tenorio, M.J. Torralvo, C. Pando, J.A.R. Renuncio y **A. Cabañas**

TITULO: Deposition of Pd into mesoporous Silica SBA-15 using supercritical Carbon Dioxide

REF. REVISTA: *J. Supercrit. Fluids*, **56**, 213-222 (2011) **CLAVE:** A

Índice Impacto: 2.86 Posición: 47/134 Engineering Chemical

---

**44. AUTORES/AS:** J. C. Cabrillo, E. Enciso, M. J. Capitan, **A. Cabañas**, M. J. Torralvo, J. Alvarez and F. J. Bermejo

TITULO: “Numerically efficient real space theory of scattering from colloidal crystals”,

REF. REVISTA: *Langmuir*, **27**, 2219-2228 (2011) **CLAVE:** A

Índice Impacto: 4.186

Posición: 28/134 Chemistry, Physical

---

**45.** AUTORES/AS: F., Zahran, J. Morère, **A. Cabañas**, J.A.R. Renuncio and C.Pando  
TITULO: "Role of excess molar enthalpies in supercritical antisolvent micronizations using dimethylsulfoxide as the polar solvent"  
REF. REVISTA: J.Supercrit. Fluids, 60, 45– 50 (2011) **CLAVE:** A  
Índice Impacto: 2.86 Posición: 47/134 Engineering Chemical

---

**46.** AUTORES/AS: F., Zahran, C.Pando, **A. Cabañas** and J.A.R. Renuncio  
TITULO: "Excess molar enthalpies for mixtures of supercritical CO<sub>2</sub> and ethyl acetate and their role in supercritical fluid applications"  
REF. REVISTA: J. Chem, Thermodyn., 51, 59–64 (2012) **CLAVE:** A  
Índice Impacto: 2.297 Posición: 9/55 Thermodynamics

---

**47.** AUTORES/AS: M.J. Tenorio, C. Pando, J.A.R. Renuncio, G. Stevens, R.A. Bourne, M. Poliakoff, y **A. Cabañas**  
TITULO: Adsorption of Pd(hfac)<sub>2</sub> on mesoporous silica SBA-15 using supercritical CO<sub>2</sub> and its role in the performance of Pd-SiO<sub>2</sub> catalysts.  
REF. REVISTA: J.Supercrit. Fluids, 69, 21-28 (2012) **CLAVE:** A  
Índice Impacto: 2.732 Posición: 51/135 Engineering Chemical

---

**48.** AUTORES/AS: M.J. Tenorio, **A. Cabañas**, C. Pando and J.A.R. Renuncio  
TITULO: Solubility of Pd(hfac)<sub>2</sub> and Ni(hfac)<sub>2</sub>·2H<sub>2</sub>O in supercritical carbon dioxide pure and modified with ethanol.  
REF. REVISTA: J.Supercrit. Fluids, 70, 106-111 (2012) **CLAVE:** A  
Índice Impacto: 2.732 Posición: 51/135 Engineering Chemical

---

**49.** AUTORES/AS: J. Morère, M.J. Tenorio, C. Pando, J.A.R. Renuncio y **A. Cabañas**,  
TITULO: Solubility of two metal-organic ruthenium precursors in supercritical CO<sub>2</sub> and their application in clean supercritical fluid technology, J. Chem. Therm., 58, 55-61 (2012), Pages 55–61 **CLAVE:** A  
Índice Impacto: 2.423 Posición: 9/55 Thermodynamics

---

**50.** AUTORES/AS: Y. Sánchez-Vicente, **A. Cabañas**, J.A.R. Renuncio and C. Pando,  
TITULO: Supercritical CO<sub>2</sub> as a green solvent for eucalyptus and citrus essential oils processing: role of thermal effects upon mixing  
REF. REVISTA: RSC Adv. ,**3**, 6065-6075 (2013) DOI:10.1039/C3RA23174G **CLAVE:** A  
Índice Impacto: 3.708 Posición: 35/148 Chemistry, Multidisciplinary

---

**51.** AUTORES/AS: F. Zahran, **A. Cabañas**, J.A.R. Cheda, J.A. R. Renuncio and C. Pando,  
TITULO: "Dissolution rate enhancement of the anti-inflammatory drug diflunisal by coprecipitation with a biocompatible polymer using carbon dioxide as a supercritical fluid antisolvent"  
REF. REVISTA: J. Supercrit. Fluids, 88, 56–65 (2014) **CLAVE:** A  
Índice Impacto: 2.371 Posición: 37/135 Engineering Chemical

---

**52.** AUTORES/AS (p.o. de firma): Y. Sánchez-Vicente, C. Pando, M. Cortijo, **A. Cabañas**  
TITULO: “Chemical Surface Modification of Mesoporous Silica SBA-15 with a Tertiary Aminosilane using Supercritical Carbon Dioxide”

REF. REVISTA: Microporous and Mesoporous Materials, 193, 145–153 (2014). CLAVE: A  
Índice Impacto: 3.453 Posición: 44/260 Material Science, Multidisciplinary

---

**53.** AUTORES/AS (p.o. de firma): Y. Sánchez-Vicente, L.A. Stevens, C. Pando, M.J. Torralvo, C.E. Snape, T.C. Drage and **A. Cabañas**

TITULO: “A new sustainable route in supercritical CO<sub>2</sub> to functionalize silica SBA-15 with 3-aminopropyltrimethoxysilane as material for carbon capture”

REF. REVISTA: Chem. Eng. J., 264, 886–898 (2015) CLAVE: A  
Índice Impacto: 5.31 Posición: 8/135 Engineering Chemical

---

**54.** AUTORES/AS: J. Morère, M.J. Torralvo, C. Pando, J.A.R. Renuncio and **A. Cabañas**

TITULO: “Supercritical fluid deposition of Ru nanoparticles into SiO<sub>2</sub> SBA-15 as a sustainable method to prepare selective hydrogenation catalysts”

REF. REVISTA: RSC Adv., 5, 38880–38891 (2015) CLAVE: A

Índice Impacto: 3.289 Posición: 49/163 Chemistry, Multidisciplinary

---

**55.** AUTORES/AS: J. Morère, S. Royuela, G. Asensio, E. Enciso, C. Pando and **A. Cabañas**

TITULO: “Deposition on Ni nanoparticles onto porous supports using supercritical CO<sub>2</sub>: effect of the precursor and reduction methodology”

REF. REVISTA: Phil. Trans. R. Soc. A, 373: 20150014 (2015) CLAVE: A

DOI:10.1098/rsta.2015.0014

Índice Impacto: 2.441 Posición: 13/63 Multidisciplinary Science

---

**56.** AUTORES/AS: I. Cuadra, **A. Cabañas** J.A.R. Cheda, F.J Martínez-Casado y C. Pando.

TITULO: “Pharmaceutical co-crystals of the anti-inflammatory drug diflunisal and nicotinamide obtained using supercritical CO<sub>2</sub> as an antisolvent”

REF. REVISTA: J. CO<sub>2</sub> Utilization 13, 29-37 (2016) CLAVE:A

---

**57.** AUTORES/AS: J. Morere, E. Sánchez-Miguel, C. Pando, **A. Cabañas**

TITULO: “Supercritical Fluid Preparation of Pt, Ru and Ni/graphene nanocomposites and their application as selective catalysts in the partial hydrogenation of limonene”

REF. REVISTA: J. Supercrit. Fluids 120, 7-17 (2017) CLAVE:A

---

**58.** AUTORES/AS: **A. Cabañas**, I. Cuadra y C. Pando

TITULO: “Preparation of pharmaceutical co-crystals through sustainable processes using supercritical carbon dioxide: a review”

REF. REVISTA: RSC Adv., 6, 71134-71150(2016) CLAVE:A

---

**59.** AUTORES/AS: Y. Sánchez-Vicente, O. Alonso-Pastor, C. Pando, **A. Cabañas**

TITULO: “Phase behaviour of the two binary systems formed by CO<sub>2</sub> and the silane precursors N-[3-(trimethoxysilyl)propyl]aniline or (3-mercaptopropyl) Trimethoxysilane”

REF. REVISTA J. Chem. Thermodynamics 103, 152–156 (2016) CLAVE:A

---



**60.** AUTORES/AS: A. Castro, J. Morère, **A. Cabañas**, L.P. Ferreira, M. Godinho, P. Ferreira\* and P. Vilarinho\*

TITULO: "Designing multiferroic nanocomposites using supercritical CO<sub>2</sub> to deposit Ni nanoparticles into nanopatterned porous BaTiO<sub>3</sub> thin films"

REF. REVISTA : J. Mater. Chem. C, **5**, 1083-1089 (2017)

---

**61.** AUTORES/AS: E. Sánchez-Miguel, M.J. Tenorio, J. Morère, C. Pando y **A. Cabañas**.

TITULO: "Sustainable preparation of Pt bimetallic catalysts and their application in the hydrogenation of furfural."

REF. REVISTA: ACS Sustainable Chemistry (2017), enviado

CLAVE:A

---

**Participación en contratos de I+D de especial relevancia con Empresas y/o Administraciones (nacionales y/o internacionales)**

---

Título del contrato/proyecto: "Evaluation of Reactivity and Solubility of Natural Polymers in Supercritical Gases", **Proyecto artículo 83**

Empresa/Administración financiadora: Corticeira Amorim & Irmãos, S.A.

Duración, Nov 2010- Junio 2011

Investigador responsable: Prof. Lourdes Calvo y Albertina Cabañas

---

Título del contrato/proyecto: Deposition of Materials from Supercritical Fluids

Empresa/Administración financiadora: Novellus Systems, Inc / Universidad de Massachusetts

Duración, desde: 2001

Investigador responsable: Prof. James J. Watkins

---

Título del contrato/proyecto: Microencapsulation and microparticle production using supercritical carbon dioxide

Empresa/Administración financiadora: Alza Corporation / Universidad de Massachusetts

Duración: desde 2002 a 2003

INVESTIGADOR/A RESPONSABLE: Prof. James J. Watkins

---

---

**Patentes y Modelos de utilidad**

---

Inventores (p.o. de firma): James J. Watkins, Albertina Cabañas, Jason M. Blackburn

Título: Contamination Suppression in Chemical Fluid Deposition

N. de solicitud: 20030161954

País de prioridad: USA

Fecha de prioridad: 28 Agosto 2003

Entidad titular: UMass

Países a los que se ha extendido: USA

Empresa/s que la están explotando:

---

---

**Estancias en Centros extranjeros de reconocido prestigio internacional  
(estancias continuadas superiores a un mes)**

---

CLAVE: D = doctorado, P = postdoctoral, I = invitado, C = contratado, O = otras (especificar).

---

CENTRO: Universidad Sheffield  
LOCALIDAD: Sheffield PAIS: Reino Unido AÑO: 1993 DURACIÓN: 3 meses  
TEMA: Becario ERASMUS CLAVE: O

---

CENTRO: Universidad Nacional del Litoral  
LOCALIDAD: Santa Fe PAIS: Argentina AÑO: 1995 DURACIÓN: 1 mes y medio  
TEMA: Equilibrio de fases y procesos de separación CLAVE: D

---

CENTRO: Universidad Nacional Autónoma de México  
LOCALIDAD: México D.F. PAIS: México AÑO: 1996 DURACIÓN: 3 meses  
TEMA: Termodinámica Química.  
Autoasociación de alcoholes en hidrocarburos insaturados CLAVE: D

---

CENTRO: Universidad Nottingham  
LOCALIDAD: Nottingham PAIS: Reino Unido AÑO: 1998 DURACIÓN: 3 meses  
TEMA: Reacciones Químicas en Fluidos Supercríticos CLAVE: D

---

CENTRO: Universidad Nottingham  
LOCALIDAD: Nottingham PAIS: Reino Unido AÑO: 1999-2000 DURACIÓN: 2 años  
TEMA: Reacciones Químicas en Agua Supercrítica.  
Síntesis y espectroscopía de la reacción CLAVE: P

---

CENTRO: Universidad Massachusetts  
LOCALIDAD: Amherst PAIS: USA AÑO: 2001-2003 DURACIÓN: 2 años y 5 meses  
TEMA: Deposición de Metales en fluidos supercríticos.  
Microencapsulación de fármacos y formación de partículas en  
fluidos supercríticos CLAVE: P

---

CENTRO: Universidad Nottingham  
LOCALIDAD: Nottingham PAIS: Reino Unido AÑO: 2005 DURACIÓN: 2 meses  
TEMA: Reacciones Químicas en Fluidos Supercríticos CLAVE: I

---

**Resumen de estancias en el extranjero:**

**Otras (Erasmus)= 3 meses**

**Doctorado= 7 meses y medio.**

**Postdoctoral= 4 años y 5 meses**

**Invitado= 2 meses**

---

## Contribuciones a Congresos

---

**1. AUTORES/AS:** J.A.R. Renuncio, **A. Cabañas**, B. Coto and C. Pando  
**TITULO:** Prediction of VLE Data for Alcohol-Hydrocarbon Systems  
**TIPO DE PARTICIPACIÓN:** póster  
**CONGRESO:** Sixth International Meditherm Meeting  
**PUBLICACIÓN:**  
**LUGAR DE CELEBRACIÓN:** Lyon, France  
**AÑO:** Junio 1993.

---

**2. AUTORES/AS:** **A. Cabañas**, B. Coto, C. Menduiña, C. Pando and J.A.R. Renuncio  
**TITULO:** Excess Enthalpies and Vapor-Liquid Equilibrium of Binary Mixtures Alkanol/Aldehyde  
**TIPO DE PARTICIPACIÓN:** conferencia invitada  
**CONGRESO:** 49th Calorimetry Conference.  
**PUBLICACIÓN**  
**LUGAR DE CELEBRACIÓN:** Santa Fe, USA  
**AÑO:** Julio 31- August 5, 1994

---

**3. AUTORES/AS:** **A. Cabañas**, B. Coto, C. Menduiña, C. Pando and J.A.R. Renuncio  
**TITULO:** Excess Enthalpies and Vapor-Liquid Equilibrium of Binary Mixtures Alkanol + Aldehyde  
**TIPO DE PARTICIPACIÓN:** póster  
**CONGRESO:** . 13th IUPAC Conference on Chemical Thermodynamics  
**PUBLICACIÓN:**  
**LUGAR DE CELEBRACIÓN:** Clermont-Ferrand, France  
**AÑO:** Julio 17-22, 1994

---

**4. AUTORES/AS:** J.A.R. Renuncio, B. Coto, **A. Cabañas**, C. Pando, C. Menduiña and R.G.Rubio.  
**TITULO:** Excess Enthalpies, VLE and Surface Properties of the Highly Non-Ideal Associated Mixtures Formed by Alcohol and Propanal  
**TIPO DE PARTICIPACIÓN:** póster  
**CONGRESO:** Giornate Mediterranee Di Calorimetria ed Analisi Termica, XVII Conference AICAT-GICAT, VII Meeting GECA  
**LUGAR DE CELEBRACIÓN:** Cagliari, Italy  
**AÑO:** Septiembre 12-16, 1995

---

---

**5. AUTORES/AS: A. Cabañas, B. Coto, C. Menduiña y J.A.R. Renuncio**

TITULO: Equilibrio líquido-Vapor, Entalpías y Energías Gibbs de Exceso de Mezclas Alcohol/Alhehído.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster

CONGRESO: 25<sup>th</sup> Reunión Bienal de la Sociedad Española de Química

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Vitoria-Gasteiz

AÑO: Septiembre 25-29, 1994

---

**6. AUTORES/AS: A. Cabañas, B. Coto, C. Menduiña, C. Pando and J.A.R. Renuncio**

TITULO: Excess Enthalpies of N<sub>2</sub>O-Hydrocarbon Mixtures in the Liquid and Supercritical Regions

TIPO DE PARTICIPACIÓN: oral

CONGRESO: Program CERC-3 Workshop

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Göttingen, Germany

AÑO: Mayo 15-19, 1995

---

**7. AUTORES/AS: A. Cabañas, C. Pando and J.A.R. Renuncio**

TITULO: The excess Enthalpies of Nitrous Oxide-Cyclohexane Mixtures in the Liquid and Supercritical Regions Excess Enthalpies of Nitrous Oxide-Octane in the Liquid and Supercritical Regions

TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster

CONGRESO: 14<sup>th</sup> European Conference on Thermophysical Properties

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lyon, France

AÑO: Septiembre 16-19, 1996

---

**8. AUTORES/AS: A. Cabañas, C. Menduiña, C. Pando y J.A.R. Renuncio**

TITULO: Excess molar Enthalpies of Nitrous Oxide-Hexane in the liquid an supercritical regions

TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster

CONGRESO: 3er Encontro Nacional de Química-Física da Sociedade Portuguesa de Química

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Monte de Caparica, Portugal

AÑO: Noviembre 20-22, 1997

---

---

**9. AUTORES/AS: A. Cabañas, B. Pittau, C. Pando and J.A.R. Renuncio**

TITULO: Excess Enthalpies of Nitrous Oxide-Octane in the Liquid and Supercritical Regions

TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster

CONGRESO: Jornadas Mediterraneas de Calorimetría y Análisis Térmico, XIX Conference AICAT\_GICAT, VII Meeting GECAT

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Palma de Mallorca, Spain

AÑO: Junio 24-27, 1997

---

**10. AUTORES/AS: A. Cabañas, B. Pittau, C. Pando and J.A.R. Renuncio**

TITULO: Entalpías Molares de Exceso de la Mezcla óxido Nitroso + Heptano en las Regiones Líquida y Supercrítica

TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster

CONGRESO: 26<sup>th</sup> Reunión Bienal de la Sociedad Española de Química

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Cádiz, Spain

AÑO: Septiembre 23-26, 1997

---

**11. AUTORES/AS: A. Cabañas, C. Pando and J.A.R. Renuncio**

TITULO: Excess Molar Enthalpies of N<sub>2</sub>O + CO<sub>2</sub> and N<sub>2</sub>O + CO<sub>2</sub> + Cyclohexane at 308.15 K and 7.98 MPa.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster

CONGRESO: II NATO ASI Conference of Supercritical Fluids

PUBLICACIÓN: **Supercritical Fluids. Fundamentals and Applications, E.Kiran, P.G. Debenedetti y C. Peters (editores) NATO-ASI Serie E : Applied Sciences Vol 366 Kluwe Academic Publisher 2000.**

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Kemer, Turkey

AÑO: Julio 12, 1997

---

**12. AUTORES/AS: A. Cabañas, C. Pando y J.A.R. Renuncio.**

TITULO: Excess Molar Enthalpies of Nitrous oxide + Hydrocarbon mixtures in the liquid and supercritical regions using equations of state

TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster

CONGRESO: the 5<sup>th</sup> Meeting on Supercritical Fluids

PUBLICACIÓN: **Proceedings of the 5<sup>th</sup> Meeting on Supercritical Fluids. Tome 2: Natural Products Advanced Processes Reactions and Various, Ed. ISASF, Pg. 949-954**

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Nice, France

AÑO: Marzo 23-25, 1998

---

---

**13. AUTORES/AS:** J.A.R. Renuncio, **A. Cabañas**, C. Pando

TITULO: Calorimetry in the near critical and supercritical regions. Nitrous oxide + hydrocarbon mixtures

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia Plenaria

CONGRESO: 15<sup>th</sup> IUAPC Conference on Chemical Thermodynamics

PUBLICACIÓN: Pure Appl. Chem, **71**, 1197-1205 (1999)

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Porto, Portugal

AÑO: Julio 27-Agosto 1, 1998

---

**14. AUTORES/AS:** **A. Cabañas**, C. Pando y J.A.R. Renuncio.

TITULO: Excess Molar Enthalpies of N<sub>2</sub>O + CO<sub>2</sub> and N<sub>2</sub>O + CO<sub>2</sub> + Cyclohexane at 308.15K and 7.64 MPa

TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster

CONGRESO: 27<sup>a</sup> Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Tenerife, España

AÑO: Julio, 1999

---

**15. AUTORES/AS:** **A. Cabañas** J.A. Darr, T. Ilkenhans and M. Poliakov

TITULO: The synthesis of crystalline metal oxide particles in sub- and supercritical water mixtures

TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster

CONGRESO: 6<sup>th</sup> Meeting on Supercritical Fluids

PUBLICACIÓN: **Proc. of the 6<sup>th</sup> Meeting on Supercritical Fluids, Nottingham, Reino Unido, Abril 10-13, 1999, Ed.: ISASF, Pg. 483-484.**

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Nottingham, Reino Unido      AÑO: Abril 10-13, 1999

---

**\*16. AUTORES/AS:** **A. Cabañas**, J.A. Darr, T. Ilkenhan, E. Lester and M. Poliakov

TITULO: A Continuous and Clean One-Step Synthesis of Nano-Particulate Mixed Oxides in Near-Critical Water

TIPO DE PARTICIPACIÓN: oral

CONGRESO: Joint 6<sup>th</sup> International Symposium on Hydrothermal Reactions and Fourth International Conference on Solvo-Thermal Reactions

PUBLICACIÓN: **Proc. of the Joint 6<sup>th</sup> ISHR & 6<sup>th</sup> ICSTR, Kochi, Japan, July 25-28, 2000.**

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Kochi, Japan.

AÑO: Julio 25-28, 2000

---

---

**17. AUTORES/AS:** J. Blackburn, **A. Cabañas** and J.J. Watkins

**TÍTULO:** Reactive Deposition of Device Quality Conformal Copper Films from Supercritical CO<sub>2</sub>

**TIPO DE PARTICIPACIÓN:** oral

**CONGRESO:** Advanced Metallization Conference (AMC) 2001

**PUBLICACIÓN:** **Proc. Advanced Metallization Conference (AMC) 2001, Ed. MRS., p. 177-183**

**LUGAR DE CELEBRACIÓN:** Montreal, Canada

**AÑO:** Octubre 9-11, 2001

---

**18. AUTORES/AS:** J. Blackburn, **A. Cabañas**, D.P. Long and J.J. Watkins

**TÍTULO:** Reactive Deposition of Device Quality Conformal Copper Films from Supercritical CO<sub>2</sub>

**TIPO DE PARTICIPACIÓN:** oral

**CONGRESO:** European Workshop in Materials for Advanced Metallization (MAM) 2002

**PUBLICACIÓN:** Microelectronic Engineering, **64**, 53-61 (2002)

**LUGAR DE CELEBRACIÓN:** Vaals, The Netherlands

**AÑO:** Marzo 3-6, 2002

---

**19. AUTORES/AS:** **A. Cabañas** and J.J. Watkins

**TÍTULO:** Chemical Fluid Deposition of Copper Films

**TIPO DE PARTICIPACIÓN:** póster

**CONGRESO:** Advanced Metallization Conference (AMC) 2002

**PUBLICACIÓN:** **Proc. of Advanced Metallization Conference (AMC) 2002, Ed. MRS, p.409-413.**

**LUGAR DE CELEBRACIÓN:** San Diego, California, USA

**AÑO:** Octubre 1-3, 2002

---

**20. AUTORES/AS:** **A. Cabañas**, J. Blackburn, E. Hund, M. Ingall and J.J. Watkins

**TÍTULO:** Conformal Deposition of Device Quality Films within Sub-100 nm Features from Supercritical CO<sub>2</sub>

**TIPO DE PARTICIPACIÓN:** oral

**CONGRESO:** AIChE 2002

**LUGAR DE CELEBRACIÓN:** Indianápolis, Indiana, USA

**AÑO:** Noviembre 3-8, 2002

---



---

\***21.** AUTORES/AS: **A. Cabañas**, Y. Zong and J.J. Watkins  
TITULO: Chemical fluid Deposition of Metals from Supercritical Fluids  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: oral  
CONGRESO: 6<sup>th</sup> International Symposium on Supercritical Fluids  
PUBLICACIÓN: **Proc. of 6<sup>th</sup> International Symposium on Supercritical Fluids, Ed. ISASF, CD-rom**  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Versalles, Francia  
AÑO: Abril 28-30, 2003

---

**22.** AUTORES/AS: E. Pérez Velilla, Y. Sánchez Vicente, **A. Cabañas** y J.A.R. Renuncio  
TITULO: Aprovechamiento de los productos naturales presentes en los residuos de las frutas con huesos (melocotón, albaricoque y ciruela)  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster  
CONGRESO: 1<sup>a</sup> reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid, España  
AÑO: Noviembre 12-14, 2003.

---

\***23.** AUTORES/AS: **A. Cabañas**, J.J. Watkins, M. Poliakoff, C. Pando y J.A.R. Renuncio  
TITULO: Fluidos Supercríticos: Aplicaciones en catálisis y microelectrónica  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: oral  
CONGRESO: 1<sup>a</sup> reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid, España  
AÑO: Noviembre 12-14, 2003

---

**24.** AUTORES/AS: **A. Cabañas**, E. Enciso, M.C. Carbajo, M.J. Torralvo, C. Pando y J.A.R. Renuncio  
TITULO: Effect of supercritical carbon dioxide on the ordering and aggregation of polystyrene latex particles  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster  
CONGRESO: 7th Italian Conference on Supercritical Fluids and Their Applications. 9th Meeting on Supercritical Fluids  
PUBLICACIÓN: **Proc. of 7th Italian Conference on Supercritical Fluids and Their Applications. 9th Meeting on Supercritical Fluids, Ed. ISASF, CD-rom**  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Trieste, Italia  
AÑO: Junio 13-16, 2004.

---

---

\*25. AUTORES/AS: **A. Cabañas**, E. Enciso, M.C. Carbajo, M.J. Torralvo, C. Pando y J.A.R. Renuncio

TITULO: Fabricación de materiales cerámicos macroporosos estructurados en fluidos supercríticos

TIPO DE PARTICIPACIÓN: oral

CONGRESO: 1º Simposio de Jóvenes Investigadores RSEQ-Sigma-Aldrich

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid, España

AÑO: 16-17 Noviembre, 2004.

---

26. AUTORES/AS: **A. Cabañas**, E. Enciso, M.C. Carbajo, M.J. Torralvo, C. Pando y J.A.R. Renuncio

TITULO: Synthesis of macroporous SiO<sub>2</sub> in supercritical CO<sub>2</sub> using 3D-latex array templates

TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster

CONGRESO: WS16: New Opportunities in Material Science: From Nano-objects to Complex Materials

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid, España

AÑO: 16-17 Febrero, 2005.

---

27. AUTORES/AS: Y.Sánchez-Vicente, E. Pérez, **A. Cabañas**, C. Pando, J. S. Urieta y J.A.R. Renuncio

TITULO: Excess Molar Enthalpies of CO<sub>2</sub> + 1,8-Cineole at Supercritical Conditions

TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster

CONGRESO: International Symposium on Supercritical Fluids ISSF 2005

PUBLICACIÓN: **Proc. of International Symposium on Supercritical Fluids ISSF 2005, CD-rom**

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Orlando, Florida (USA)

AÑO: 1-4 Mayo, 2005.

---

\*28. AUTORES/AS: **A. Cabañas**, E. Enciso, M.C. Carbajo, M.J. Torralvo, C. Pando y J.A.R. Renuncio

TITULO: 3D-latex Array Templated Synthesis of Macroporous SiO<sub>2</sub> in Supercritical CO<sub>2</sub>

TIPO DE PARTICIPACIÓN: oral

CONGRESO: International Symposium on Supercritical Fluids ISSF 2005

PUBLICACIÓN: **Proc. of International Symposium on Supercritical Fluids ISSF 2005, CD-rom**

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Orlando, Florida (USA)

AÑO: 1-4 Mayo, 2005.

---

---

**29. AUTORES/AS:** Y. Sánchez-Vicente, E. Pérez, **A. Cabañas**, C. Pando, J.S. Urieta y J.A.R. Renuncio

**TITULO:** Entalpías molares de exceso de las mezclas de CO<sub>2</sub> supercrítico y 1,8-cineole.

**TIPO DE PARTICIPACIÓN:** póster

**CONGRESO:** 2ª reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).

**LUGAR DE CELEBRACIÓN:** Valladolid (España)

**AÑO:** 19-21 Octubre 2005.

---

**30. AUTORES/AS:** E. Pérez, Y. Sánchez-Vicente, **A. Cabañas**, C. Pando y J.A.R. Renuncio

**TITULO:** Celda de observación de volumen variable para la medida del equilibrio de fases a alta presión.

**TIPO DE PARTICIPACIÓN:** póster

**CONGRESO:** 2ª reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).

**LUGAR DE CELEBRACIÓN:** Valladolid (España)

**AÑO:** 19-21 Octubre 2005.

---

**\*31. AUTORES/AS:** **A. Cabañas**, E. Enciso, M.C. Carbajo, M.J. Torralvo, C. Pando y J.A.R. Renuncio

**TITULO:** Fabricación de materiales cerámicos macroporosos estructurados en fluidos supercríticos.

**TIPO DE PARTICIPACIÓN:** oral

**CONGRESO:** 2ª reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).

**LUGAR DE CELEBRACIÓN:** Valladolid (España)

**AÑO:** 19-21 Octubre 2005.

---

**\*32. AUTORES/AS:** **A. Cabañas**, J. Li, P. Blood, E. Lester, M. Poliakoff.

**TITULO:** Fabricación de nanopartículas de granate de itrio y aluminio (YAG) en agua supercrítica.

**TIPO DE PARTICIPACIÓN:** oral

**CONGRESO:** II Simposio de Jóvenes Investigadores RSEQ-Sigma-Aldrich

**LUGAR DE CELEBRACIÓN:** Ciudad Real

**AÑO:** 22-25 Noviembre, 2005

---

---

\*33. AUTORES/AS: **A. Cabañas**, E. Enciso, M.C. Carbajo, M.J. Torralvo, C. Pando y J.A.R. Renuncio

TITULO: Synthesis of silica aerogel inverse opals in supercritical CO<sub>2</sub>.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Oral

CONGRESO: 1<sup>st</sup> Workshop on In-Situ Study and Development of Processes Involving Porous Solids

LUGAR DE CELEBRACIÓN: La Grande Motte (Francia)

AÑO: 19-23 Marzo 2006.

---

34. AUTORES/AS: Y. Sánchez-Vicente, E. Pérez, **A. Cabañas**, C. Pando y J.A.R. Renuncio

TITULO: Supercritical CO<sub>2</sub> as a green solvent for essential oil components (1,8-cineole, limonene and citral).

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Oral

CONGRESO: Chemistry and Sustainable Development. 6th ANQUE International Congress of Chemistry

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Puerto de la Cruz, Tenerife (España)

AÑO: 5-7 Diciembre (2006).

---

35. AUTORES/AS: E. Pérez, **A. Cabañas**, Y. Sánchez-Vicente, C. Pando y J.A.R. Renuncio

TITULO: High-pressure phase behaviour of the CO<sub>2</sub> + dibenzofuran system

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster

CONGRESO: Chemistry and Sustainable Development. 6th ANQUE International Congress of Chemistry

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Puerto de la Cruz, Tenerife (España)

AÑO: 5-7 Diciembre (2006).

---

36. AUTORES/AS: Y. Sánchez-Vicente, E. Pérez, **A. Cabañas**, J.A.R. Renuncio and C. Pando.

TITULO: Excess molar enthalpies for Mixture of Supercritical CO<sub>2</sub> and Linalool.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster

CONGRESO: V International Symposium on High-Pressure Processes Technology and Chemical Engineering.

PUBLICACIÓN: **Proc. of V International Symposium on High-Pressure Processes Technology and Chemical Engineering, CD-rom**

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Segovia (España)

AÑO: 24-27 Junio (2007).

---

---

**37. AUTORES/AS:** E. Pérez, A. Cabañas, Y. Sánchez-Vicente, J.A.R. Renuncio y C. Pando  
**TÍTULO:** High-Pressure Phase behaviour for the Binary System Carbon Dioxide + Dibenzofuran.  
**TIPO DE PARTICIPACIÓN:** Oral  
**CONGRESO:** V International Symposium on High-Pressure Processes Technology and Chemical Engineering.  
**PUBLICACIÓN:** **Proc. of V International Symposium on High-Pressure Processes Technology and Chemical Engineering, CD-rom**  
**LUGAR DE CELEBRACIÓN:** Segovia (España)  
**AÑO:** 24-27 Junio (2007).

---

**38. AUTORES/AS:** A. Cabañas, E. Enciso, M.C. Carbajo, M.J. Torralvo, C. Pando and J.A.R. Renuncio  
**TÍTULO:** Making Structured Porous Materials using Supercritical Fluids  
**TIPO DE PARTICIPACIÓN:** Póster  
**CONGRESO:** V International Symposium on High-Pressure Processes Technology and Chemical Engineering.  
**PUBLICACIÓN:** **Proc. of V International Symposium on High-Pressure Processes Technology and Chemical Engineering, CD-rom**  
**LUGAR DE CELEBRACIÓN:** Segovia (España)  
**AÑO:** 24-27 Junio (2007).

---

**39. AUTORES/AS:** Y. Sánchez-Vicente, E. Pérez, A. Cabañas, J.A.R. Renuncio and C. Pando.  
**TÍTULO:** Supercritical Fluid Extraction of peach (*Prunus Persica*) seeds.  
**TIPO DE PARTICIPACIÓN:** Póster  
**CONGRESO:** 11<sup>th</sup> European Meeting on Supercritical Fluids. New Perspectives in Supercritical Fluids: Nanoscience, Materials and Processing.  
**PUBLICACIÓN:** **Proc. of 11<sup>th</sup> European Meeting on Supercritical Fluids, Ed. ISASF, CD-rom**  
**LUGAR DE CELEBRACIÓN:** Barcelona, (España)  
**AÑO:** Mayo 4-7, 2008.

---

---

**40.** AUTORES/AS: V. Salazar, Y. Sánchez-Vicente, **A. Cabañas**, J.A.R. Renuncio and C. Pando.

TITULO: Enthalpies of absorption of carbon dioxide in aqueous sodium glycinate solutions

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster

CONGRESO: 11<sup>th</sup> European Meeting on Supercritical Fluids. New Perspectives in Supercritical Fluids: Nanoscience, Materials and Processing.

PUBLICACIÓN: **Proc. of 11<sup>th</sup> European Meeting on Supercritical Fluids, Ed. ISASF, CD-rom**

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona, (España)

AÑO: Mayo 4-7, 2008.

---

**\*41.** AUTORES/AS: **A. Cabañas**, M.J. Tenorio, E. Enciso, M.C. Carbajo, M.J. Torralvo, C. Pando y J.A.R. Renuncio

TITULO: Synthesis of Pd-SiO<sub>2</sub> aerogel inverse opals in Supercritical CO<sub>2</sub>

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Oral- Key Note**

CONGRESO: 11<sup>th</sup> European Meeting on Supercritical Fluids. New Perspectives in Supercritical Fluids: Nanoscience, Materials and Processing.

PUBLICACIÓN: **Proc. of 11<sup>th</sup> European Meeting on Supercritical Fluids, Ed. ISASF, CD-rom**

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona, (España)

AÑO: Mayo 4-7, 2008.

---

**42.** AUTORES/AS: C. Pando, J.A.R. Renuncio y **A. Cabañas**,

TITULO: Excess molar enthalpies for mixtures involved in supercritical fluid applications

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Oral- Conferencia invitada**

CONGRESO: CALCON 2008, 63rd Calorimetry Conference

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Jersey City, New Jersey, (Estados Unidos)

Libro de Resúmenes, pag. 46, 2-6

AÑO: Julio, 2008.

---

**43.** AUTORES/AS: **A. Cabañas**, D. Tonti, E. Enciso, J. Sanz, M.J. Torralvo

TITULO: Ordered Porous Oxides: Synthesis and properties

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Oral- Conferencia invitada**

CONGRESO: XVII Internacional Materials Research Congress (IMRC), VII Congreso of Nace Internacional (Section México)

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Cancún, (México)

AÑO: 17-21 Agosto, 2008.

---

---

**44. AUTORES/AS:** C. Pando, J.A.R. Renuncio y **A. Cabañas**

TITULO: Laboratorio de Equilibrio de Fases y Fluidos Supercríticos.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: oral

CONGRESO: 3ª reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid (España)

AÑO: 5-6 Febrero 2009.

---

**45. AUTORES/AS:** Y. Sánchez-Vicente, **A. Cabañas**, C. Pando y J.A.R. Renuncio

TITULO: Efectos energéticos de las mezclas CO<sub>2</sub> supercrítico + citral en la extracción y fraccionamiento de aceites esenciales de cítricos.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster

CONGRESO: 3ª reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid (España)

AÑO: 5-6 Febrero 2009.

---

**46. AUTORES/AS:** M.J. Tenorio, **A. Cabañas**, M.J. Torralvo, E. Enciso, C. Pando y J.A.R. Renuncio

TITULO: CO<sub>2</sub> Supercrítico como medio de reacción e impregnación en la síntesis de ópalos inversos de Pd – SiO<sub>2</sub>.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster

CONGRESO: 3ª reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid (España)

AÑO: 5-6 Febrero 2009.

---

**47. AUTORES/AS:** J. Morere, J.A.R. Renuncio, **A. Cabañas**, C. Pando

TITULO: Efecto del calor del mezcla CO<sub>2</sub> supercrítico + disolvente orgánico en la micronización por agente antidisolvente (SAS)

TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster

CONGRESO: 3ª reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid (España)

AÑO: 5-6 Febrero 2009.

---

**48. AUTORES/AS:** M.J. Tenorio, C.Pando, J.A.R. Renuncio y **A. Cabañas**

TITULO: Solubility in supercritical CO<sub>2</sub> of two precursors in the synthesis of metal-SiO<sub>2</sub> inverse opals: Pd(hfac)<sub>2</sub> and Ni(hfac)<sub>2</sub>

TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster

CONGRESO: 8th Green Chemistry Conference

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Zaragoza (España)

AÑO: 9-11 Septiembre 2009.

---

---

**49. AUTORES/AS:** C. Pando, A. Cabañas, F. Zahran, J. Morere y J.A.R. Renuncio  
**TITULO:** Entalpías Molares de Exceso de las mezclas CO<sub>2</sub> + disolvente orgánico polar utilizadas en las micronizaciones SAS.  
**TIPO DE PARTICIPACIÓN:** oral  
**CONGRESO:** 4ª reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).  
**PUBLICACIÓN:** Proc. 4ª reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos  
**LUGAR DE CELEBRACIÓN:** Ciudad Real (España)  
**AÑO:** 10-12 Febrero 2010.

---

**50. AUTORES/AS:** M.J. Tenorio, A. Cabañas, C. Pando y J.A.R. Renuncio  
**TITULO:** Efecto del cosolvente etanol en la solubilidad de Ni(hfac)<sub>2</sub> en CO<sub>2</sub> supercrítico.  
**TIPO DE PARTICIPACIÓN:** póster  
**CONGRESO:** 4ª reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).  
**LUGAR DE CELEBRACIÓN:** Ciudad Real (España)  
**AÑO:** 10-12 Febrero 2010.

---

**51. AUTORES/AS:** F. Zahran, C. Pando, A. Cabañas y J.A.R. Renuncio  
**TITULO:** Sistema CO<sub>2</sub> + acetona: propiedades termodinámicas en las condiciones de presión y temperatura utilizadas en la micronización SAS  
**TIPO DE PARTICIPACIÓN:** póster  
**CONGRESO:** 4ª reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).  
**LUGAR DE CELEBRACIÓN:** Ciudad Real (España)  
**AÑO:** 10-12 Febrero 2010.

---

**52. AUTORES/AS:** J. Morere, M.J. Tenorio, M.J. Torralvo, E. Enciso, C. Pando, J.A.R. Renuncio y A. Cabañas  
**TITULO:** Deposición de Pd sobre materiales estructurados utilizando CO<sub>2</sub> supercrítico  
**TIPO DE PARTICIPACIÓN:** póster (premiado como mejor póster)  
**CONGRESO:** 4ª reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).  
**LUGAR DE CELEBRACIÓN:** Ciudad Real (España)  
**AÑO:** 10-12 Febrero 2010.

---

**\*53. AUTORES/AS:** J. Morere, M.J. Tenorio, M.J. Torralvo, C. Pando, J.A.R. Renuncio y **A. Cabañas**  
**TITULO:** Deposition of Pd into mesoporous Silica SBA-15 using supercritical Carbon Dioxide  
**TIPO DE PARTICIPACIÓN:** oral  
**CONGRESO:** II Iberoamerican conference on Supercritical Fluids –II PROSCIBA  
**PUBLICACIÓN:** Proc. II Iberoamerican conference on Supercritical Fluids CD-rom  
**LUGAR DE CELEBRACIÓN:** Natal (Brasil)  
**AÑO:** 5-9 Abril 2010.

---



---

**54. AUTORES/AS:** C. Pando, **A. Cabañas**, F. Zahran, J. Morere, J.A.R. Renuncio  
TITULO: Excess molar enthalpies for the CO<sub>2</sub> + organic polar solvent mixtures involved in SAS micronizations.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: oral  
CONGRESO: 9th Conference on Supercritical Fluids and Their Applications  
PUBLICACIÓN: Proc. 9th Conference on Supercritical Fluids and Their Applications (pg. 183-186)  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Sorrento (Italia)  
AÑO: 5-8 Septiembre 2010.

---

**55. AUTORES/AS:** J.C. Cabrillo, E. Enciso, M. J. Capitan, **A. Cabañas**, M. J. Torralvo, J. Alvarez and F. J. Bermejo  
TITULO: “A Novel real Space Scattering Theory: Efficient Characterization of Colloidal Crystals”,  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: oral  
CONGRESO: XIV International Conference on Small-Angle Scattering (SAS09) Conference  
PUBLICACIÓN: Journal of Physics: Conference Series Pages: 012012 (13 pp.) 2010  
LUGAR: Oxford, U.K.  
AÑO: 13-18 Sep 2009.

---

**56. AUTORES/AS:** C. Pando, J.A.R. Renuncio, **A. Cabañas**, F. Zahran and J. Morere  
TITULO: “Interaction of excess enthalpies and phase equilibria during supercritical antisolvent (SAS) precipitation”,  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster  
CONGRESO: 25<sup>th</sup> European Symposium on Applied Thermodynamics  
LUGAR: Saint Petersburg, Russia  
AÑO: 24-27 June 2011.

---

**57. AUTORES/AS:** M.J. Tenorio, J. Morere, M.J. Torralvo, C. Pando, J.A.R. Renuncio y **A. Cabañas**  
TITULO: Adsorción de Pd(hfac)<sub>2</sub> sobre soportes mesoporosos en scCO<sub>2</sub> y su aplicación en la síntesis de materiales compuestos.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: oral  
CONGRESO: 5<sup>a</sup> reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Burgos (España)  
AÑO: 15-17 Junio 2011.

---

**58. AUTORES/AS:** C. Pando, F. Zahran, **A. Cabañas** y J.A.R. Renuncio  
TITULO: Entalpías de exceso de CO<sub>2</sub> + acetato de etilo en las condiciones de P y T de las micronizaciones SAS  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster  
CONGRESO: 5<sup>a</sup> reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Burgos (España)  
AÑO: 15-17 Junio 2011.

---

---

**59. AUTORES/AS:** J. Morere, C. Pando, J.A.R. Renuncio y **A. Cabañas**

TITULO: Estudio de la solubilidad de precursores de Ru en CO<sub>2</sub> supercrítico.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster

CONGRESO: 5ª reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Burgos (España)

AÑO: 15-17 Junio 2011.

---

**60. AUTORES/AS:** M.J. Tenorio, F. Zahran, J. Morere, **A. Cabañas**, C. Pando and J.A.R. Renuncio

TITULO: Application of supercritical carbon dioxide as green solvent in material micronization and metal deposition on solid substrates.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster

CONGRESO: 9<sup>th</sup> Green Chemistry Conference

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Alcalá de Henares, Madrid (España)

AÑO: 14-16 Sep. 2011.

---

**61. AUTORES/AS:** M.J. Tenorio, J. Morere, M.J. Torralvo, C. Pando, J.A.R. Renuncio and **A. Cabañas**

TITULO: Adsorption of Pd(hfac)<sub>2</sub> on mesoporous SiO<sub>2</sub> SBA-15 using supercritical CO<sub>2</sub> and its role in catalyst preparation.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: oral

CONGRESO: 13<sup>th</sup> European Meeting on Supercritical Fluids

PUBLICACIÓN: **Proc. 13<sup>th</sup> Conference on Supercritical Fluids (pg. XX-XX)**

LUGAR DE CELEBRACIÓN: The Hague (The Netherlands)

AÑO: 9-12 October 2011.

---

**62. AUTORES/AS:** F. Zahran, **A. Cabañas**, J.A.R: Renuncio, C. Pando

TITULO: Amorfización de un fármaco poco soluble por coprecipitación SAS con un polímero biocompatible

TIPO DE PARTICIPACIÓN: oral

CONGRESO: 6ª reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid (España)

AÑO: 28-29 Junio 2012.

---

**63. AUTORES/AS:** F. Zahran, D. Martín, **A. Cabañas**, J.A.R: Renuncio, C. Pando

TITULO: Micronización por agente supercrítico antisolvente (SAS) del 5-Fluorouracilo y coprecipitación con PVP.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster

CONGRESO: 6ª reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid (España)

AÑO: 28-29 Junio 2012.

---

---

**64.** AUTORES/AS: M.J. Tenorio, **A. Cabañas**, C. Pando, J.A.R: Renuncio  
TITULO: Síntesis de materiales nanoestructurados metal-soporte en scCO<sub>2</sub>: solubilidad, adsorción, descomposición del precursor y test catalítico.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster  
CONGRESO: 6ª reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid (España)  
AÑO: 28-29 Junio 2012.

---

**65.** AUTORES/AS: J. Morere, **A. Cabañas**, E. Enciso, M.J. Torralvo, C. Pando, J.A.R: Renuncio  
TITULO: Deposición de rutenio sobre soportes porosos utilizando CO<sub>2</sub> supercrítico..  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster  
CONGRESO: 6ª reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid (España)  
AÑO: 28-29 Junio 2012.

---

**\*66.** AUTORES/AS: **A. Cabañas**, J. Morere, M.J. Tenorio, C. Pando, J.A.R. Renuncio  
TITULO: Metal Deposition on Porous Supports Using Supercritical CO<sub>2</sub>  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Oral- Conferencia invitada**  
CONGRESO: 3<sup>rd</sup> International Solvothermal and Hydrothermal Association (ISHA) Conference,  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Austin, Texas (USA)  
AÑO: January 13-17, 2013

---

**67.** AUTORES/AS: Y. Sánchez-Vicente, C. Pando, J.A.R. Renuncio and **A. Cabañas**  
TITULO: Silanization of silica SBA-15 using Supercritical Carbon Dioxide  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: póster  
CONGRESO: 3<sup>rd</sup> International Solvothermal and Hydrothermal Association (ISHA) Conference,  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Austin, Texas (USA)  
AÑO: January 13-17, 2013

---

**68.** AUTORES/AS: S. Royuela, J. Morere, C. Pando, J.A.R. Renuncio, **A. Cabañas**,  
TITULO: "Deposition of metal nanoparticles into porous supports using supercritical CO<sub>2</sub>"  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster  
CONGRESO: 10th Conference on Supercritical Fluids and Their Applications  
PUBLICACIÓN: Proc. 10th Conference on Supercritical Fluids and Their Applications  
Libro de Resúmenes, pag. 307-308. ISBN 88-7897-061-1  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Nápoles, Italia,  
AÑO: 29 abril-6 mayo (2013).

---

**69.** AUTORES/AS: S F. Zahran, **A. Cabañas**, J.A.R. Renuncio, C. Pando  
TITULO: "SAS micronization of 5-fluoruracil and diflunisal and coprecipitation with polyvinylpyrrolidone"  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Oral  
CONGRESO: 10th Conference on Supercritical Fluids and Their Applications  
PUBLICACIÓN: Proc. 10th Conference on Supercritical Fluids and Their Applications  
Libro de Resúmenes, pag. 175-178. ISBN 88-7897-061-1  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Nápoles, Italia,  
AÑO: 29 abril-6 mayo (2013).

---

**\*70.** AUTORES/AS: A. Cabañas, J. Morere, M.J. Tenorio, S. Royuela, C. Pando  
TITULO: "Strategies to deposit metal nanoparticles into porous supports from supercritical CO<sub>2</sub> solutions"  
TIPO DE PARTICIPACIÓN. **Oral- conferencia invitada**  
CONGRESO: "Sustainable Manufacturing of Nanomaterials and their Organization for Hybrid Device Structures" (SMNOHDS 2013)  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Ile d'Oléron, France.  
AÑO: June 11-14 (2013).

---

**71.** AUTORES/AS: Y. Sánchez-Vicente, C. Pando and **A. Cabañas**  
TITULO: "Surface Modification of Mesoporous Silica SBA-15 with Aminosilanes Using Supercritical Carbon Dioxide"  
TIPO DE PARTICIPACIÓN. Oral  
CONGRESO: 6th International Conference on Green and Sustainable Chemistry, GSC-6  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Nottingham, United Kingdom.  
AÑO: August 4-7(2013).

---

**\*72.** AUTORES/AS: **A. Cabañas**, J. Morère, M.J. Torralvo, M.J. Tenorio, C. Pando, J.A.R. Renuncio  
TITULO: "Deposition of Metal Nanoparticles into Porous Supports Using Supercritical CO<sub>2</sub>"  
TIPO DE PARTICIPACIÓN. Oral  
CONGRESO: NANOSPAIN 2014  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid (Spain)  
AÑO: March 11-14 (2014).

---

**73.** AUTORES/AS: J. Morère, **A. Cabañas**, C. Pando, J.A.R. Renuncio

TITULO: Deposition of Ru and Ni Nanoparticles into Porous Supports Through Impregnation and Reaction of Organic and Inorganic Salts in Supercritical CO<sub>2</sub>”

TIPO DE PARTICIPACIÓN. Oral

CONGRESO: 14<sup>th</sup> European Meeting on Supercritical Fluids

PUBLICACIÓN: Proc. 14<sup>th</sup> European Meeting on Supercritical Fluids

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Marsella (Francia)

AÑO: Mayo 18-21 (2014).

---

**74.** AUTORES/AS: O. Alonso-Pastor, C. Pando, **A. Cabañas** and Yolanda Sánchez-Vicente

TITULO: Phase Behaviour of Two Binary Systems Formed by CO<sub>2</sub> and a Silane Precursor: N-[3-(Trimethoxysilyl)Propyl]Aniline and (3-Mercaptopropyl)Trimethoxysilane

TIPO DE PARTICIPACIÓN. Póster

CONGRESO: 14<sup>th</sup> European Meeting on Supercritical Fluids

PUBLICACIÓN: Proc. 14<sup>th</sup> European Meeting on Supercritical Fluids

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Marsella (Francia)

AÑO: Mayo 18-21 (2014).

---

**75.** AUTORES/AS: J. Morère, G. Asensio, **A. Cabañas**, C. Pando y J.A.R. Renuncio

TITULO: “Deposición de nanopartículas de Ru and Ni sobre soportes porosos utilizando CO<sub>2</sub> Supercrítico”

TIPO DE PARTICIPACIÓN. Oral

CONGRESO: 7<sup>a</sup> reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).

PUBLICACIÓN: .

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona (España)

AÑO: Junio 10-13 (2014).

---

**76.** AUTORES/AS: I. Cuadra, **A. Cabañas**, C. Pando y J.A.R. Renuncio

TITULO: Preparación de micropartículas de 5-Fluorouracilo y PLLA usando CO<sub>2</sub> como agente supercrítico antidisolvente

TIPO DE PARTICIPACIÓN. Póster

CONGRESO: 7<sup>a</sup> reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona (España)

AÑO: Junio 10-13 (2014).

---

**77. AUTORES/AS:** **A. Cabañas**, C. Pando, Y. Sánchez-Vicente, J. Morere and I. Cuadra  
TITULO: Preparación de nanomateriales en CO<sub>2</sub> supercrítico con aplicaciones en catálisis, captura de carbono y farmacología.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN. Póster  
CONGRESO: Jornadas Aportando Valor al CO<sub>2</sub>  
PUBLICACIÓN:  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid (España)  
AÑO: Febrero 17-18 (2015).

---

**78. AUTORES/AS:** C. Pando, I. Cuadra, **A. Cabañas**, J.A.R. Cheda, J.A.R. Renuncio  
TITULO: "A solution co-crystallization method based on using supercritical CO<sub>2</sub> as an antisolvent"  
TIPO DE PARTICIPACIÓN. Comunicación oral  
CONGRESO: 41st Conference on Phase Equilibria (JEEP2015)  
PUBLICACIÓN: Proc. 41st Conference on Phase Equilibria pag. 56  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Coimbra (Portugal)  
AÑO: 25-27 Marzo (2015).

---

**\*79. AUTORES/AS:** **A. Cabañas**  
TITULO: Synthesis of Nanostructured Materials Using Supercritical CO<sub>2</sub>.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN. **Oral - conferencia invitada**  
CONGRESO: "Supercritical fluids - green solvents for green chemistry?" Scientific Discussion Meeting organized by the Royal Society London  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Londres (Reino Unido)  
AÑO: Abril 13-14 (2015).

---

**80. AUTORES/AS:** C. Pando, **A. Cabañas**, Y. Sánchez-Vicente, J.A.R. Renuncio  
TÍTULO: Green Chemistry applications of supercritical CO<sub>2</sub> in the preparation of nanomaterials  
CONGRESS: 8º Simposio Internacional de Química en Micoescala y 5º Taller Internacional de Química Verde  
TIPO DE PARTICIPACIÓN. Comunicación invitada  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: México DF (México)  
AÑO: 27-29 Mayo (2015).

---

**81. AUTORES/AS:** I. Cuadra, **A. Cabañas**, C. Pando, J.A.R. Renuncio  
TITULO: Obtención de cristales farmacéuticos mediante precipitación SAS. Póster  
CONGRESO: 8ª reunión de expertos en tecnologías de fluidos comprimidos (FLUCOMP).  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Cádiz (España)  
AÑO: Septiembre 16-18 Septiembre (2015).

---

\*82. AUTORES/AS: J. Morère, E. Sánchez-Miguel, C. Pando, J.A.R. Renuncio, **A. Cabañas\***

TÍTULO: Application of Supercritical CO<sub>2</sub> as a Green Solvent in Catalyst Preparation

CONGRESS: “2nd EUChemMS Congress on Green and Sustainable Chemistry”

TIPO DE PARTICIPACIÓN. Oral

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lisboa (Portugal)

AÑO: 4-7 Octubre del 2015

---

\*83. AUTORES/AS: J. Morère, E. Sánchez-Miguel, C. Pando, J.A.R. Renuncio, **A. Cabañas\***

TÍTULO: Deposition of Metal Nanoparticles into Porous Supports for Catalytic Applications Using Supercritical CO<sub>2</sub>-L304

CONGRESS: “11<sup>th</sup> International Symposium on Supercritical Fluids”

TIPO DE PARTICIPACIÓN. Oral

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Seúl (Corea)

AÑO: 11-14 Octubre del 2015

---

84. AUTORES/AS: C.Prieto, L. Calvo, **A. Cabañas**, C. Pando and Catarina Duarte

TÍTULO: Performance comparison of different supercritical fluid extraction equipments for nanoparticles production by SFEE

CONGRESS: 15th European Meeting on Supercritical Fluids

PUBLICACIÓN: Proceedings 15<sup>th</sup> European Meeting on Supercritical Fluids

TIPO DE PARTICIPACIÓN. Oral

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Essen (Alemania)

AÑO: 8-11 Mayo del 2016

De los congresos en los que la Porf. Cabañas es coautora se destacan aquellos en los que la solicitante han realizado presentaciones orales (\*). También se señalan algunos Proceedings de congresos que no se reseñaron en el apartado de publicaciones periódicas.

---

## **Trabajos de investigación dirigidos**

### **Tesis de Licenciatura**

Título: Studienarbeit- “Messung von Exzeßenthalpien des Systems Olivenöl / Kohlendioxid unter überkritischen Bedingungen

Doctorando: Dagmar Mock

Universidad: Universidad Complutense- Technische Universität Hamburg-Harburg

Facultad / Escuela: Ingeniería Química- (Verfahrenstechnik)

Fecha: 1997-1998

### **Tesis doctorales y Másteres:**

Título: “Equilibrio de fases y solubilidades en fluidos supercríticos”

Doctorando: Eduardo Pérez Velilla.

Directores: Concepción Pando y **Albertina Cabañas**

Universidad: Universidad Complutense

Facultad / Escuela: Químicas

Fecha: 1/02/2008. **Calificación Sobresaliente Cum Laude, Mención Europea y Premio extraordinario de doctorado 2009.**

Título: “Extracción supercrítica de aceites esenciales. Propiedades de las mezclas CO<sub>2</sub> + terpeno”

Doctorando: Yolanda Sánchez Vicente.

Directores: Concepción Pando, Juan Antonio Rodríguez Renuncio y **Albertina Cabañas**

Universidad: Universidad Complutense

Facultad / Escuela: Químicas

Fecha: 29/04/2008. **Calificación Sobresaliente Cum Laude**

Título: “Síntesis de materiales cerámicos porosos nano-estructurados metal-soporte en CO<sub>2</sub> supercrítico”

Doctorando: María José Tenorio Serrano.

Directores **Albertina Cabañas** y Concepción Pando

Universidad: Universidad Complutense

Facultad / Escuela: Químicas

Fecha: 20/12/2012. **Calificación Sobresaliente Cum Laude**

Título: “Microparticles Precipitation using supercritical CO<sub>2</sub> as an Antisolvent. Role of Thermal Effects and Phase Equilibria” (Precipitación de micropartículas en CO<sub>2</sub> por efecto antidisolvente. Efectos energéticos y del equilibrio de fases)

Doctorando: Fouad Zahran.

Directores Concepción Pando y **Albertina Cabañas**.

Universidad: Universidad Complutense

Facultad / Escuela: Químicas

Fecha: 29/05/2012. **Calificación Sobresaliente Cum Laude**



Título: “Síntesis de nanoestructuras de Ru, Ni y Pt sobre soportes porosos utilizando CO<sub>2</sub> supercrítico”

Doctorando: Jacobo Morère Rodríguez.

Directora **Albertina Cabañas**

Universidad: Universidad Complutense

Facultad / Escuela: Químicas

Fecha: 18/12/2015. **Calificación Sobresaliente Cum Laude**

Título: “Micronización de fármacos en CO<sub>2</sub> supercrítico por efecto Antidisolvente”

Doctorando: Issac Alfonso Cuadra Mendoza.

Directora **Albertina Cabañas** y Concepción Pando

Universidad: Universidad Complutense

Facultad / Escuela: Químicas

Fecha: En realización

### **Trabajos Final de Máster (TFM):**

Título: “Introducción a la investigación en nano-ciencia y nano-materiales: Fabricación de Materiales en Fluidos Supercríticos”

Doctorando: Jacobo Morère Rodríguez.

Directores **Albertina Cabañas** y Concepción Pando

Universidad: Universidad Complutense

Facultad / Escuela: Químicas

**Máster Ciencia y Tecnologías Químicas** presentado en Julio 2011. **Sobresaliente (9.0)**

Título: “Preparación de nanopartículas bimetálicas soportadas utilizando CO<sub>2</sub> supercrítico

Estudiante: Elizabeth Sánchez Miguel

Directores **Albertina Cabañas**

Universidad: Universidad Complutense

Facultad / Escuela: Químicas

**Máster Nanofísica- TFM** presentado en Septiembre 2016. **Sobresaliente (9.4)**

Título: “Deposición de nanopartículas magnéticas de óxido de hierro sobre soportes porosos utilizando CO<sub>2</sub> supercrítico

Estudiante: Elena Chamorro Piazuelo

Directores **Albertina Cabañas** y Lourdes Calvo

Universidad: Universidad Complutense

Facultad / Escuela: Químicas

**Máster en Ingeniería Química: Ingeniería de Procesos**

**TFM** presentado en Febrero 2017. **Sobresaliente (9.4)**

Título: “Preparación de materiales compuestos metal/polímeros de aplicación en biomédica en CO<sub>2</sub> supercrítico”

Estudiante: Jonathan Bermudez Nuñez

Directores **Albertina Cabañas** y Lourdes Calvo

Universidad: Universidad Complutense

Facultad / Escuela: Químicas

**Máster en Ingeniería Química: Ingeniería de Procesos TFM en realización.**

**Trabajos Final de Licenciatura (TFL) y Grado (TFG):**

Título: “Deposición de metales sobre sustratos en Fluidos Supercríticos”

Estudiante: Sergio Royuela Collado.

Directores **Albertina Cabañas** y Concepción Pando

Universidad: Universidad Complutense

Facultad / Escuela: Químicas

Fecha: **Proyecto fin de carrera** presentado en Julio 2013. *Matrícula de Honor*

Título: “Solubilidad en CO<sub>2</sub> supercrítico de los precursores usados en la síntesis de materiales”

Estudiante: Oscar Alonso Pastor.

Directores: Concepción Pando, **Albertina Cabañas** y Yolanda Sánchez Vicente

Universidad: Universidad Complutense

Facultad / Escuela: Químicas

Fecha: **TFG** presentado en Julio 2014. *Sobresaliente*

Título: “Deposición de nanopartículas metálicas sobre soportes porosos utilizando fluidos supercríticos”

Estudiante: Guillermo Asensio Navas

Directores **Albertina Cabañas**, Concepción Pando

Universidad: Universidad Complutense

Facultad / Escuela: Químicas

Fecha: **TFG** presentado en Marzo 2015. *Sobresaliente*

Título: “Deposición de nanopartículas metálicas sobre soportes porosos utilizando fluidos supercríticos”

Estudiante: Elizabeth Sánchez Miguel

Directores **Albertina Cabañas**, Jacobo Morere

Universidad: Universidad Complutense

Facultad / Escuela: Químicas

Fecha: **TFG** presentado en Junio 2015. *Sobresaliente (9.1)*

ítulo: “Síntesis y estudio de los materiales porosos en los sistemas SnO<sub>2</sub>, SiO<sub>2</sub>/SnO<sub>2</sub>”

Doctorando: María Carraleda García

Directores M<sup>a</sup> José Torralvo, **Albertina Cabañas**

Universidad: Universidad Complutense

Facultad / Escuela: Químicas

Fecha: **TFG** presentado en Junio 2015. *Sobresaliente (9.0)*

Título: “Modificación de sílice mesoporosa SBA-15 para captura de CO<sub>2</sub> en fluidos supercríticos”

Estudiante: Cynthia Carnerero Avendaño

Directores **Albertina Cabañas**, Concepción Pando

Universidad: Universidad Complutense

Facultad / Escuela: Químicas

Fecha: **TFG** presentado en Septiembre 2015. *Notable (8.0)*

Título: “Solubilidad en CO<sub>2</sub> supercrítico de los precursores usados en síntesis y tratamiento de materiales”

Estudiante: Sonia Ginés Rivero

Directores **Albertina Cabañas**, Concepción Pando

Universidad: Universidad Complutense

Facultad / Escuela: Químicas

Fecha: **TFG** presentado en Junio 2016. *Notable (8.4)*

Título: “Preparación y estudio de óxidos porosos ordenados con microestructura de ópalo inverso”

Estudiante: Raquel Giménez Pérez

Directores **Albertina Cabañas**, María José Torralvo

Universidad: Universidad Complutense

Facultad / Escuela: Químicas

Fecha: **TFG** presentado en Junio 2016. *Sobresaliente (9.0)*

Título: “Solubilidad en CO<sub>2</sub> supercrítico de los precursores usados en síntesis y tratamiento de materiales”

Estudiante: Gemma Bermejo

Directores **Albertina Cabañas**, Concepción Pando

Universidad: Universidad Complutense

Facultad / Escuela: Químicas

Fecha: **TFG** presentado en Septiembre 2016. *Notable (8.0)*

Título: “Preparación y caracterización de soportes porosos para aplicaciones catalíticas”

Estudiante: Ana Blázquez Parras

Directores **Albertina Cabañas**, M<sup>a</sup> José Torralvo

Universidad: Universidad Complutense

Facultad / Escuela: Químicas

Fecha: **TFG** en realización.

Título: “Preparación y estudio de estructuras porosas en los sistemas SiO<sub>2</sub>/TiO<sub>2</sub> y SiO<sub>2</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>”

Estudiante: XX

Directores M<sup>a</sup> José Torralvo y **Albertina Cabañas**

Universidad: Universidad Complutense

Facultad / Escuela: Químicas

Fecha: **TFG** en realización.

---

### Participación en comités y representaciones internacionales

---

**Comité Científico del “11<sup>th</sup> European Meeting on Supercritical Fluids”** celebrado en Barcelona, (España), Mayo 4-7, 2008.

**Chairperson** en el 8<sup>th</sup> Green Chemistry Conference celebrado en Zaragoza (España) del 9-11 Septiembre 2009.

**Comité Científico del “6<sup>th</sup> Reunión de Expertos en Tecnologías con Fluidos Comprimidos FLUCOMP”** celebrado en Madrid, (España), Junio 28-29, 2012.

---

### Experiencia en organización de actividades de I+D

#### Organización de congresos, seminarios, jornadas, etc., científicos-tecnológicos

---

Título: **Ciclo de seminarios del Dpto Química- Física I de la Universidad Complutense de Madrid**

Tipo de actividad: Seminarios

Ambito: Universidad Complutense de Madrid

Fecha: Enero 2004-Diciembre 2008

Título: **3<sup>a</sup> Reunión de Expertos en Tecnologías con Fluidos Comprimidos** celebrada en la Universidad Complutense de Madrid.

Tipo de actividad: Congreso

Ambito: Nacional

Fecha: 5-6 Febrero 2009

## Otros méritos o aclaraciones que se desee hacer constar

### Premios y reconocimientos

Premio extraordinario de doctorado Universidad Complutense de Madrid 1998-1999.

Acreditada "Profesor Contratado Doctor" (ANECA), Abril 2004.

Habilitada "Profesor Titular de Universidad en Química-Física", BOE 17 Marzo 2007

TRES Sexenios de investigación reconocidos: 1994-1999, 2000-2005, 2006-2011.

Quinquenios docentes reconocidos. 2003-2007, 2008-2012

### Becas

Beca Colaboración del Ministerio de Educación y Ciencia 1991-1993 en el Dpto. Química-Física I, Facultad de C.C. Químicas, Universidad Complutense de Madrid.

Beca Erasmus ICP-93-E-1037/13, Octubre-Diciembre 1993, Facultad de Químicas, Universidad de Sheffield (Reino Unido).

Beca Predoctoral de la Universidad Complutense de Madrid, 1995-1998, Dpto. Química-Física I, Facultad de C.C. Químicas, Universidad Complutense de Madrid.

Beca Intercampus E./AL. 95, Agosto-Septiembre 1995, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe Argentina.

Beca de Intercambio Académico Universidad Complutense entre UCM-UNAM, Agosto-Noviembre 1996, Laboratorio de Termofísica, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), México D.F., México.

Beca OTAN para asistir al curso "II NATO ASI on Supercritical Fluids" celebrado en Kemer (Turquía) en Julio 1998.

Beca TMR-EU contrato nº ERBCHRXCT97-0104 de la Comunidad Económica Europea. Programa Marie-Curie, Enero-Diciembre 2000, Universidad de Nottingham, Reino Unido.

### Asistencia a cursos:

Julio 1994 Curso de verano de la UCM, "Estereodinámica vía láseres y haces moleculares", Almería (España).

Julio 1996 "Second International Workshop on Vapour-Liquid Equilibria and related properties in binary and ternary mixtures of Ether, Alkanes and Alkanols"., Valladolid (España).

Sept. 1996 "XI Coloquio Anual de Termodinámica", México D.F (México).

Julio 1998 "II NATO ASI on Supercritical Fluids", Kemer (Turquía).

Julio 2000 Curso intensivo Socrates on "High Pressure Technology in the Process and Chemical Industry" Valladolid (España).

Marzo 2105 Workshop "Breaking Diffraction Limits" UCM, Madrid 3-marzo-2105

### Actuación en Tribunales:

Tesis doctoral de Dña. M<sup>a</sup> Carmen Carbajo Moreno, "Materiales porosos periódicos modelados con partículas poliméricas", defendida en la Universidad Complutense de Madrid en Octubre 2004.

Tesis de Licenciatura en Ciencia y Tecnología de los Alimentos de Dña. Carmen Díaz Taboada, “Desactivación microbiana en productos alimentarios mediante CO<sub>2</sub> supercrítico”, defendida en la Universidad Complutense de Madrid el 10 de Febrero 2005.

Tesis doctoral de D. Juan García Serna, “Green Engineering Tools. Applications to Supercritical Fluids” (tesis con mención europea) defendida en la Universidad de Valladolid el 11 Julio 2005.

Tesis doctoral de Dña. Irene Montequi Merchán, “Proceso de síntesis de nanopartículas de TiO<sub>2</sub> anatasa en medio CO<sub>2</sub>-sc Estudio de las condiciones de operación sobre las propiedades del producto” defendida en Universidad de Valladolid el 24 de Sept. del 2007.

Tesis doctoral de Dña. Elena Taboada, “Synthesis of  $\gamma$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SiO<sub>2</sub> composite nanoparticles targeting magnetic resonante imaging and magnetic hyperthermia aplicaciones”, (tesis con mención europea) defendida en Universidad Autónoma de Barcelona el 23 de Septiembre del 2009.

Tesis doctoral de D. Alexander A. Novitskiy, “Continuous Methods for High Pressure Phae Measurement”, defendida en Universidad de Nottingham (Reino Unido) el 3 de Junio del 2010 (external examiner).

Tesis doctoral de D. Julián Antonio Restrepo Rodríguez “Desarrollo de materiales poliméricos multifuncionales nanoestructurados. Aplicaciones en Química Sostenible”, defendida en Universidad Jaume I, Castellón el 23 de Julio del 2010.

Tesis doctoral de D. Peter A. Bayliss, “Greener synthesis of metal-organic frameworks”, defendida en Universidad de Nottingham (Reino Unido) el 27 de Septiembre del 2013 (external examiner).

Tesis doctoral de D. Alvaro Sastre Cuadrillero, “Synthesis of supported catalysts of Co, Ni and Ru using supercritical CO<sub>2</sub> for biomass valorization reactions” (tesis con mención europea) defendida en la Universidad de Valladolid el 2 Julio 2015.

Tesis doctoral de D. Pablo Palomino Arenas, “Carbones y Xerogeles de Resorcinol-formaldehído: porosidad y aplicaciones” defendida en la Universidad Complutense de Madrid el 13 Julio 2015.

Tesis doctoral de D. Luis Miguel Sanz Moral, “Development of Functional Aerogels for Applications as catalysts and Hidrides” defendida en la Universidad de Valladolid el 8 de Noviembre 2016.

### **Seminarios impartidos:**

05-03-2004 “Fluidos supercríticos: Aplicaciones en catálisis y microelectrónica” Departamento de Química-Física I. Universidad Complutense de Madrid

1-04-2004 “Fluidos supercríticos: Aplicaciones en catálisis y microelectrónica” Departamento de Química-Física, Universidad Pablo de Olavide, Sevilla.

23-03-2007 “Fabricación de materiales en Fluidos supercríticos “Instituto de Catálisis y Petroleoquímica, CSIC, Madrid

4-12-2009 “Síntesis de materiales avanzados en fluidos supercríticos“, Facultad de Ciencias del Medio Ambiente, UCLM, Toledo.

26-06-2012 Curso de especialización en Fluidos Comprimidos, “Nanoestructuración y materiales porosos“, Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación (CIAL-CSIC), Madrid

7-11-2012 Coordinadora de la actividad divulgativa VII Semana de la Ciencia 2012, La paradoja del dióxido de carbono: Un problema medioambiental o un disolvente sostenible. Incluyendo dos charlas (impartidas por A. Cabañas y Y. Sánchez-Vicente) y una visita guiada al laboratorio.

29-04-2013 “Preparación de materiales nanoestructurados utilizando fluidos supercríticos“, Foro de Empresas, Ciencias y Tecnología de Materiales (FECYT) del “Materials Week 2013” ETS de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos, 26-30 Abril 2013.

7-11-2013 Coordinadora de la actividad divulgativa VIII Semana de la Ciencia 2013, “El dióxido de carbono: desde su captura a su utilización en tecnologías sostenibles.” Incluyendo dos charlas (impartidas por A. Cabañas y Y. Sánchez-Vicente) y una visita guiada al laboratorio.

6-02-2014 “Preparación de materiales nanoestructurados utilizando CO<sub>2</sub> supercrítico”, II Seminario “Tecnologías de Fluidos Supercríticos” organizado por PISA.

21-05-2015 “Preparación de materiales nanoestructurados en CO<sub>2</sub> supercrítico”, Universidad Jaume I, Castellón.

2-06-2014 “Nanoparticle Characterization”, SHYMAN Summer School, Valladolid (Spain).

6-11-2014 Coordinadora de la actividad divulgativa IX Semana de la Ciencia 2015, “Perdiendo el miedo al CO<sub>2</sub>. Utilización sostenible del CO<sub>2</sub>.” Incluyendo una charla impartida por A. Cabañas y una visita guiada al laboratorio.

2-03-2015 “Preparación de catalizadores metálicos soportados y modificación de materiales para captura de CO<sub>2</sub> utilizando fluidos supercríticos”, Seminarios Internacionales de Fronteras en la Ciencia de Materiales, Departamento de Ciencia de Materiales, Universidad Politécnica de Madrid.

**Programas de doctorado y máster:** Participación en los programas de doctorado del departamento de Química-Física I, así como en el interuniversitario de Química Sostenible coordinado por la Universidad Jaume I en Castellón, desde el 2003.

Representante del Dpt. Química Física I en la comisión del Programa de doctorado en Química-Avanzada desde Septiembre 2015.

#### **Asociaciones:**

Miembro de la Real Sociedad Española de Química **RSEQ** desde Mayo 2004.

Miembro de la Asociación de Expertos en Tecnologías con Fluidos Comprimidos **FLUCOMP** desde su creación (primero como red en 2003).

Miembro de la Red Española de Química Sostenible **REDQS** desde Febrero 2008.

Miembro de la International Society for the Advancement of Supercritical Fluids **ISASF** desde 2015.

#### **Censor:**

Censor de las revistas: J. Supercrit. Fluids (Elsevier), Langmuir (ACS), Chem. Mater. (ACS), Microporous Mesoporous Mater. (Elsevier), Industrial and Engineering Chemistry Research (ACS), J. Chem. Thermodyn. (Elsevier), Advanced Materials (Willey), Solid State Science (Elsevier), Chem Eng. J. (Elsevier), Chem. Comm. (RSC), Green Chemistry (RSC), J. Mater. Chem. (RSC), J. Colloid and Interface Science (Elsevier), Applied Catalysis A (Elsevier) y Applied Surface Science (Elsevier), entre otras.



**Jose Luis Fernandez Abascal**

Generated from: Editor CVN de FECYT

Date of document: 27/03/2017

**v 1.4.0**

d1de9380f641fe25429d2939771fb0f2

This electronic file (PDF) has embedded CVN technology (CVN-XML). The CVN technology of this file allows you to export and import curricular data from and to any compatible data base. List of adapted databases available at: <http://cvn.fecyt.es/>





## Summary of CV

This section describes briefly a summary of your career in science, academic and research; the main scientific and technological achievements and goals in your line of research in the medium -and long- term. It also includes other important aspects or peculiarities.

Catedrático de Química Física desde Diciembre del 2008  
6 sexenios de investigación  
6 sexenios de docencia



## General quality indicators of scientific research

This section describes briefly the main quality indicators of scientific production (periods of research activity, experience in supervising doctoral theses, total citations, articles in journals of the first quartile, H index...). It also includes other important aspects or peculiarities.

Indice h: 33  
número de citas: 4640  
10 trabajos con más de 100 citas  
(Web of Science, Marzo 2017)



## Jose Luis Fernandez Abascal

**Surname(s):** Fernandez Abascal  
**Name:** Jose Luis  
**DNI:**  
**ORCID:** 0000-0002-0304-3407  
**ResearcherID:** A-4138-2008  
**Date of birth:** / /  
**Gender:**  
**Land line phone:** (0034) 913944142  
**Email:** abascal@quim.ucm.es  
**Personal web page:** http://cacharro.quim.ucm.es

### Current professional situation

**Employing entity:** Universidad Complutense de Madrid **Type of entity:** University  
**Department:** QUIMICA FISICA I, F. CIENCIAS QUIMICAS  
**Professional category:** Catedrático de Universidad **Educational Management (Yes/No):** Yes  
**Start date:** 14/11/2008  
**Type of contract:** Civil servant **Dedication regime:** Full time  
**Primary (UNESCO code):** 221000 - Physical chemistry  
**Performed tasks:** Catedrático de Universidad

### Previous positions and activities

	Employing entity	Professional category	Start date
	Universidad Complutense de Madrid	Profesor Titular Universidad	30/07/1984

**Employing entity:** Universidad Complutense de Madrid  
**Professional category:** Profesor Titular Universidad **Educational Management (Yes/No):** No  
**Start-End date:** 30/07/1984 - 14/11/2008 **Duration:** 24 years - 3 months - 23 days  
**Type of contract:** Civil servant  
**Performed tasks:** Profesor Titular Universidad



## Education

### University education

#### 1st and 2nd cycle studies and pre-Bologna degrees

**Name of qualification:** Licenciado en Ciencias Químicas  
**City degree awarding entity:** Madrid, Community of Madrid,  
**Degree awarding entity:** Universidad Complutense de Madrid  
**Date of qualification:** 15/02/1976

#### Doctorates

**Doctorate programme:** Doctor en Química  
**Degree awarding entity:** Universidad Complutense de Madrid    **Type of entity:** University  
**City degree awarding entity:** Spain  
**Date of degree:** 27/04/1981  
**Thesis director:** MANUEL LOMBARDEO DIAZ

### Language skills

Language	Listening skills	Reading skills	Spoken interaction	Speaking skills	Writing skills
English	B2	C2	B2	B2	C1
French	C1	C1	C1	C1	C1

## Teaching experience

### Experience supervising doctoral thesis and/or final year projects

- Project title:** Simulación por ordenador de materia condensada: Nuevos modelos de agua, cálculo de propiedades y procesos de nucleación  
**Entity:** Universidad Complutense de Madrid    **Type of entity:** University  
**Student:** Miguel Angel Gonzalez Gonzalez  
**Date of reading:** 30/06/2014
- Project title:** Correlaciones de tres cuerpos en líquidos simples y mezclas  
**Type of project:** Doctoral thesis  
**Co-director of thesis:** ENRIQUE LOMBA GARCIA  
**Entity:** Universidad Complutense de Madrid    **Type of entity:** University  
**City of entity:** Madrid, Community of Madrid, Spain  
**Student:** SONIA JORGE GONZALEZ



**Obtained qualification:** Sobresaliente Cum Laude  
**Date of reading:** 16/09/2002

- 3** **Project title:** Asociación iónica en polielectrolitos: La transición entre las formas B y Z del ADN  
**Type of project:** Doctoral thesis  
**Entity:** Universidad Complutense de Madrid **Type of entity:** University  
**City of entity:** Madrid, Community of Madrid, Spain  
**Student:** JUAN CARLOS GIL MONTORO  
**Obtained qualification:** Apto cum laude  
**Date of reading:** 13/06/1997
- 4** **Project title:** Teoría y simulación de sistemas asociativos  
**Type of project:** Doctoral thesis  
**Co-director of thesis:** ENRIQUE LOMBA GARCIA  
**Entity:** Universidad Complutense de Madrid **Type of entity:** University  
**City of entity:** Madrid, Community of Madrid, Spain  
**Student:** FERNANDO BRESME FERNANDEZ  
**Obtained qualification:** Apto cum laude  
**Date of reading:** 28/03/1997
- 5** **Project title:** Propiedades termodinámicas de líquidos moleculares a partir de teorías de perturbaciones con sistema de referencia no-esférico  
**Type of project:** Doctoral thesis  
**Co-director of thesis:** MANUEL LOMBARDEO DIAZ  
**Entity:** Universidad Complutense de Madrid **Type of entity:** University  
**City of entity:** Madrid, Community of Madrid, Spain  
**Student:** CLAUDIO MARTIN ALVAREZ  
**Obtained qualification:** Apto cum laude  
**Date of reading:** 30/09/1988
- 6** **Project title:** Estructura y constante dieléctrica en líquidos  
**Type of project:** Doctoral thesis  
**Co-director of thesis:** MANUEL LOMBARDEO DIAZ  
**Entity:** Universidad Complutense de Madrid **Type of entity:** University  
**City of entity:** Madrid, Community of Madrid, Spain  
**Student:** ENRIQUE LOMBA GARCIA  
**Obtained qualification:** Apto cum laude  
**Date of reading:** 23/09/1988



## Scientific and technological experience

### Scientific or technological activities

#### R&D projects funded through competitive calls of public or private entities

- 1** **Name of the project:** Termodinámica y Cinética de la Transición Líquido-Sólido mediante simulación molecular: agua, disoluciones y otros sistemas( FIS2013-43209-P)  
**Type of project:** Basic research (including archaeological digs, etc)  
**Entity where project took place:** Universidad Complutense de Madrid **Type of entity:** University  
**City of entity:** Madrid, Community of Madrid, Spain  
**Name principal investigator (PI, Co-PI....):** Carlos Vega de las Heras; Eduardo Sanz García  
**Nº of researchers:** 6  
**Start-End date:** 01/01/2014 - 01/01/2017 **Duration:** 3 years  
**Total amount:** 85.000 €
- 2** **Name of the project:** MODELIZACION Y SIMULACION DE SISTEMAS COMPLEJOS. MODELICO, P2009/ESP-1691  
**Type of project:** Research and development, including transfer **Geographical area:** Regional  
**Name principal investigator (PI, Co-PI....):** CARLOS VEGA DE LAS HERAS  
**Nº of researchers:** 5  
**Funding entity or bodies:** Comunidad de Madrid **Type of entity:** Body, others  
**Start-End date:** 01/01/2010 - 01/01/2014 **Duration:** 4 years - 1 day  
**Total amount:** 90.000 €
- 3** **Name of the project:** SIMULACIONES CLASICAS Y CUANTICAS DEL AGUA Y DE SU EQUILIBRIO DE FASES, FIS2010-16159  
**Type of project:** Research and development, including transfer **Geographical area:** National  
**Name principal investigator (PI, Co-PI....):** CARLOS VEGA DE LAS HERAS  
**Nº of researchers:** 4  
**Funding entity or bodies:** MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACIÓN  
**Start-End date:** 01/11/2010 - 01/11/2013 **Duration:** 3 years - 1 day  
**Total amount:** 85.000 €
- 4** **Name of the project:** Simulación por ordenador y modelado mecanoestadístico de líquidos y sólidos,GR58/08  
**Type of project:** Research and development, including transfer  
**Entity where project took place:** Universidad Complutense de Madrid **Type of entity:** University  
**City of entity:** Community of Madrid, Spain  
**Name principal investigator (PI, Co-PI....):** JOSE LUIS FERNANDEZ ABASCAL



**Nº of researchers:** 7

**Funding entity or bodies:**

Universidad Complutense de Madrid

**Type of entity:** University

**Start-End date:** 01/01/2009 - 31/12/2010

**Duration:** 2 years - 4 days

**Total amount:** 9.000 €

**5 Name of the project:** Simulación por ordenador del equilibrio de las fases del agua, FIS2007-66079-C02-01

**Type of project:** Research and development, including transfer

**Name principal investigator (PI, Co-PI....):** CARLOS VEGA DE LAS HERAS

**Nº of researchers:** 7

**Funding entity or bodies:**

MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACIÓN

**Start-End date:** 01/10/2007 - 30/09/2010

**Duration:** 3 years

**Total amount:** 60.000 €

**6 Name of the project:** Modelización y simulación de sistemas no homogéneos en materia condensada, Mossnoho, S-0505/ESP/0299

**Type of project:** Research and development, including transfer

**Name principal investigator (PI, Co-PI....):** CARLOS VEGA DE LAS HERAS

**Nº of researchers:** 4

**Funding entity or bodies:**

Comunidad de Madrid

**Type of entity:** Body, others

**Start-End date:** 01/01/2006 - 31/12/2009

**Duration:** 4 years

**Total amount:** 138.753 €

**7 Name of the project:** THEORY AND COMPUTER SIMULATION OF INTERFACIAL PHENOMENA, Marie Curie Host Fellowships for the transfer or knowledge MTKD-CT-2004-509249

**Type of project:** Research and development, including transfer

**Geographical area:** European Union

**Name principal investigator (PI, Co-PI....):** CARLOS VEGA DE LAS HERAS

**Nº of researchers:** 2

**Funding entity or bodies:**

Unión Europea

**Start-End date:** 01/03/2005 - 01/03/2008

**Duration:** 3 years - 1 day

**Total amount:** 200.000 €

**8 Name of the project:** Transiciones de fase en sistemas iónicos.

**Type of project:** Research and development, including transfer

**Name principal investigator (PI, Co-PI....):** JOSE LUIS FERNANDEZ ABASCAL

**Nº of researchers:** 2

**Funding entity or bodies:**

MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACIÓN

**Start-End date:** 13/12/2004 - 12/12/2007

**Duration:** 3 years - 4 days

**Total amount:** 16.288 €

**9 Name of the project:** ESTRUCTURA, DINAMICA MICROSCOPICA Y TRANSICIONES DE FASE EN MATERIA CONDENSADA BLANDA.

**Type of project:** Research and development, including transfer

**Name principal investigator (PI, Co-PI....):** JOSE LUIS FERNANDEZ ABASCAL



**Nº of researchers:** 2

**Funding entity or bodies:**

MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACIÓN

**Start-End date:** 01/01/2002 - 27/12/2004

**Duration:** 3 years - 1 day

**Total amount:** 15.626,28 €

**10 Name of the project:** FENOMENOS DE TRANSPORTE, EXCITACIONES COLECTIVAS Y ESTRUCTURA EN SISTEMAS ASOCIATIVOS.

**Type of project:** Research and development, including transfer

**Name principal investigator (PI, Co-PI....):** JOSE LUIS FERNANDEZ ABASCAL

**Nº of researchers:** 3

**Funding entity or bodies:**

MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACIÓN

**Start-End date:** 01/10/1998 - 01/10/2001

**Duration:** 3 years - 1 day

**Total amount:** 18.030,36 €

**11 Name of the project:** CAMBIOS CONFORMACIONALES, TRANSICIONES DE FASE Y CONDUCTIVIDAD ELECTRICA EN SISTEMAS IONICOS.

**Type of project:** Research and development, including transfer

**Name principal investigator (PI, Co-PI....):** JOSE LUIS FERNANDEZ ABASCAL

**Nº of researchers:** 2

**Funding entity or bodies:**

MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACIÓN

**Start-End date:** 01/10/1997 - 01/10/1998

**Duration:** 1 year

**Total amount:** 3.005,06 €

**12 Name of the project:** SERVIDOR DE CALCULO MULTIPROCESADOR.

**Type of project:** Research and development, including transfer

**Name principal investigator (PI, Co-PI....):** JOSE FRANCISCO TIRADO FERNANDEZ

**Nº of researchers:** 10

**Funding entity or bodies:**

MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACIÓN

**Start-End date:** 20/11/1996 - 20/11/1997

**Duration:** 1 year

**Total amount:** 132.222,66 €

**13 Name of the project:** ASOCIACION IONICA EN DISOLUCIONES. EFECTOS ESTRUCTURALES Y DINAMICOS

**Type of project:** Research and development, including transfer

**Name principal investigator (PI, Co-PI....):** JOSE LUIS FERNANDEZ ABASCAL

**Nº of researchers:** 4

**Funding entity or bodies:**

MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACIÓN

**Start-End date:** 27/06/1994 - 27/06/1997

**Duration:** 3 years - 1 day

**Total amount:** 29.689,99 €

**14 Name of the project:** SIMULACION Y TEORIA DE SISTEMAS CONDENSADOS: DE LIQUIDOS MOLECULARES A POLIELECTROLITOS

**Type of project:** Research and development, including transfer

**Name principal investigator (PI, Co-PI....):** JOSE LUIS FERNANDEZ ABASCAL





**Nº of researchers:** 5

**Funding entity or bodies:**

MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACIÓN

**Start-End date:** 04/12/1991 - 04/12/1994

**Duration:** 3 years - 1 day

**Total amount:** 13.222,26 €

**15 Name of the project:** MECANICA ESTADISTICA DE SISTEMAS CONDENSADOS: TEORIA Y SIMULACION

**Type of project:** Research and development, including transfer

**Name principal investigator (PI, Co-PI....):** JOSE LUIS FERNANDEZ ABASCAL

**Nº of researchers:** 1

**Funding entity or bodies:**

MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACIÓN

**Start-End date:** 28/07/1988 - 28/07/1991

**Duration:** 3 years

**Total amount:** 10.517,71 €

**16 Name of the project:** Teoria y simulacion de sistemas moleculares

**Type of project:** Basic research (including archaeological digs, etc)

**Entity where project took place:** Universidad Complutense de Madrid

**Type of entity:** University

**City of entity:** Madrid, Community of Madrid, Spain

**Nº of researchers:** 4

**Start-End date:** 01/07/1985 - 01/07/1988

**Duration:** 3 years

**17 Name of the project:** Teoría de líquidos y mezclas

**Type of project:** Basic research (including archaeological digs, etc)

**Entity where project took place:** Universidad Complutense de Madrid

**Type of entity:** University

**City of entity:** Madrid, Raleigh (NC, USA), Community of Madrid, Spain

**Nº of researchers:** 5

**Funding entity or bodies:**

Comité Conjunto Hispano-Norteamericano Cooperacion Cientifica

**Type of entity:** State agency

**Start-End date:** 01/01/1985 - 31/12/1985

**Duration:** 3 years

### R&D non-competitive contracts, agreements or projects with public or private entities

**Name of the project:** Optimización de código para el cálculo de opciones financieras

**Degree of contribution:** Scientific coordinator

**Name principal investigator (PI, Co-PI....):** Jose Luis Fernández Abascal

**Nº of researchers:** 2

**Participating entity/entities:** Confederacion de Cajas de Ahorro de España; Universidad Complutense de Madrid

**Start date:** 01/01/2014

**Duration:** 1 year

**Total amount:** 3.000 €



## Scientific and technological activities

### Scientific production

**H index:** 33

**Date of application:** 27/03/2017

### Publications, scientific and technical documents

- 1 John W. Biddle; Rakesh S. Singh; Evan M. Sparano; Francesco Ricci; Miguel A. González; Chantal Valeriani; José L. F. Abascal; Pablo G. Debenedetti; Mikhail A. Anisimov; Frédéric Caupin. Two-structure thermodynamics for the TIP4P/2005 model of water covering supercooled and deeply stretched regions. *The Journal of Chemical Physics*. 146 - 3, pp. 034502. {AIP} Publishing, 21/01/2017. Available on-line at: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.4973546>>.

**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 2 Georg Menzl; Miguel A. Gonzalez; Philipp Geiger; Frederic Caupin; Jose L. F. Abascal; Chantal Valeriani; Christoph Dellago. Molecular mechanism for cavitation in water under tension. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. 113 - 48, pp. 13582 - 13587. 29/11/2016. Available on-line at: <[http://gateway.webofknowledge.com/gateway/Gateway.cgi?GWVersion=2&SrcAuth=ORCID&SrcApp=OrcidOrg&DestLinkType=FullRecord&DestApp=WOS\\_CPL&KeyUT=WOS:0](http://gateway.webofknowledge.com/gateway/Gateway.cgi?GWVersion=2&SrcAuth=ORCID&SrcApp=OrcidOrg&DestLinkType=FullRecord&DestApp=WOS_CPL&KeyUT=WOS:0)>

**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 3 Miguel A. González; Chantal Valeriani; Frédéric Caupin; José L. F. Abascal. A comprehensive scenario of the thermodynamic anomalies of water using the TIP4P/2005 model. *The Journal of Chemical Physics*. 145 - 5, pp. 054505. {AIP} Publishing, 07/08/2016. Available on-line at: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.4960185>>.

**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 4 Gael Pallares; Miguel A. Gonzalez; Jose Luis F. Abascal; Chantal Valeriani; Frederic Caupin. Equation of state for water and its line of density maxima down to -120 MPa. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 18 - 8, pp. 5896 - 5900. 28/02/2016. Available on-line at: <[http://gateway.webofknowledge.com/gateway/Gateway.cgi?GWVersion=2&SrcAuth=ORCID&SrcApp=OrcidOrg&DestLinkType=FullRecord&DestApp=WOS\\_CPL&KeyUT=WOS:0](http://gateway.webofknowledge.com/gateway/Gateway.cgi?GWVersion=2&SrcAuth=ORCID&SrcApp=OrcidOrg&DestLinkType=FullRecord&DestApp=WOS_CPL&KeyUT=WOS:0)>

**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 5 Miguel A. Gonzalez; Jose L. F. Abascal; Chantal Valeriani; Fernando Bresme. Bubble nucleation in simple and molecular liquids via the largest spherical cavity method. *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*. 142 - 15, pp. 154903. 21/04/2015. ISSN 0021-9606

**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 6 Miguel A. Gonzalez; Georg Menzl; Juan L. Aragoes; Philipp Geiger; Frederic Caupin; Jose L. F. Abascal; Christoph Dellago; Chantal Valeriani. Detecting vapour bubbles in simulations of metastable water. *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*. 141 - 18, pp. 18C511. 14/11/2014. ISSN 0021-9606

**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 7 M. A. Gonzalez; E. Sanz; C. McBride; J. L. F. Abascal; C. Vega; C. Valeriani. Nucleation free-energy barriers with Hybrid Monte-Carlo/Umbrella Sampling. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*. 16 - 45, pp. 24913 - 24919. 17/10/2014. ISSN 1463-9076

**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal



- 8** Gael Pallares; Mouna El Mekki Azouzi; Miguel A. Gonzalez; Juan L. Aragones; Jose L. F. Abascal; Chantal Valeriani; Frederic Caupin. Anomalies in bulk supercooled water at negative pressure. PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE UNITED STATES OF AMERICA. 111 - 22, pp. 7936 - 7941. 03/06/2014. ISSN 0027-8424  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 9** M M Conde; M A Gonzalez; J L F Abascal; C Vega. Determining the phase diagram of water from direct coexistence simulations: The phase diagram of the TIP4P/2005 model revisited. Journal of chemical physics. 139 - 15, pp. 154505. 21/10/2013. Available on-line at: <<http://gateway.webofknowledge.com/gateway/Gateway.cgi?GWVersion=2&SrcAuth=ORCID&SrcApp=OrcidOrg&DestLinkType=FullRecord&DestApp=MEDLINE&KeyUT=MEDLINE>>  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 10** E Sanz; C Vega; J R Espinosa; R Caballero-Bernal; J L F Abascal; C Valeriani. Homogeneous ice nucleation at moderate supercooling from molecular simulation. Journal of the American Chemical Society. 135, pp. 15008 - 15017. 09/10/2013. ISSN 1520-5126  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 11** J. L. F. Abascal; M. A. Gonzalez; J. L. Aragones; C. Valeriani. Homogeneous bubble nucleation in water at negative pressure: A Voronoi polyhedra analysis. Journal of Chemical Physics. 138, pp. 084508. 28/02/2013. Available on-line at: <<Go to ISI>://WOS:000315667800030>. ISSN 0021-9606  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 12** Miguel A. Gonzalez; Jose L. F. Abascal. A flexible model for water based on TIP4P/2005. Journal of Chemical Physics. 135, pp. 224516. 2011.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 13** Miguel A. Gonzalez; Jose L. F. Abascal. A flexible model for water based on TIP4P/2005. Journal of Chemical Physics. 135 - 22, 2011.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 14** J. L. F. Abascal; C. Vega. Note: Equation of state and compressibility of supercooled water: Simulations and experiment. Journal of Chemical Physics. 134, pp. 186101. 2011.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 15** Carlos Vega; Jose Luis F. Abascal; Pablo G. Debenedetti. Physics and chemistry of water and ice. Physical Chemistry Chemical Physics. 13, pp. 19660 - 19662. 2011.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 16** Carlos Vega; Jose L. F. Abascal. Simulating water with rigid non-polarizable models: a general perspective. Physical Chemistry Chemical Physics. 13, pp. 19663 - 19688. 2011.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 59
- 17** C VEGA; MM CONDE; C MCBRIDE; JLF ABASCAL; EG NOYA; R RAMIREZ; LM SESE. Heat capacity of water: A signature of nuclear quantum effects. Journal of Chemical Physics. 132, pp. 046101. 2010.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 29
- 18** MA Gonzalez; JLF Abascal. The shear viscosity of rigid water models. Journal of Chemical Physics. 132, pp. 096101. 2010.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 42



- 19** JLF Abascal; C Vega. Widom line and the liquid-liquid critical point for the TIP4P/2005 water model. *Journal of Chemical Physics*. 133, pp. 234502. 2010.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 59
- 20** H. L. Pi; J. L. Aragonés; C. Vega; E. G. Noya; J. L. F. Abascal; M. A. Gonzalez; C. McBride. Anomalies in water as obtained from computer simulations of the TIP4P/2005 model: density maxima, and density, isothermal compressibility and heat capacity minima. *Molecular Physics*. 107, pp. 365 - 374. 2009. ISSN 0026-8976  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 51
- 21** J. L. F. Abascal; E. Sanz; C. Vega. Triple points and coexistence properties of the dense phases of water calculated using computer simulation. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 11, pp. 556 - 562. 2009. ISSN 1463-9076  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 22** C. Vega; J. L. F. Abascal; M. M. Conde; J. L. Aragonés. What ice can teach us about water interactions: a critical comparison of the performance of different water models. *Faraday Discussions*. 141, pp. 251 - 276. 2009. ISSN 1364-5498  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 106
- 23** C. Vega; E. Sanz; J. L. F. Abascal; E. G. Noya. Determination of phase diagrams via computer simulation: methodology and applications to water, electrolytes and proteins. *Journal of Physics-Condensed Matter*. 20, pp. 153101. 2008. ISSN 0953-8984  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 80
- 24** JLF ABASCAL; C VEGA. Dipole-quadrupole force ratios determine the ability of potential models to describe the phase diagram of water. *PHYSICAL REVIEW LETTERS*. 98 - 23, pp. 237801. 2007.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 29
- 25** JLF ABASCAL; RG FERNANDEZ; LG MACDOWELL; et al. Ice: A fruitful source of information about liquid water. *JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS*. 136 - 3, pp. 214 - 220. 2007.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 26** JL ARAGONES; EG NOYA; JLF ABASCAL; et al. Properties of ices at 0 K: A test of water models. *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*. 127 - 15, pp. 154518. 2007.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Citations:** 26
- 27** JLF ABASCAL; C VEGA. The melting point of hexagonal ice (I<sub>h</sub>) is strongly dependent on the quadrupole of the water models. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*. 9 - 22, pp. 2775 - 2778. 2007.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal



- 28** JLF ABASCAL; C VEGA. The water forcefield: Importance of dipolar and quadrupolar interactions. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 111 - 43, pp. 15811 - 15822. 2007.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 29** JLF ABASCAL; M DOMERCQ; JCG MONTORO. Computer simulation of the ionic atmosphere around Z-DNA. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 110 - 49, pp. 25080 - 25090. 2006.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 30** RG FERNANDEZ; JLF ABASCAL; C VEGA. The melting point of ice I-h for common water models calculated from direct coexistence of the solid-liquid interface. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 124, pp. 144506. 2006.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 131
- 31** JLF ABASCAL; RG FERNANDEZ; C VEGA; et al. The melting temperature of the six site potential model of water. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 125, pp. 166101. 2006.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 45
- 32** C VEGA; JLF ABASCAL; I NEZBEDA. Vapor-liquid equilibria from the triple point up to the critical point for the new generation of TIP4P-like models: TIP4P/Ew, TIP4P/2005, and TIP4P/ice. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 125, pp. 034503. 2006.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 64
- 33** JLF ABASCAL; C VEGA. A general purpose model for the condensed phases of water: TIP4P/2005. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 123, pp. 234505. 2005.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 396
- 34** JLF ABASCAL; E SANZ; RG FERNANDEZ; C VEGA. A potential model for the study of ices and amorphous water: TIP4P/Ice. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 122, pp. 234511. 2005.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 160
- 35** C VEGA; JLF ABASCAL; E SANZ; et al.; MCBRIDE, C. Can simple models describe the phase diagram of water?. JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER. 17, pp. S3283 - S3288. 2005.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 46
- 36** C VEGA; C MCBRIDE; E SANZ; JLF ABASCAL. Radial distribution functions and densities for the SPC/E, TIP4P and TIP5P models for liquid water and ices I-h, I-c, II, III, IV, V, VI, VII, VIII, IX, XI and XII. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 7, pp. 1450 - 1456. 2005.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 49
- 37** C VEGA; JLF ABASCAL. Relation between the melting temperature and the temperature of maximum density for the most common models of water. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 123, pp. 144504. 2005.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 61



- 38** C VEGA; E SANZ; JLF ABASCAL. The melting temperature of the most common models of water. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 122, pp. 114507. 2005.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 176
- 39** C MCBRIDE; C VEGA; E SANZ; et al. The range of meta stability of ice-water melting for two simple models of water. MOLECULAR PHYSICS. 103, pp. 1 - 5. 2005.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 43
- 40** LG MACDOWELL; E SANZ; C VEGA; JLF ABASCAL. Combinatorial entropy and phase diagram of partially ordered ice phases. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 121, pp. 10145 - 10158. 2004.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 38
- 41** JLF ABASCAL; JCG MONTORO. Computer simulation of the thermodynamics of the B -> Z-DNA transition: effect of the ionic size and charge. MOLECULAR PHYSICS. 102 - 19-20, pp. 2141 - 2148. 2004.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 42** C MCBRIDE; C VEGA; E SANZ; et al. Formation of high density amorphous ice by decompression of ice VII and ice VIII at 135 K. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 121 - 23, pp. 11907 - 11911. 2004.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 43** E SANZ; C VEGA; JLF ABASCAL; LG MACDOWELL. Phase diagram of water from computer simulation. PHYSICAL REVIEW LETTERS. 92, pp. 255701. 2004.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 156
- 44** E SANZ; C VEGA; JLF ABASCAL; LG MACDOWELL. Tracing the phase diagram of the four-site water potential (TIP4P). JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 121, pp. 1165 - 1166. 2004.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Citations:** 57
- 45** JLF ABASCAL; C VEGA; C MCBRIDE; et al. Characterization of the order-disorder transition of a charged hard-sphere model. PHYSICAL REVIEW E. 68 - 5, 2003.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 46** C VEGA; JLF ABASCAL; C MCBRIDE; F BRESME. The fluid-solid equilibrium for a charged hard sphere model revisited. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 119, pp. 964 - 971. 2003.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 39
- 47** S JORGE; E LOMBA; JLF ABASCAL. Study of the triplet and pair structure of strong electrolytes modeled via truncated Coulomb interactions. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 117 - 8, pp. 3763 - 3771. 2002.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal



- 48** S JORGE; E LOMBA; JLF ABASCAL. Theory and simulation of the triplet structure factor and triplet direct correlation functions in binary mixtures. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 116 - 2, pp. 730 - 736. 2002.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 49** S JORGE; E LOMBA; JLF ABASCAL. An inhomogeneous integral equation for the triplet structure of binary liquids. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 114 - 8, pp. 3562 - 3569. 2001.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 50** JLF ABASCAL; JCG MONTORO. Ionic distribution around simple B-DNA models. III. The effect of ionic charge. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 114 - 9, pp. 4277 - 4284. 2001.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 51** JLF ABASCAL; JCG MONTORO. Computer simulation results for the free-energy difference between B-DNA and Z-DNA. JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER. 12 - 8A, pp. A327 - A332. 2000.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 52** S JORGE; G KAHL; E LOMBA; et al. On the triplet structure of binary liquids. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 113 - 8, pp. 3302 - 3309. 2000.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 53** F BRESME; C VEGA; JLF ABASCAL. Order-disorder transition in the solid phase of a charged hard sphere model. PHYSICAL REVIEW LETTERS. 85, pp. 3217 - 3220. 2000.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 42
- 54** JCG MONTORO; JLF ABASCAL. The radial boundary of polyelectrolyte solutions containing asymmetrical salts. MOLECULAR SIMULATION. 21 - 4, pp. 249 - 255. 1999.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 55** JLF ABASCAL; JCG MONTORO. The role of the molecular shape on the conformational transition from B-to Z-DNA. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 110 - 22, pp. 11094 - 11095. 1999.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 56** JCG MONTORO; JLF ABASCAL. Ionic distribution around simple B-DNA models II. Deviations from cylindrical symmetry. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 109 - 14, pp. 6200 - 6210. 1998.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 57** F BRESME; E LOMB; JLF ABASCAL. Influence of association on the liquid-vapor phase coexistence of simple systems. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 106 - 4, pp. 1569 - 1575. 1997.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 58** JCG MONTORO; JLF ABASCAL. The free energy difference between simple models of B- and Z-DNA: Computer simulation and theoretical predictions. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 106 - 19, pp. 8239 - 8253. 1997.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 59** JCG MONTORO; JLF ABASCAL. A method for the computer simulation of the free-energy difference in conformational changes of polyelectrolytes. Application to the B- to Z-DNA transition. EUROPHYSICS LETTERS. 34 - 6, pp. 471 - 476. 1996.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal



- 60** JCG MONTORO; JLF ABASCAL. Discrete charge effects in the structure of ions around polyelectrolyte models. MOLECULAR PHYSICS. 89 - 4, pp. 1071 - 1086. 1996.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 61** C VEGA; F BRESME; JLF ABASCAL. Fluid-solid equilibrium of a charged hard-sphere model. PHYSICAL REVIEW E. 54, pp. 2746 - 2760. 1996.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 42
- 62** F BRESME; JLF ABASCAL; E LOMBA. Theory and simulation of central force model potentials: Application to homonuclear diatomic molecules. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 105 - 22, pp. 10008 - 10021. 1996.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 63** JCG MONTORO; JLF ABASCAL. A MODULATED BULK AS A FUZZY BOUNDARY FOR THE SIMULATION OF LONG-RANGED INHOMOGENEOUS SYSTEMS. MOLECULAR SIMULATION. 14 - 4-5, pp. 313 - 329. 1995.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 64** JCG MONTORO; JLF ABASCAL. IONIC DISTRIBUTION AROUND SIMPLE DNA MODELS .1. CYLINDRICALLY AVERAGED PROPERTIES. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 103, pp. 8273 - 8284. 1995.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 68
- 65** F BRESME; E LOMBA; JJ WEIS; JLF ABASCAL. MONTE-CARLO SIMULATION AND INTEGRAL-EQUATION STUDIES OF A FLUID OF CHARGED HARD-SPHERES NEAR THE CRITICAL REGION. PHYSICAL REVIEW E. 51, pp. 289 - 296. 1995.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 57
- 66** F BRESME; JLF ABASCAL. CONNECTIVITY IN A BINARY MIXTURE OR RANDOMLY CENTERED SPHERES WITH SELECTIVE PARTICLE CLUSTERING. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 100 - 2, pp. 1769 - 1770. 1994.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 67** JCG MONTORO; F BRESME; JLF ABASCAL. IONIC ASSOCIATION IN ELECTROLYTE-SOLUTIONS - A VORONOI POLYHEDRA ANALYSIS. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 101 - 12, pp. 10892 - 10898. 1994.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 68** JLF ABASCAL; F BRESME; P TURQ. THE INFLUENCE OF CONCENTRATION AND IONIC-STRENGTH ON THE CLUSTER STRUCTURE OF HIGHLY-CHARGED ELECTROLYTE-SOLUTIONS. MOLECULAR PHYSICS. 81 - 1, pp. 143 - 156. 1994.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 69** JLF ABASCAL; AP SASSI; HW BLANCH; et al. MONTE-CARLO SIMULATIONS OF A HYDROPHOBIC WEAK POLYELECTROLYTE - CHARGE-DISTRIBUTION AS A FUNCTION OF CONFORMATION. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 99 - 5, pp. 4231 - 4232. 1993.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 70** F BRESME; JLF ABASCAL. PAIR CONNECTEDNESS FUNCTIONS AND PERCOLATION IN HIGHLY-CHARGED ELECTROLYTE-SOLUTIONS. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 99 - 11, pp. 9037 - 9046. 1993.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal





- 71** JCG MONTORO; JLF ABASCAL. THE VORONOI POLYHEDRA AS TOOLS FOR STRUCTURE DETERMINATION IN SIMPLE DISORDERED-SYSTEMS. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 97, pp. 4211 - 4215. 1993.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 64
- 72** JLF ABASCAL; F BRESME. MONTE-CARLO SIMULATION OF THE EQUATION OF STATE OF HARD TETRAHEDRAL MOLECULES. MOLECULAR PHYSICS. 76 - 6, pp. 1411 - 1421. 1992.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 73** JLF ABASCAL; P TURQ. CLUSTER STRUCTURE IN MODEL ELECTROLYTE-SOLUTIONS. CHEMICAL PHYSICS. 153 - 1-2, pp. 79 - 89. 1991.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 74** JCG MONTORO; JLF ABASCAL; P TURQ. FRACTAL ANALYSIS OF IONIC TRAJECTORIES IN ELECTROLYTE-SOLUTIONS. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 183 - 1-2, pp. 125 - 128. 1991.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 75** E LOMBA; M LOMBARDERO; JLF ABASCAL. BACKGROUND AND BRIDGE FUNCTIONS FOR THE HOMONUCLEAR HARD DIATOMIC FLUID. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 90 - 12, pp. 7330 - 7337. 1989.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 76** E LOMBA; M LOMBARDERO; JLF ABASCAL. NEW ASPECTS IN THE SIMULATION AND BEHAVIOR OF POLAR MOLECULAR FLUIDS. MOLECULAR PHYSICS. 68 - 5, pp. 1067 - 1078. 1989.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 77** E LOMBA; M LOMBARDERO; JLF ABASCAL. THE SOLUTION OF THE REFERENCE HYPERNETTED CHAIN EQUATION FOR THE DIPOLAR HARD DIATOMIC FLUID. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 91 - 4, pp. 2581 - 2586. 1989.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 78** M LOMBARDERO; C MARTIN; E LOMBA; et al.THERMODYNAMICS OF A QUADRUPOLAR HARD DIATOMIC FLUID USING A PERTURBATION-THEORY WITH NONSPHERICAL REFERENCE SYSTEM. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 93 - 11, pp. 4636 - 4642. 1989.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 79** S LAGO; P SEVILLA; JLF ABASCAL. AN IMPROVED INTEGRAL-EQUATION FOR LINEAR POLYATOMIC FLUIDS. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 135 - 1-2, pp. 133 - 136. 1987.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 80** E ENCISO; F LADO; M LOMBARDERO; et al.EXTENSION OF THE OPTIMIZED RHNC EQUATION TO MULTICOMPONENT LIQUIDS. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 87 - 4, pp. 2249 - 2256. 1987.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 81** F LADO; M LOMBARDERO; E ENCISO; S LAGO; ABASCAL, JLF. STRUCTURE AND THERMODYNAMICS OF THE DIPOLAR HARD-SPHERE FLUID FROM THE REFERENCE-HYPERNETTED CHAIN EQUATION WITH MINIMIZED FREE-ENERGY. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 85, pp. 2916 - 2921. 1986.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 33



- 82** JLF ABASCAL; S LAGO. A UNIFIED TREATMENT OF THE EQUATION OF STATE OF HARD LINEAR BODIES. JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS. 30 - 2, pp. 133 - 137. 1985.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 83** JLF ABASCAL; C MARTIN; M LOMBARDEO; et al. MC TEST OF PERTURBATION THEORIES BASED ON SITE SITE POTENTIALS. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 82 - 5, pp. 2445 - 2452. 1985.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 84** JLF ABASCAL; C MARTIN; M LOMBARDEO; et al. 2 CENTER INTERMOLECULAR ISM POTENTIAL FOR LIQUID CO<sub>2</sub>. ANALES DE QUIMICA SERIE A-QUIMICA FISICA Y QUIMICA TECNICA. 79 - 3, pp. 342 - 347. 1983.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 85** S LAGO; JLF ABASCAL; A RAMOS. GENERALIZED BOUPLIK EQUATION - AN ACCURATE EXPRESSION FOR THE EQUATION OF STATE OF HARD FUSED SPHERES. PHYSICS AND CHEMISTRY OF LIQUIDS. 12 - 3, pp. 183 - 190. 1983.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 86** JG POWLES; JLF ABASCAL. THE STRUCTURE OF LIQUID NEON - AN ANOMALY RESOLVED. JOURNAL OF PHYSICS C-SOLID STATE PHYSICS. 16 - 14, pp. L441 - L444. 1983.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 87** JLF ABASCAL; M LOMBARDEO. THERMODYNAMIC PROPERTIES OF HALOGENS FROM A PERTURBATION-THEORY FOR INTERACTION SITE MODEL FLUIDS. JOURNAL OF THE CHEMICAL SOCIETY-FARADAY TRANSACTIONS II. 78, pp. 965 - 974. 1982.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 88** M LOMBARDEO; JLF ABASCAL. THERMODYNAMIC PROPERTIES OF NITROGEN FROM A PERTURBATION-THEORY FOR ISM FLUIDS. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 85 - 1, pp. 117 - 119. 1982.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 89** M LOMBARDEO; JLF ABASCAL; S LAGO. PERTURBATION-THEORY FOR POLYATOMIC FLUIDS. MOLECULAR PHYSICS. 42 - 4, pp. 999 - 1008. 1981.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal  
**Source of citations:** WOS **Citations:** 41
- 90** JLF ABASCAL; E ENCISO. MODEL OF ATOM-ATOM POTENTIAL FOR LINEAR-MOLECULES. ANALES DE QUIMICA. 75 - 1, pp. 32 - 39. 1979.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal
- 91** E ENCISO; JLF ABASCAL; S LAGO. ORIENTATION CORRELATIONS FOR VANDERWAAL DIMERS OF NITROGEN, OXYGEN AND CARBON-DIOXIDE. ANALES DE QUIMICA. 75 - 4, pp. 300 - 304. 1979.  
**Type of production:** Scientific paper **Format:** Journal



## Works submitted to national or international conferences

- 1** **Title of the work:** Singular lines and bubble nucleation of liquid water  
**Name of the conference:** CECAM Workshops: New insights on simulations, theory and experiments in supercooled water  
**City of event:** Lausanne, Switzerland  
**Date of event:** 04/07/2013
- 2** **Title of the work:** Water behaviour at extreme conditions: supercooled and negative pressure regions  
**Name of the conference:** WaterSpain 2013  
**City of event:** Zaragoza, Spain  
**Date of event:** 07/02/2013
- 3** **Title of the work:** Supercooled water: simulation and experiment  
**Name of the conference:** 8th. Liquid Matter Conference  
**City of event:** Viena, Austria  
**Date of event:** 01/09/2011  
J.L.F. Abascal; C. Vega; M.A. González.
- 4** **Title of the work:** On the path to an accurate polarizable force field for water: lessons from simple models  
**Name of the conference:** CECAM Workshop: Advances in the Implementation of Polarizable Force Fields for Molecular Simulations  
**City of event:** Lausanne, Switzerland  
**Date of event:** 16/06/2010  
J.L.F. Abascal; C. Vega.
- 5** **Title of the work:** Five years simulating the phase diagram of water. What we learn something?  
**Name of the conference:** International Conference Thermodynamics  
**Type of event:** Conference **Geographical area:** Non EU International  
**Type of participation:** Participatory - oral communication  
**City of event:** LONDRES, United Kingdom  
**Date of event:** 23/09/2009  
**City organizing entity:** United Kingdom  
JUAN LUIS ARAGONES GOMEZ; JOSE LUIS FERNANDEZ ABASCAL; LUIS GONZALEZ MAC-DOWELL;  
EVA GONZALEZ NOYA; MARIA MARTIN CONDE; CARL MCBRIDE; CARLOS VEGA DE LAS HERAS.
- 6** **Title of the work:** Cinco años simulando el diagrama de fases del agua. Qué hemos aprendido ?  
**Name of the conference:** Fisica Estadística 2009  
**Type of event:** Conference **Geographical area:** National  
**Type of participation:** Participatory - oral communication  
**Date of event:** 10/09/2009  
**City organizing entity:** HUELVA, Spain  
JUAN LUIS ARAGONES GOMEZ; JOSE LUIS FERNANDEZ ABASCAL; LUIS GONZALEZ MAC-DOWELL;  
EVA GONZALEZ NOYA; MARIA MARTIN CONDE; CARL MCBRIDE; CARLOS VEGA DE LAS HERAS.
- 7** **Title of the work:** What phase diagram teach us about water interactions  
**Name of the conference:** CECAM Workshop: Modeling and Simulation of Water at Interfaces  
**City of event:** Lausanne, Switzerland  
**Date of event:** 10/06/2009



J.L.F Abascal; H.L. Pi; M.A. González; C. Vega.

- 8** **Title of the work:** What ice can teach us about water interactions: a critical comparison of the performance of different water models  
**Name of the conference:** Workshop, Molecular Simulations: Algorithms, Analysis, and Applications  
**Type of event:** Conference **Geographical area:** Non EU International  
**Type of participation:** 'Participatory - poster  
**City of event:** MINNEAPOLIS, United States of America  
**Date of event:** 18/05/2009  
**City organizing entity:** United States of America  
JUAN LUIS ARAGONES GOMEZ; JOSE LUIS FERNANDEZ ABASCAL; MARIA MARTIN CONDE;  
CARLOS VEGA DE LAS HERAS.
- 9** **Title of the work:** Qué nos enseña el hielo acerca del agua en estado líquido  
**Name of the conference:** Seminarios del Instituto Mexicano del Petróleo  
**City of event:** Mexico, Mexico  
**Date of event:** 14/04/2009
- 10** **Title of the work:** A Successful Model for the Condensed Phases of Water : TIP4P/2005  
**Name of the conference:** AiCHE meeting  
**Type of event:** Conference **Geographical area:** Non EU International  
**Type of participation:** Participatory - oral communication  
**City of event:** PHILADELPHIA, United States of America  
**Date of event:** 20/11/2008  
**City organizing entity:** United States of America  
JUAN LUIS ARAGONES GOMEZ; JOSE LUIS FERNANDEZ ABASCAL; MARIA MARTIN CONDE;  
CARLOS VEGA DE LAS HERAS.
- 11** **Title of the work:** What ice can teach us about water interactions: a critical comparison of the performance of different water models  
**Name of the conference:** Faraday Discussion , 141  
**Type of event:** Conference **Geographical area:** Non EU International  
**Type of participation:** Participatory - invited/keynote talk  
**City of event:** EDIMBURGO, United Kingdom  
**Date of event:** 27/08/2008  
**City organizing entity:** United Kingdom  
JUAN LUIS ARAGONES GOMEZ; JOSE LUIS FERNANDEZ ABASCAL; MARIA MARTIN CONDE;  
CARLOS VEGA DE LAS HERAS.
- 12** **Title of the work:** Properties of ices at 0K A test of water models  
**Name of the conference:** CCP5 (Collaborative Computational Project 5 - The Computer Simulation of Condensed Phase) Summer School  
**Type of event:** Curso **Geographical area:** European Union  
**Type of participation:** Participatory - oral communication  
**City of event:** SHEFFIELD, United Kingdom  
**Date of event:** 06/07/2008  
**City organizing entity:** United Kingdom  
JUAN LUIS ARAGONES GOMEZ; JOSE LUIS FERNANDEZ ABASCAL; EVA GONZALEZ NOYA; MARIA MARTIN CONDE; CARLOS VEGA DE LAS HERAS.



- 13** **Title of the work:** Determination of the phase diagram via computer simulation: methodology and application to water  
**Name of the conference:** SimBioMa (Conference on Molecular Simulations in Biosystems and Material Science)  
**Type of event:** Conference **Geographical area:** European Union  
**Type of participation:** 'Participatory - poster  
**City of event:** KONSTANZ, Germany  
**Date of event:** 02/04/2008  
**City organizing entity:** Germany  
JUAN LUIS ARAGONES GOMEZ; JOSE LUIS FERNANDEZ ABASCAL; LUIS GONZALEZ MAC-DOWELL;  
EVA GONZALEZ NOYA; MARIA MARTIN CONDE; EDUARDO SANZ; CARLOS VEGA DE LAS HERAS.
- 14** **Title of the work:** Analysing the performance of water models to describe the phase diagram of water  
**Name of the conference:** CECAM Workshop Modelling the structures and reactivity of silica and water: from molecule to macroscale  
**Type of event:** Conference **Geographical area:** Non EU International  
**Type of participation:** Participatory - invited/keynote talk  
**City of event:** LYON, France  
**Date of event:** 17/09/2007  
**City organizing entity:** France  
JUAN LUIS ARAGONES GOMEZ; JOSE LUIS FERNANDEZ ABASCAL; LUIS GONZALEZ MAC-DOWELL;  
EVA GONZALEZ NOYA; MARIA MARTIN CONDE; EDUARDO SANZ; CARLOS VEGA DE LAS HERAS.
- 15** **Title of the work:** Computer simulation studies of the phase diagram of water  
**Name of the conference:** CCP5 Annual meeting  
**Type of event:** Conference **Geographical area:** European Union  
**Type of participation:** Participatory - invited/keynote talk  
**City of event:** BRADFORD, United Kingdom  
**Date of event:** 04/09/2006  
**City organizing entity:** United Kingdom  
JOSE LUIS FERNANDEZ ABASCAL; RAMON GARCIA; LUIS GONZALEZ MAC-DOWELL; MARIA  
MARTIN CONDE; CARL MCBRIDE; EDUARDO SANZ; CARLOS VEGA DE LAS HERAS.
- 16** **Title of the work:** The phase diagram of water from computer simulation  
**Name of the conference:** CECAM workshop. Patchy colloids, Proteins and Network forming liquids: Analogies and new insights from computer simulation  
**Type of event:** Conference **Geographical area:** Non EU International  
**Type of participation:** Participatory - oral communication  
**City of event:** LYON, France  
**Date of event:** 23/06/2006  
**City organizing entity:** France  
JOSE LUIS FERNANDEZ ABASCAL; LUIS GONZALEZ MAC-DOWELL; MARIA MARTIN CONDE; CARL  
MCBRIDE; EDUARDO SANZ; CARLOS VEGA DE LAS HERAS.

## R&D management and participation in scientific committees

### Scientific, technical and/or assessment committees

**Committee title:** RED Española Supercomputacion - Acces Committee (reviewers panel)  
**Primary (UNESCO code):** 230000 - Chemistry  
**Affiliation entity:** Red Española Supercomputación  
**City affiliation entity:** Barcelona, Catalonia, Spain  
**Start date:** 15/01/2015

### Organization of R&D activities

**Title of the activity:** XIII Congreso de Física Estadística  
**Type of activity:** Congreso **Geographical area:** National  
**Convening entity:** CSIC - UCM  
**Start-End date:** 27/06/2005 - 29/06/2005

## Other achievements

### Stays in public or private R&D centres

- 1** **Entity:** Univ. Nacional Autonoma de Mexico **Type of entity:** University  
**Faculty, institute or centre:** Instituto de Ciencias Fisicas  
**City of entity:** Cuernavaca, Mexico  
**Start-End date:** 01/01/2009 - 30/04/2009 **Duration:** 4 months  
**Goals of the stay:** Postdoctoral  
**Provable tasks:** Estancia investigadora en la UNAM
- 2** **Entity:** Uniwersytet Marii Curie Sklodowskiej **Type of entity:** University  
**City of entity:** Lublin, Poland  
**Start-End date:** 15/06/2007 - 15/08/2007 **Duration:** 2 months  
**Goals of the stay:** Postdoctoral  
**Provable tasks:** Estancia investigadora en la UNAM
- 3** **Entity:** Univ. California San Diego **Type of entity:** University  
**City of entity:** San Diego, United States of America  
**Start-End date:** 15/06/1997 - 15/09/1997 **Duration:** 3 months  
**Goals of the stay:** Investigacion
- 4** **Entity:** Univ. California Berkeley  
**Faculty, institute or centre:** Dept. Chemical Engineering  
**City of entity:** Berkeley, United States of America  
**Start-End date:** 15/06/1992 - 15/09/1992 **Duration:** 3 months  
**Goals of the stay:** Investigacion



- 5** **Entity:** Univ. Pierre et Marie Curie - Paris VI **Type of entity:** University  
**Faculty, institute or centre:** Laboratoire d'Electrochimie  
**City of entity:** Paris, France  
**Start-End date:** 01/09/1985 - 31/07/1986 **Duration:** 11 months  
**Goals of the stay:** Investigacion
- 6** **Entity:** Univ. Kent at Canterbury **Type of entity:** University  
**Faculty, institute or centre:** Dept. of Physics  
**City of entity:** Canterbury,  
**Start-End date:** 01/06/1982 - 01/08/1982 **Duration:** 2 months  
**Goals of the stay:** Doctorate

### Periods of research activity

- 1** **Nº of recognized periods:** 1  
**Date of recognition:** 17/06/2013
- 2** **Nº of recognized periods:** 1  
**Date of recognition:** 05/06/2007
- 3** **Nº of recognized periods:** 1  
**Date of recognition:** 11/07/2001
- 4** **Nº of recognized periods:** 1  
**Date of recognition:** 25/10/1995
- 5** **Nº of recognized periods:** 1  
**Date of recognition:** 23/11/1990
- 6** **Nº of recognized periods:** 1  
**Date of recognition:** 23/11/1990

<b>Parte A. DATOS PERSONALES</b>		<b>Fecha del CVA</b>	22-3-2016
Nombre y apellidos	Juan José Freire Gómez		
DNI		Edad	
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	J-2287-2014	
	Código Orcid	0000-0002-5473-1111	

**A.1. Situación profesional actual**

Organismo	Universidad Nacional de Educación a Distancia UNED		
Dpto.	Ciencias y Técnicas Físicoquímicas		
Dirección	Paseo Senda del Rey 9, 28040 Madrid		
Teléfono 913988627	correo electrónico	<a href="mailto:jfreire@invi.uned.es">jfreire@invi.uned.es</a>	
Categoría profesional	Catedrático de Universidad	Fecha inicio	Septiembre 1992
Espec. cód. UNESCO	2210.90, 2206.10, 2304		
Palabras clave	Simulación molecular, Polímeros, Dendrímeros		

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

Licenciatura/Doctorado	Universidad	Año
Licenciado en Ciencias Químicas	Complutense de Madrid	1972
Doctor en Ciencias Químicas	Complutense de Madrid	1975

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

Número de sexenios de investigación concedidos: 7  
 Fecha del último sexenio concedido: 2014  
 Tesis dirigidas en los 10 últimos años: 1  
 Número total de citas: 2162  
 Promedio de citas/año durante los últimos 5 años (sin incluir el año actual): 66  
 Publicaciones totales en primer cuartil (Q1): 110  
 Índice h: 24

**Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM**

Tesis doctoral dirigida por el Profesor D. Arturo Horta Zubiaga, 1972-75 sobre el cálculo de propiedades conformacionales e hidrodinámicas de n-alcanos (modelo de isómeros rotacionales) mediante un método de simulación numérica (Monte Carlo). Dio lugar a 3 publicaciones en Journal of Chemical Physics. Con premio extraordinario de Doctorado.

Estancia Postdoctoral en la Universidad de Yale (New Haven, Estados Unidos) 1975-77 bajo la supervisión del Profesor M. Fixman. Dio lugar a dos publicaciones, una de las cuales, sobre el cálculo del fundido de la molécula de AND, lleva recibidas 182 citas.

Profesor Adjunto (Titular) de Química Física en la Universidad Complutense de Madrid desde 1978 hasta 1992.

En este periodo la investigación se centró fundamentalmente en el cálculo de propiedades conformacionales de polímeros (modelo de isómeros rotacionales para varios tipos de cadena) y en el cálculo de propiedades hidrodinámicas de polímeros lineales, ramificados (principalmente en forma de estrella) y en forma de anillo en disolución diluida (método de Monte Carlo) con varios modelos de bolas y muelles y distintos algoritmos de muestreo. Esta última línea llevó a varias publicaciones abundantemente citadas. Basada en ella, se escribió por encargo en 1999 un artículo de revisión que lleva recibidas más de 100 citas.

Catedrático de Universidad en la Universidad Complutense de Madrid desde 1992 a 2004. Desde algo antes de esa fecha, 1988, se comenzó el estudio de sistemas multicadena para el estudio de sistemas semidiluidos y fundidos de polímero mediante modelos de cadena en



puntos de red. Estos modelos se adaptaron para moléculas ramificadas (forma de estrella). Con ellos se simularon diversas propiedades conformacionales y transiciones de fase, tanto de separación polímero-disolvente, como de formación de mesofases en sistemas de copolímeros en bloque. También en este periodo se acometió el cálculo de interacciones binarias de moléculas de cadena y subsiguiente cálculo del segundo coeficiente del virial. La comparación con datos experimentales llevó a la determinación de los parámetros de interacción de Lennard-Jones entre eslabones (con átomos de H fusionados) para moléculas de n-alcenos y alcenos ramificados.

Traslado a la UNED como catedrático de Universidad en 2004.

Durante los años más recientes en la UNED se ha procedido, entre otros, al estudio de mezclas de polímeros mediante simulaciones de dinámica molecular. Asimismo, se ha abierto la línea del cálculo de propiedades de sistemas de dendrímeros. Se utilizó en primer lugar un procedimiento multi-escala para el cálculo de propiedades como el tamaño y la viscosidad intrínseca de las moléculas de dendrímero. Muy recientemente se ha utilizado el mismo método para el cálculo de interacciones binarias. El constante aumento de la potencia de cálculo de los ordenadores ha permitido utilizar el método de dinámica molecular para cálculo directo de las propiedades de moléculas de dendrímeros neutros o protonados en disolución acuosa.

Debemos destacar que, con pocas excepciones como la construcción de estructuras de dendrímeros y simulaciones de dinámica molecular, la mayoría de nuestros cálculos se han realizado mediante códigos de programación elaborados dentro de nuestro grupo. Grupo que, en todas las etapas, ha contado con la intervención de un número reducido de colaboradores.

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

### **C.1. Publicaciones**

- 1.- Autores (p.o. de firma): Ana M. Rubio, C. McBride and J.J. Freire  
Título: Binary Interactions between Dendrimer Molecules. A Simulation Study  
Revista: Macromolecules  
Volumen: 47, Páginas inicial: 5379 , final:5387 Fecha: 2014
- 2.- Autores (p.o. de firma): J.J. Freire, A. Ahmadi and C. McBride  
Título: Molecular dynamics simulations of the protonated G4 PAMAM dendrimer in an ionic liquid system  
Revista: Journal of Physical Chemistry B  
Volumen: 117, Páginas inicial: 15157, final:15164 Fecha: 2013
- 3.- Autores (p.o. de firma): A. Ahmadi, C. McBride, J. J. Freire, A. Kajetanowicz, J. Czaban y K. Grela  
Título: Forcefield parameterization and molecular dynamics simulation of flexible POSS linked (NHC) (phosphine) Ru catalytic complexes  
Revista: Journal of Physical Chemistry A  
Volumen: 115 Páginas, inicial: 12017, final: 12024 Fecha: 2011
- 4.- Autores (p.o. de firma): G. del Río Echenique, R. Rodríguez Schmidt, J. J. Freire, J.G. Hernández Cifre y J. García de la Torre  
Título: A Multiscale Scheme for the Simulation of Conformational and Solution Properties of Different Dendrimer Molecules  
Revista: Journal of the American Chemical Society  
Volumen: 131 Páginas, inicial: 8548, final: 8556 Fecha: 2009
- 5.- Autores (p.o. de firma): A. Ahmadi y J. J. Freire

Título: Molecular dynamics simulation of miscibility in several polymer blends  
Revista: Polymer  
Volumen: 50                      Páginas, inicial: 4973, final: 4978                      Fecha: 2009

6.-Autores (p.o. de firma): J. J. Freire  
Título: Realistic Numerical Simulations of Dendrimer Molecules  
Revista: Soft Matter  
Volumen: 4                      Páginas, inicial: 2139, final: 2143                      Fecha: 2008

7.- Autores (p.o. de firma): A.M. Rubio, G. Álvarez y J. J. Freire  
Título: Intramolecular Distances and Form Factor of Cyclic Chains with Excluded Volume Interactions  
Revista: Polymer  
Volumen: 49                      Páginas, inicial: 628, final: 634                      Fecha: 2008

8.- Autores (p.o. de firma): J. J. Freire y A. M. Rubio  
Título: Conformational Properties and Rouse Dynamics of Different Dendrimer Molecules  
Revista: . Polymer  
Volumen: 49                      Páginas, inicial: 2762, final: 2769                      Fecha: 2008

9-Autores (p.o. de firma): P. E. Theodorakis, A. Avgeropoulos, J. J. Freire, M. Kosmas, y C. Vlahos  
Título: Effects of the Chain Architecture on the Miscibility of Symmetric Linear/Linear and Star/Star Polymer Blends  
Revista: Macromolecules.  
Volumen: 39                      Páginas, inicial: 4235,                      final: 4239                      Fecha: 2006

10.- Autores (p.o. de firma): J. .J. Freire, E. Rodríguez y A. M. Rubio.  
Título: Monte Carlo Calculations for the Intrinsic Viscosity of Several Dendrimer Molecules  
Revista: Journal of Chemical Physics  
Volumen: 123                      Art. Num.154901, Páginas:1-14                      Fecha: 2005

## **C.2. Participación en proyectos de I+D+i**

1.- Título del proyecto: Polímeros en medios iónicos complejos: líquidos iónicos y cristales líquidos  
Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación, DGI, CTQ2010-16414  
Duración: desde 2011 hasta: 2013  
Cuantía de la subvención: 118.620 euros.  
Investigador principal: Inés Fernández de Piérola Martínez de Olkoz

2.-Título del proyecto: Hierarchically organized metal organic catalysts for continuous and multi-batch processes (HiCat).  
Entidad financiadora: Comisión Europea, 7º Programa Marco, NMP3-SL-2008-214095  
Entidades participantes: Evonik Degussa GMBH, Alemania  
Technische Universiteit Eindhoven, Holanda  
Hybrid Catalysis Bv, Holanda  
Foundation for Research and Technology Hellas, Grecia  
Polish Academy of Sciences, Polonia  
Imperial College of Science, Technology and Medicine, Reino Unido  
Membrane Extraction Technology Limited, Reino Unido  
Universidad Nacional de Educación a Distancia  
Duración, desde: 2008 hasta: 2011  
Cuantía de la subvención: 163.036 euros (para la UNED)  
Investigador responsable:: Dorit Wolf (Evonik) y Juan J. Freire (coordinador para la Universidad Nacional de Educación a Distancia).

3.-Título del proyecto: Simulación molecular de la estructura y dinámica en mezclas de polímeros con distintas arquitecturas..

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia, DGI, CTQ2006-06446

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid.

Duración, desde: 2006 hasta: 2009

Cuantía de la subvención: 43.560 euros.

Investigador principal: Juan J. Freire

4.-Título del proyecto: Simulación de sistemas poliméricos complejos.

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología, DGI. BQU2002-04626-C02-02

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid y UNED.

Duración, desde: 2002 hasta: 2005

Cuantía de la subvención: 32.800 euros

(UNED)

Investigador principal: Juan J. Freire (en la UNED)

5.-Título del proyecto: New routes to understanding polymer materials using experiments and realistic modelling

Entidad financiadora: European Commission DGXII Science Research and Development. NEWRUP Project FMRX-CT98-0176

Duración, desde: 1999 hasta: 2002

Cuantía de la subvención: 185.195 euros (para la UCM)

Investigador principal: Julian H.R. Clarke Universidad de Manchester UMIST y Juan J. Freire (coordinador del grupo de la Universidad Complutense de Madrid)

### **C.3. Participación en contratos de I+D+i**

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

### **C.5. Participación en tareas de evaluación (anónimas)**

- Censor de publicaciones para revistas científicas: Anales de Química, Macromolecules, The Journal of Physical Chemistry, The Journal of Polymer Science, The Journal of Chemical Physics, Computer Physics Communications, The European Physics Journal B, Journal of Molecular Structure, Journal of Rheology, Computational Polymer Science, Macromolecular Theory and Simulations, Computers and Mathematics with Applications, European Polymer Journal, Physical Review E, The Journal of Non-Crystalline Solids, Physical Chemistry Chemical Physics, Soft Matter, Chemistry, Acta Biomaterialia, European Physics Letters, Chemical Communications.

- Evaluador de Becas y Proyectos de Investigación: ANEP, CICYT, NSF (Estados Unidos) FWF (Austria) y CONICYT (Chile).

**Ministerio de Economía y Competitividad**  
**Secretaría de Estado de Investigación,**  
**Desarrollo e Innovación.**

**Currículum**

Nombre: Luis González MacDowell

Fecha: 23 de marzo de 2017

---

### DATOS PERSONALES

APELLIDOS: González MacDowell  
NOMBRE: Luis  
D.N.I.  
FECHA DE NACIMIENTO: - -  
SEXO: V

---

### SITUACIÓN PROFESIONAL ACTUAL

INSTITUCIÓN: Universidad Complutense de Madrid  
DEPARTAMENTO: Química Física  
DIRECCIÓN POSTAL: Facultad de Ciencias Químicas, 28040, Madrid  
Tfn.: 91 394 42 13  
Fax.: 91 394 41 35  
Correo electrónico.: lgmac@quim.ucm.es  
ESPECIALIZACIÓN (CÓDIGO UNESCO): 2307  
PUESTO: Profesor Titular de Universidad. DURACIÓN: Indefinida.  
SITUACIÓN ADMINISTRATIVA: Servicio Activo. DEDICACIÓN: Tiempo completo

---

### LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Termodinámica estadística, Simulación, Transiciones de fase, Interfases, Nucleación, Ecuaciones de estado, Polímeros.

---

### FORMACIÓN ACADÉMICA

<u>LICENCIATURA/INGENIERÍA</u>	<u>CENTRO</u>	<u>FECHA</u>
Licenciatura en C.C. Químicas	U.C.M.	15/07/94
<u>DOCTORADO</u>		
Química-Física	U.C.M.	26/05/00

DIRECTOR(ES) DE TESIS: Dr. Carlos Vega de las Heras  
TÍTULO DE LA TESIS: Termodinámica Estadística de Moléculas Flexibles: Teoría y Simulación  
CALIFICACIÓN: Sobresaliente cum Laude y Mención Europea

---

### EVALUACIONES Y ACREDITACIONES

- **Acreditación ANECA** para **Profesor Contratado Doctor**, área de Ciencias Experimentales, año 2003.
  - **Evaluación positiva I3** de la actividad investigadora por parte de la ANEP, año 2006.
  - **Habilitación Nacional** por el Área de Química Física, Febrero 2007.
  - **Evaluación positiva de la actividad investigadora, tramo 1996–2001**, CNEAL.
  - **Evaluación positiva de la actividad investigadora, tramo 2002–2007**, CNEAL.
  - **Evaluación positiva de la actividad investigadora, tramo 2008–2013**, CNEAL.
-

## ACTIVIDADES ANTERIORES DE CARÁCTER CIENTÍFICO O PROFESIONAL

- FECHAS: Noviembre de 1995 a Abril de 1996  
PUESTO: Becario Predoctoral  
INSTITUCIÓN: Universidad Libre de Bruselas  
ACTIVIDAD DESARROLLADA: Investigación
- FECHAS: Mayo de 1996 a Diciembre de 1999  
PUESTO: Becario Predoctoral  
INSTITUCIÓN: Universidad Complutense de Madrid  
ACTIVIDAD DESARROLLADA: Investigación
- FECHAS: Junio de 2000 a Mayo de 2002  
PUESTO: Investigador Postdoctoral  
INSTITUCIÓN: Universidad Johannes Gutenberg, Mainz, Alemania.  
ACTIVIDAD DESARROLLADA: Investigación
- FECHAS: Junio de 2002 a Octubre de 2006  
PUESTO: Investigador Ramón y Cajal  
INSTITUCIÓN: Universidad Complutense de Madrid  
ACTIVIDAD DESARROLLADA: Investigación y docencia.
- FECHAS: Noviembre de 2006 a Noviembre de 2007  
PUESTO: Profesor Contratado Doctor  
INSTITUCIÓN: Universidad Complutense de Madrid  
ACTIVIDAD DESARROLLADA: Investigación y docencia.

---

### IDIOMAS DE INTERES CIENTÍFICO (R = regular, B = bien, C = correctamente)

<u>IDIOMA</u>	<u>HABLA</u>	<u>LEE</u>	<u>ESCRIBE</u>
Inglés	C	C	C
Francés	C	C	B
Aleman	R	R	

## PARTICIPACIÓN EN PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

**Obtenidos en convocatorias públicas y competitivas, en especial, los financiados mediante programas nacionales o europeos**

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *PB94-0285 ESTUDIO TEORICO Y DE SIMULACION DE LÍQUIDOS MOLECULARMENTE COMPLEJOS CON POSIBLES APLICACIONES EN DIFERENTES CAMPOS CIENTÍFICOS E INDUSTRIALES*

ENTIDAD FINANCIADORA: CICYT  
DURACIÓN DESDE: Junio de 1996 HASTA: Octubre 1998  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Carlos Vega de las Heras  
NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: cuatro  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Becario predoctoral

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *PB97-0329 TEORÍA Y SIMULACIÓN DE TRANSICIONES DE FASES EN SISTEMAS COMPLEJOS: HIDROCARBUROS Y CRISTALES LÍQUIDOS*

ENTIDAD FINANCIADORA: CICYT  
DURACIÓN DESDE: Noviembre 1998 HASTA: Diciembre de 2001  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Carlos Vega de las Heras  
NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: dos  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Becario predoctoral

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *Wetting and Structure Formation at Interfaces*

ENTIDAD FINANCIADORA: Deutsche Forschung Gemeinschaft, DFG, (agencia nacional alemana de financiación científica).  
DURACIÓN DESDE: Junio de 2000 HASTA: Mayo de 2002  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Kurt Binder y Marcus Müller.  
NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: tres  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador Postdoctoral

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *Transiciones de Fase de Fluidos Homogéneos e Inhomogéneos: Estudio Teórico, Simulación por Ordenador y Aplicación a Polímeros*

ENTIDAD FINANCIADORA: MCYT  
DURACIÓN DESDE: 1 de Junio de 2002 HASTA: 1 de Junio de 2003.  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Luis González MacDowell  
NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: uno  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador Ramón y Cajal

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *BFM2001-1420-C02-01 Mecánica Estadística de Sistemas Complejos. Moléculas Flexibles y Mesofases*

ENTIDAD FINANCIADORA: MCYT  
DURACIÓN DESDE: 1 de Enero de 2003 HASTA: 31 de Diciembre de 2005.  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Carlos Vega de las Heras  
NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 4  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador Ramón y Cajal

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *FIS2004-06227-C02-02: Teoría y simulación del equilibrio de fases de sistemas de interés tecnológico, industrial y biológico*

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Educación y Ciencia  
DURACIÓN DESDE: Enero 2005 HASTA: Diciembre 2007.  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: C. Vega.  
NUMERO DE INVESTIGADORES: 4  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *FP6-509249 : THEORY AND COMPUTER SIMULATION OF INHOMOGENEOUS FLUIDS.*

ENTIDAD FINANCIADORA: Union Europea. Sixth Framework Program.

DURACIÓN DESDE: Marzo 2004 HASTA: Marzo 2007

INVESTIGADOR PRINCIPAL: A. Patrykiewicz (coordinador)

NUMERO DE INVESTIGADORES: 6 laboratorios Europeos

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *S-0505/ESP/000299 : Modelización y Simulación de Sistemas no Homogéneos en Materia Condensada (MOSSNOHO)*

ENTIDAD FINANCIADORA: Conserjería de Educación de la Comunidad de Madrid.

DURACIÓN DESDE: Enero 2006 HASTA: Diciembre 2009

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Guillermo Navascués (coordinador)

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador

NOTA: Proyecto coordinado con 7 grupos de 5 instituciones públicas (UCM, UAM, UCIII, UNED y CSIC)

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *FIS2007-66079-C02-01: Teoría y Simulación del Equilibrio de Fases de Sistemas Condensados.*

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Educación y Ciencia

DURACIÓN DESDE: Enero 2008 HASTA: Diciembre 2010

INVESTIGADOR PRINCIPAL: C. Vega.

NUMERO DE INVESTIGADORES: 6

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *PR34/07-15906 : Simulación molecular de las interfases de hidrocarburos e hidrocarburos-agua. Estructura, adsorción y tensiones superficiales*

ENTIDAD FINANCIADORA: Universidad Complutense de Madrid-Banco de Santander.

DURACIÓN DESDE: Enero 2008 HASTA: Diciembre 2009.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Luis González MacDowell.

NUMERO DE INVESTIGADORES: 3

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador Principal.

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *CCG08-UCM/ESP-4358: Simulación molecular de interfases: Estructura, adsorción y tensiones superficiales*

ENTIDAD FINANCIADORA: Comunidad Autónoma de Madrid/Universidad Complutense de Madrid.

DURACIÓN DESDE: Enero 2009 HASTA: Diciembre 2009.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Luis González MacDowell.

NUMERO DE INVESTIGADORES: 2

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador Principal.

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *(P2009/ESP-1691): Modelización y Simulación de Sistemas Complejos (MODELICO)*

ENTIDAD FINANCIADORA: Conserjería de Educación de la Comunidad de Madrid.

DURACIÓN DESDE: Enero 2010 HASTA: Diciembre 2014.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Enrique Lomba (Coordinador).

NOTA: Proyecto coordinado con grupos de instituciones públicas de investigación madrileñas (UCM, UAM, UCIII, UNED y CSIC)

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador.

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *FIS2010-22047-C05-05: Modelización Jerárquica de la Interfase en Sistemas Confinados*

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia e Innovación.

DURACIÓN DESDE: Enero 2011 HASTA: Diciembre 2013 (prorrogado hasta Septiembre 2014).

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Luis González MacDowell.

NUMERO DE INVESTIGADORES: 3

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador Principal.

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *FIS2011-13119-E: Red de Simulación Molecular*



ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia e Innovación (Acción Integrada).  
DURACIÓN DESDE: Enero 2012 HASTA: Diciembre 2012.  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Felipe Jiménez Blas.  
NUMERO DE INVESTIGADORES: 10 grupos.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador.

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *MAT-2014-59678-R* Supercristales de Nanopartículas Metálicas para el Desarrollo de Sensores Plasmónicos Supramoleculares.

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia e Innovación.  
DURACIÓN DESDE: Enero 2015 HASTA: Septiembre 2017.  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Andrés Guerrero Martínez  
NUMERO DE INVESTIGADORES: 6.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador.

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *FIS2015-71749-REDT: Red de Simulación Molecular*

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia e Innovación (Acción Integrada).  
DURACIÓN DESDE: Enero 2016 HASTA: Noviembre 2018.  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Felipe Jiménez Blas.  
NUMERO DE INVESTIGADORES: 10 grupos.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador.

---

## PUBLICACIONES

CLAVE: L = libro completo, CL = capítulo de libro, A = artículo, R = review, E = editor.

Nota: El impacto empleado como referencia es el del Area de Conocimiento de Química-Física.

\*: Datos ISI del año 2014.

- 
1. AUTORES (p.o. de firma): J. Benet, P. Llombart, E. Sanz y L.G. MacDowell  
 TÍTULO: Premelting-Induced Smoothing of the Ice-Vapor Interface  
 REVISTA: Phys. Rev. Lett. **117**, 096101 (2016). CLAVE: A  

IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO	IMPACTO	Nº DE CITAS
Si	7.5*	1
  
  2. AUTORES (p.o. de firma): E. M. Fernández, E. Chacón, L.G. MacDowell y P. Tarazona  
 TÍTULO: Mesoscopic Hamiltonian for the fluctuations of adsorbed Lennard-Jones liquid films  
 REVISTA: Phys. Rev. E. **91**, 062404 (2015). CLAVE: A  

IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO	IMPACTO	Nº DE CITAS
Si	2.35*	1
  
  3. AUTORES (p.o. de firma): J. Benet, L.G. MacDowell y E. Sanz  
 TÍTULO: Interfacial Free Energy of the NaCl Melt Interface from Capillary Wave Fluctuations.  
 REVISTA: J. Chem. Phys. **142**, 134706 (2015). CLAVE: A  

IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO	IMPACTO	Nº DE CITAS
Si	2.95*	4
  
  4. AUTORES (p.o. de firma): J. G. Palanco y L.G. MacDowell  
 TÍTULO: Analytic perturbative FMSA equation of state and thermodynamic properties from Monte Carlo simulation of the Kihara potential with a spherical core  
 REVISTA: Mol. Phys. En prensa. CLAVE: A  

IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO	IMPACTO	Nº DE CITAS
No	1.72*	-
  
  5. AUTORES (p.o. de firma): Victor H. Elvira y L.G. MacDowell  
 TÍTULO: Damped reaction field method for the accelerated convergence of the real space Ewald summation.  
 REVISTA: J. Chem. Phys. **141**, 164108 (2014) CLAVE: A  

IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO	IMPACTO	Nº DE CITAS
Si	2.95*	2
  
  6. AUTORES (p.o. de firma): J. Benet, J. G. Palanco, E. Sanz y L.G. MacDowell  
 TÍTULO: Disjoining Pressure, Healing Distance, and Film Height Dependent Surface Tension of Thin Wetting Films.  
 REVISTA: J. Phys. Chem. C **118**, 22079-22089 (2014). CLAVE: A  

IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO	IMPACTO	Nº DE CITAS
Si	4.77	3
  
  7. AUTORES (p.o. de firma): J. Benet, L.G. MacDowell y E. Sanz  
 TÍTULO: A Study of the ice-water interface using the TIP4P/2005 water model  
 REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. DOI: 10.1039/C4CP03398A (2014). CLAVE: A  

IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO	IMPACTO	Nº DE CITAS
Si	4.49	15
  
  8. AUTORES (p.o. de firma): J. Benet, L.G. MacDowell y E. Sanz  
 TÍTULO: Computer simulation study of surface wave dynamics at the crystal-melt interface.  
 REVISTA: J. Chem. Phys. **141**, 034701 (2014). CLAVE: A  

IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO	IMPACTO	Nº DE CITAS
Si	2.95	7

9. AUTORES (p.o. de firma): Felipe J. Blas, Ignacio Moreno-Ventas Bravo, J. Algaba, F. J. Martínez-Ruiz y L.G. MacDowell.  
TÍTULO: Effect of Molecular Flexibility of Lennard–Jones Chains on Vapor–Liquid Interfacial Properties.  
REVISTA: Journal of Chemical Physics **140**, 114705 (2014). CLAVE: A  
IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
Si 2,95 7
10. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell, Jorge Benet, Nebil A. Katcho y Jose M. G. Palanco.  
TÍTULO: Disjoining Pressure and the Film-Height-Dependent Surface Tension of Thin Liquid Films: New Insight from Capillary Wave Fluctuations  
REVISTA: Adv. Colloid Interface Sci. **206**, 150–171 (2014). CLAVE: A  
IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
Si 7,78 18
11. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell, Jorge Benet y Nebil A. Katcho.  
TÍTULO: Capillary Fluctuations and Film-Height-Dependent Surface Tension of an Adsorbed Liquid Film  
REVISTA: Physical Review Letters **111**, 047802 (2013). CLAVE: A  
IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
Si 7,73 9
12. AUTORES (p.o. de firma): Felipe J. Blas, Ignacio Moreno-Ventas Bravo, J. Miguez, M. M. Piñeiro y L.G. MacDowell.  
TÍTULO: Vapor-liquid interfacial properties of rigid-linear Lennard-Jones chains  
REVISTA: Journal of Chemical Physics **137**, 084706 (2012). CLAVE: A  
IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
Si 3,16 8
13. AUTORES (p.o. de firma): Felipe J. Blas, Francisco J. Martínez-Ruiz, Ignacio Moreno-Ventas Bravo y L.G. MacDowell.  
TÍTULO: Universal scaling behaviour of surface tension of molecular chains  
REVISTA: Journal of Chemical Physics **137**, 024702 (2012). CLAVE: A  
IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
Si 3,16 8
14. AUTORES (p.o. de firma): Rocio de Gregorio and Jorge Benet and Nebil A. Katcho and Felipe J. Blas L.G. MacDowell.  
TÍTULO: Semi-infinite boundary conditions for the simulation of interfaces: The Ar/CO<sub>2</sub>(s) model revisited  
REVISTA: Journal of Chemical Physics **136**, 104703 (2012). CLAVE: A  
IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
Si 3,16 13
15. AUTORES (p.o. de firma): P. Bryk y L.G. MacDowell.  
TÍTULO: Solvation effects for polymers at an interface: A hybrid self-consistent field–density functional theory approach  
REVISTA: Journal of Chemical Physics **135**, 204901 (2011). CLAVE: A  
IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
Si 3,33 7
16. AUTORES (p.o. de firma): J. L. Aragonés, L.G. MacDowell, J. I. Siepmann and C. Vega.  
TÍTULO: Phase Diagram of Water under an Applied Electric Field.  
REVISTA: Physical Review Letters **107**, 155702 (2011). CLAVE: A  
IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
Si 7,37 20
17. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell.  
TÍTULO: Computer simulation of interface potentials: Towards a first principle description of complex interfaces?.  
REVISTA: European Physical Journal-Special Topics **197**, 131–145 (2011). CLAVE: A  
IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
No 1,56 6

18. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell.  
 TÍTULO: Discussion Notes on “Disjoining pressure of planar adsorbed films”, by JR Henderson  
 REVISTA: European Physical Journal-Special Topics **197**, 149–150 (2011). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 1,56 3
19. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell.  
 TÍTULO: Discussion Notes: Remark on contributions by Binder, Marmur and Sefiane  
 REVISTA: European Physical Journal-Special Topics **197**, 245–247 (2011). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 1,56 -
20. AUTORES (p.o. de firma): J. L. Aragonés, L.G. MacDowell y C. Vega.  
 TÍTULO: Dielectric Constant of Ices and Water: A Lesson About Water Interactions.  
 REVISTA: Journal of Physical Chemistry-A , **115**, 5745–5758 (2011). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 2,95 33
21. AUTORES (p.o. de firma): J. Benet, L.G. MacDowell y C. Mendiña.  
 TÍTULO: Liquid–Vapor Phase Equilibria and Surface tension of Ethane as Predicted by the TraPPE and OPLS models.  
 REVISTA: Journal of Chemical & Engineering Data **55**, 5465–6470 (2010) CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 2,09 12
22. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell y C. Vega.  
 TÍTULO: Dielectric Constant of Ice Ih and Ice V: A Computer Simulation Study  
 REVISTA: Journal of Physical Chemistry B **114**, 6089–6098 (2010) CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,60 20
23. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell y F.J. Blas.  
 TÍTULO: Surface tension of fully flexible Lennard-Jones chains: Role of long-range corrections  
 REVISTA: Journal of Chemical Physics **131**, 074705 (2009) CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,09 22
24. AUTORES (p.o. de firma): K. Binder, B. Mognetti, L.G. MacDowell, M. Oettel, W. Paul, P. Virnau, L. Yelash.  
 TÍTULO: Towards the Quantitative Prediction of the Phase Behavior of Polymer Solutions by Computer Simulation  
 REVISTA: Macromolecular Symposia **278**, 1–9 (2009) CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No - 4
25. AUTORES (p.o. de firma): B. Mognetti, P. Virnau, L. Yelash, W. Paul, K. Binder, M. Muller y L.G. MacDowell.  
 TÍTULO: Coarse Grained Models for Fluids and their Mixtures: Comparison of Monte Carlo Studies of their Phase Behavior with Perturbation Theory and Experiment.  
 REVISTA: Journal of Chemical Physics **130**, 044101 (2009) CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,09 36
26. AUTORES (p.o. de firma): B. Mognetti, P. Virnau, L. Yelash, W. Paul, K. Binder, M. Muller y L.G. MacDowell.  
 TÍTULO: Coarse Graining Dipolar Interactions in Simple Fluids and Polymer Solutions: Monte Carlo Studies of the Phase Behavior  
 REVISTA: Physical Chemistry–Chemical Physics **11**, 1923–1933 (2009) CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 4,12 9

27. AUTORES (p.o. de firma): F.J. Blas, L.G. MacDowell, E. de Miguel y G. Jackson.  
 TÍTULO: Vapor-liquid interfacial properties of fully flexible Lennard-Jones chains  
 REVISTA: Journal of Chemical Physics **129**, 144703 (2008) CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,149 33
28. AUTORES (p.o. de firma): P. Bryk y L.G. MacDowell.  
 TÍTULO: Self-consistent field/density functional study of conformational properties of polymers at interfaces: Role of intramolecular interactions  
 REVISTA: Journal of Chemical Physics, **129**, 104901 (2008) CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,149 14
29. AUTORES (p.o. de firma): B.M. Moggetti, L. Yelash, P. Virnau, W. Paul, K. Binder, M. Müller y L.G. MacDowell.  
 TÍTULO: Efficient prediction of thermodynamic properties of quadrupolar fluids from simulation of a coarse-grained model: The case of carbon dioxide.  
 REVISTA: Journal of Chemical Physics **128**, 104501 (2008) CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,149 38
30. AUTORES (p.o. de firma): K. Binder, W. Paul, P. Virnau, L. Yelash, M. Müller y L.G. MacDowell.  
 TÍTULO: From atomistic modeling of macromolecules towards equations of state for polymer solutions and melts: how important is the accurate description of the local structure.  
 LIBRO: Coarse-Graining of Condensed Phases and Biomolecular Systems (G. Voth, Editor), 399-414, (2008) CLAVE: CL  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 - - -
31. AUTORES (p.o. de firma): J. L. F. Abascal, R. Garcia Fernandez, L.G. MacDowell, E. Sanz y C. Vega.  
 TÍTULO: Ice, a Fruitfull Source of Information about Liquid Water  
 REVISTA: Journal of Molecular Liquids **136** 214-220 (2007) CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 0,982 11
32. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell y P. Bryk.  
 TÍTULO: Direct calculation of interfacial tensions from computer simulation: Results for freely jointed tangent hard sphere chains.  
 REVISTA: Physical Review E **75**, 061609 (2007) CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 2,483 36
33. AUTORES (p.o. de firma): M. Martín-Conde, L.G. MacDowell y C. Vega.  
 TÍTULO: Computer simulation of two new solid phases of water: ice XIII and ice XIV  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics, 116101, **125** (2006) CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,166 9
34. AUTORES (p.o. de firma): M. Müller, C. Pastorino, T. Kreer, K. Binder L.G. MacDowell.  
 TÍTULO: Polymer Droplet on Top of a Brush of Chemically Identical Molecules: Autophobic Dewetting and Motion of Droplets Under External Force on a Soft Substrate  
 REVISTA: Abstracts of Papers of the American Chemical Society 416, **231** (2006)  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 - - -

35. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell, V. K. Shen y J. R. Errington.  
 TÍTULO: Nucleation and cavitation of spherical, cylindrical and slablike droplets and bubbles in small systems  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics, 034705, **125** (2006), seleccionado en Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology, **14** (2006). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,166 69
36. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell y M. Müller  
 TÍTULO: Adsorption of Polymers on a Brush: Tuning the Order of the Wetting Transition  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics, 084907, **124** (2006) . CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,166 42
37. AUTORES (p.o. de firma): C. Vega, J. L. F. Abascal, E. Sanz, L.G. MacDowell y C. McBride.  
 TÍTULO: Can Simple Models Describe the Phase Diagram of Water?  
 REVISTA: J. Phys. Condens. Matter, S3283–S3288 **17** (2005). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 2,145 51
38. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell y M. Müller.  
 TÍTULO: Observation of Autophobic Dewetting on Polymer Brushes from Computer Simulation  
 REVISTA: J. Phys. Condens. Matter, S3523–S3528 **17** (2005). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 2,145 18
39. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell y P. Virnau.  
 TÍTULO: El intrigante lazo de Van der Waals  
 REVISTA: Anales de la Real Sociedad Española de Química, 19–29, **101** (2005). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No - -
40. AUTORES (p.o. de firma): K. Binder, M. Müller, P. Virnau y L.G. MacDowell  
 TÍTULO: Polymer+solvent systems: Phase diagrams, interface free energies, and nucleation  
 REVISTA: Advances in Polymer Science, 1–104, **173** (2005). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 4,319 51
41. AUTORES (p.o. de firma): C. McBride, C. Vega, E. Sanz, L.G. MacDowell, y J. L. F. Abascal.  
 TÍTULO: The range of meta stability of ice-water melting for two simple models of water.  
 REVISTA: Molecular Physics. 1–5, **103** (2005). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 1,351 43
42. AUTORES (p.o. de firma): E. Sanz, C. Vega, J. L. F. Abascal y L.G. MacDowell  
 TÍTULO: Phase diagram of water from computer simulation  
 REVISTA: Physical Review Letters. 255701-1, **92** (2004). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 7,218 177
43. AUTORES (p.o. de firma) : E. Sanz, C. Vega, J. L. F. Abascal y L.G. MacDowell  
 TÍTULO: Tracing the phase diagram of the four-site water potential (TIP4P)  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics 1165, **121** (2004). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,105 63

44. AUTORES (p.o. de firma) : L.G. MacDowell, E. Sanz, C. Vega y J. L. F. Abascal.  
 TÍTULO: Combinatorial entropy and phase diagram of partially ordered ice phases  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics 10145-10158, **121** (2004). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,105 41
45. AUTORES (p.o. de firma) : P. Virnau, M. Müller, L.G. MacDowell, y K. Binder  
 TÍTULO: Phase behavior of n-alkanes in supercritical solution: A Monte Carlo Study  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics 2169, **121** (2004). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,105 72
46. AUTORES : C. Vega, L.G. MacDowell, C. McBride, F. J. Blas, A. Galindo y E. Sanz.  
 TÍTULO: Molecular Modeling of Flexible Molecules. Vapor–Liquid and Fluid–Solid Equilibria  
 REVISTA: Journal of Molecular Liquids **113**, 37–51 (2004). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 1,057 11
47. AUTORES (p.o. de firma): A. Galindo, E. Sanz, C. Vega, L.G. MacDowell, E. de Miguel y F. Blas  
 TÍTULO: Computer simulation study of the global phase behaviour of linear rigid Lennard-Jones chain molecules:  
 comparison with flexible models  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics. **120**, 3957–3968 (2004). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,105 20
48. AUTORES (p.o. de firma) : L.G. MacDowell, P. Virnau, M. Müller y K. Binder  
 TÍTULO: The Evaporation/Condensation Transition of Liquid Droplets  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics. **120**, 5293-5308, (2004). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,105 84
49. AUTORES (p.o. de firma): P. Virnau, M. Müller, L.G. MacDowell, y K. Binder  
 TÍTULO: Phase separation kinetics in compressible polymer solutions: computer simulation of the early stages  
 REVISTA: New Journal of Physics, **6**, 7.1–7.15 (2004). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,095 17
50. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell, C. Mendiña, C. Vega y E. de Miguel  
 TÍTULO: Critical Properties of Molecular Fluids from the Virial Series  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics. **119**, 11367–11373 (2003). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 2,950 15
51. AUTORES (p.o. de firma) : J. Largo, M. J. Maeso, J. R. Solana, C. Vega y L.G. MacDowell.  
 TÍTULO: Bonded Hard Sphere theory and computer simulation of the equation of state of linear fused-hard-sphere  
 fluids  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics. **119**, 9633–9639 (2003) CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 2,950 10
52. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell, C. Mendiña, C. Vega y E. de Miguel.  
 TÍTULO: Third Virial Coefficients and Critical Properties of Quadrupolar Two Center Lennard-Jones Models  
 REVISTA: Physical Chemistry–Chemical Physics. **5**, 2851–2857 (2003). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 1,959 10

53. AUTORES (p.o. de firma) : L.G. MacDowell  
 TÍTULO: A Formal Study of Nucleation as Described by Fluctuation Theory  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics. **119**, 453–463 (2003). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 2,950 12
54. AUTORES (p.o. de firma): M. Müller, L.G. MacDowell.  
 TÍTULO: Wetting of Polymer Liquids: Monte Carlo Simulations and Self-Consistent Field Calculations  
 REVISTA: Journal of Physics: Condensed Matter. **15**, R609–R653 (2003). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 1,757 46
55. AUTORES (p.o. de firma): M. Müller, L.G. MacDowell y A. Yethiraj.  
 TÍTULO: Short chains at surface and interfaces: a quantitative comparison between density functional theories and Monte Carlo simulations  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics. **118**, 2929–2940 (2003). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 2,950 82
56. AUTORES (p.o. de firma): P. Virnau, L. G. MacDowell, M. Müller and K. Binder  
 TÍTULO: How Do Droplets Depend on the System Size ? Droplet Condensation and Nucleation in Small Simulation Cells  
 REVISTA: Transactions of the High Performance Computing Center Stuttgart (HLRS) 2003, E. Krause, W. Jäger and M. Resch ed., p. 125–135, Springer-Verlag, Berlin (2003). CLAVE: CL  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No - -
57. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell, P. Virnau, M. Müller y K. Binder.  
 TÍTULO: Critical Lines and Phase Coexistence of Polymer Solutions: A Quantitative Comparison Between Wertheim’s Thermodynamic Perturbation Theory and Computer Simulations.  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics. **117**, 6360–6371 (2002). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 2,998 25
58. AUTORES (p.o. de firma) : P. Virnau, M. Müller, L.G. MacDowell y K. Binder.  
 TÍTULO: Phase Diagrams of Hexadecane-CO<sub>2</sub> Mixtures from Histogram-Reweighting Monte Carlo  
 REVISTA: Computer Physics Communications. **147**, 378–381 (2002). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 1,204 20  
 TÍTULO: Interface properties and bubble nucleation in compressible mixtures containing polymers  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics. **117**, 5480–5496 (2002). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 2,998 49
59. AUTORES (p.o. de firma) : J. Largo, C. Vega, L.G. MacDowell y J. R. Solana.  
 TÍTULO: A Computer Simulation Study of Racemic Mixtures  
 REVISTA: Molecular Physics, **100**, 2397–2415 (2002). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 1,617 8



60. AUTORES (p.o. de firma) : L.G. MacDowell, M. Müller y K. Binder  
 TÍTULO: How do Droplets on a Surface Depend on the System size?  
 REVISTA: Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, **206**, 277–291 (2002). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 1,350 27
61. AUTORES (p.o. de firma) : C. Vega, C. McBride y L.G. MacDowell.  
 TÍTULO: The Effect of Flexibility on the Phase Diagram of Simple Molecular Models  
 REVISTA: Chemical Physics-Physical Chemistry. **4**, 853–862 (2002). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 1,838 19
62. AUTORES (p.o. de firma) : M. Müller, L.G. MacDowell, P. Müller-Buschbaum, O. Wunnike y M. Stamm.  
 TÍTULO: Nano-Dewetting: Interplay between van-der-Waals and Short Ranged Interactions  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics. **115**, 9960–9969 (2001). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,147 53
63. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell, C. Vega y E. Sanz  
 TÍTULO: Equation of State of Model Branched Alkanes: Theoretical Predictions and Configurational Bias Monte Carlo Simulations.  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics, **115**, 6220–6235 (2001). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,147 14
64. AUTORES (p.o. de firma) : C. McBride, C. Vega y L.G. MacDowell  
 TÍTULO: Liquid Crystal Phase Formation for the Linear Tangent Hard Sphere Model from Monte Carlo Simulations.  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics. **115**, 4203–4211 (2001). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,147 41
65. AUTORES (p.o. de firma): C. McBride, C. Vega y L.G. MacDowell  
 TÍTULO: Isotropic-Nematic Phase Transition: A Study on the Influence of Intra-Molecular Flexibility using a fused hard sphere model  
 REVISTA: Phys.Rev.E. **64**, 011703–011703(14) (2001). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 2,235 42
66. AUTORES (p.o. de firma) : Müller y L.G. MacDowell  
 TÍTULO: Wetting of a Short Chain liquid on a Brush: First Order and Critical Wetting Transitions  
 REVISTA: Europhys. Lett. **55**, 221–227 (2001). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 2,120 28
67. AUTORES (p.o. de firma): C. Vega y L.G. MacDowell  
 TÍTULO: Extending Wertheim's Perturbation Theory to the Solid Phase: The Freezing of the Pearl-Necklace Model  
 REVISTA: J.Chem.Phys. **114**, 10411–10418 (2001). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,147 48

68. AUTORES (p.o. de firma) : C. Vega, J.M. Labaig, L.G. MacDowell y E. Sanz  
 TÍTULO: The Virial Coefficients of the Pearl-Necklace Model  
 REVISTA: J. Chem. Phys. **113**, 10398–10409 (2000). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,301 26
69. AUTORES (p.o. de firma): C. Vega y L.G. MacDowell  
 TÍTULO: Critical Temperature of Infinitely Long Chains from Wertheim's Perturbation Theory  
 REVISTA: Mol. Phys. **98**, 1295–1308 (2000). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 3,301 29
70. AUTORES (p.o. de firma) : L.G. MacDowell, M. Müller, C. Vega y K. Binder  
 TÍTULO: Equation of state and critical behavior of polymer models: A quantitative comparison between Wertheim's thermodynamic perturbation theory and computer simulations  
 REVISTA: J. Chem. Phys. **113**, 419–433 (2000). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,301 62
71. AUTORES (p.o. de firma) : M. Müller y L.G. MacDowell  
 TÍTULO: Interface and surface properties of polymer solutions: Monte Carlo simulations and self-consistent field theory  
 REVISTA: Macromolecules. **33**, 3902–3923 (2000). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,697 110
72. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell, C. Vega y A. López Rodríguez  
 TÍTULO: Critical properties of mixtures of alkanes from perturbation theory  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics, **111**, 3183–3191 (1999). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,289 6
73. AUTORES (p.o. de firma): C. Vega, L.G. MacDowell, A. López Rodríguez  
 TÍTULO: Excess properties of mixtures of alkanes from perturbation theory  
 JOURNAL: The Journal of Chemical Physics, **111**, 3192–3202 (1999). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,289 10
74. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell  
 TÍTULO: On the calculation of the frequency sum rules of the heat flux correlation function  
 REVISTA: Molecular Physics. **96**, 881–884 (1999). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 1,774 2
75. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell y C. Vega  
 TÍTULO: The second virial coefficients of hard alkane models  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics **109**, 5670–5680 (1998). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,147 21
76. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell y C. Vega  
 TÍTULO: Vapour-Liquid equilibrium of linear and branched alkanes from perturbation theory  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics **109**, 5681–5690 (1998). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,147 15

77. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell, C. Vega y P. Padilla  
 TÍTULO: Second Virial Coefficients and Equation of State of Hard Flexible Molecules  
 REVISTA: Anales de Física, Monografías RSEF, **4**, p. 261–262 (1998). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No - -
78. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell, I.R. MacDonald, M.L. Klein, F. Guillaume, J.-P. Ryckaert.  
 TÍTULO: Molecular Dynamics study of the R1 rotator phase of n-nonadecane  
 REVISTA: Anales de Física, Monografías RSEF, **4**, p. 259–260 (1998). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No - -
79. AUTORES (p.o. de firma): S. Calero, B. Garzón, L.G. MacDowell, y S. Lago  
 TÍTULO: Nonequilibrium properties of linear polar Kihara fluids from molecular dynamics. Results for models and for liquid acetonitrile  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics **107**, 2034–2045 (1997). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,247 13
80. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell, F. Guillaume, J.-P. Ryckaert, P. Girard, V. Rodriguez, A.-J. Dianoux  
 TÍTULO: Rotational molecular Dynamics in the R1 Phase of n-Nonadecane  
 REVISTA: Physica-B **234**, 106–108 (1997). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 0.991 6
81. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell, B. Garzón, S. Calero y S. Lago  
 TÍTULO: Dynamical Properties and Transport Coefficients of Linear Kihara Fluids  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics **106**, 4753–4767 (1997). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,247 8
82. AUTORES (p.o. de firma): S. Calero, S. Lago, L.G. MacDowell, B. Garzón y C. Vega.  
 TÍTULO: Simulación de propiedades dinámicas y de transporte para fluidos lineales de Kihara. Resultados preliminares  
 REVISTA: Información Tecnológica **8**, 185–190 (1997). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No - -
83. AUTORES (p.o. de firma): C. Vega, B. Garzón, L.G. MacDowell, S. Calero y S. Lago  
 TÍTULO: The Vapour-Liquid Equilibrium of n-Alkanes  
 REVISTA: Journal of Physics-Condensed Matter **8**, 9643–9648 (1996). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 1,487 3
84. AUTORES (p.o. de firma): C. Vega y L.G. MacDowell  
 TÍTULO: Understanding the Critical Properties of Chain Molecules  
 REVISTA: Molecular Physics **88**, 1575–1602 (1996). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 No 1,581 25
85. AUTORES (p.o. de firma): C. Vega, L.G. MacDowell y P. Padilla  
 TÍTULO: Equation of State for Hard n-Alkane Models: Long Chains  
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics **104**, 701–713 (1996). CLAVE: A  
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS  
 Si 3,516 24

86. AUTORES (p.o. de firma): C. Vega, B. Garzón, L.G. MacDowell y S. Lago

TÍTULO: Vapour Liquid Equilibria of Propane and n-alkane Conformers

REVISTA: Molecular Physics **85**, 679–699 (1995).

CLAVE: A

IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO	IMPACTO	Nº DE CITAS
No	1,827	6

---

**PARTICIPACIÓN EN PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN DE ESPECIAL RELEVANCIA EN EMPRESAS O EN LA ADMINISTRACIÓN PÚBLICA**

---

TÍTULO DEL CONTRATO: *Solubility of Small Molecules in Polymer Matrixes: A Computer Simulation Study*

ENTIDAD FINANCIADORA: BASF

ENTIDADES PARTICIPANTES: Universidad Johannes Gutenberg de Mainz, Universidad de Heidelberg, Universidad de Colonia.

DURACIÓN DESDE: Junio de 2000 HASTA: Mayo de 2002

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Kurt Binder y Marcus Müller.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador Postdoctoral, tiempo parcial.

---

TÍTULO DEL CONTRATO: : *Development of a New Equation of State for Polymer–Solvent Systems and its validation through Monte Carlo Simulations*

ENTIDAD FINANCIADORA: BASF

ENTIDADES PARTICIPANTES: Universidad Johannes Gutenberg de Mainz.

DURACIÓN DESDE: Noviembre de 2006 HASTA: Octubre de 2008

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Kurt Binder.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador colaborador.

---

**ESTANCIAS EN CENTROS EXTRANJEROS**  
(En especial las financiadas mediante programas competitivos)

CLAVE: D = doctorando, P = postdoctoral, I = invitado, C = contratado, O = otras (especificar).

---

CENTRO: Dpto. de Física de la Materia Condensada, Universidad Libre de Bruselas (U.L.B)			
LOCALIDAD: Bruselas	PAÍS: Bélgica	AÑO: 1995-1996	DURACIÓN: 6 meses
TEMA: Dinámica Molecular de Moléculas Flexibles			CLAVE: D

---

CENTRO: Dpto. de Física de la Materia Condensada, Universidad Johannes Gutenberg			
LOCALIDAD: Mainz	PAÍS: Alemania	AÑO: 1998	DURACIÓN: 3 meses
TEMA: Ecuación de estado y simulación de polímeros			CLAVE: D

---

CENTRO: Dpto. de Física de la Materia Condensada, Universidad Johannes Gutenberg			
LOCALIDAD: Mainz	PAÍS: Alemania	AÑO: 2000-2001-2002	DURACIÓN: 2 años
TEMA: Wetting y propiedades interfaciales de polímeros			CLAVE: P

---

CENTRO: Dpto. de Modelización de procesos Físico-Químicos, Universidad Maria Curie-Sklodowska, Lublin, Polonia.			
LOCALIDAD: Lublin	PAÍS: Polonia	AÑO: 2005	DURACIÓN: 2 meses
TEMA: Interfases de polímeros			CLAVE: I

---

CENTRO: Dpto. de Modelización de procesos Físico-Químicos, Universidad Maria Curie-Sklodowska, Lublin, Polonia.			
LOCALIDAD: Lublin	PAÍS: Polonia	AÑO: 2007	DURACIÓN: 2 meses
TEMA: Interfases de polímeros			CLAVE: I

---

---

## AYUDAS Y BECAS

- FINALIDAD: Estancia predoctoral  
ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Asuntos Exteriores  
DURACIÓN: 6 meses, de Noviembre de 1995 a Abril de 1996  
CENTRO O INSTITUCIÓN: Departamento de Materia Condensada, Universidad Libre de Bruselas
  - FINALIDAD: Realización de una tesis doctoral  
ENTIDAD FINANCIADORA: Universidad Complutense de Madrid  
DURACIÓN: Cuatro anualidades, de Mayo de 1996 a Diciembre de 2000.  
CENTRO O INSTITUCIÓN: Departamento de Química-Física, Universidad Complutense
  - FINALIDAD: Estancia breve en la Universidad Johannes-Gutenberg, Mainz, Alemania.  
ENTIDAD FINANCIADORA: Universidad Complutense de Madrid.  
DURACIÓN: Tres meses, de Octubre a Diciembre de 1998.  
CENTRO O INSTITUCIÓN: Departamento de Materia Condensada, Universidad Johannes Gutenberg, Mainz.
  - FINALIDAD: Asistencia al congreso *Solid/Fluid Interfaces*  
ENTIDAD FINANCIADORA: European Science Foundation  
DURACIÓN: 5 días, Marzo de 2003.  
CENTRO O INSTITUCIÓN: Sede de la European Science Foundation en San Feliu de Guixols, Girona.
  - FINALIDAD: Asistencia al congreso *Disorder, Complexity and Biology*  
ENTIDAD FINANCIADORA: Universidad Complutense de Madrid  
DURACIÓN: 5 días, Julio de 2004.  
CENTRO O INSTITUCIÓN: Banaras Hindu University, Varanasi.
  - FINALIDAD: Bolsa de viaje complutense.  
ENTIDAD FINANCIADORA: Universidad Complutense de Madrid  
DURACIÓN: 5 días, Junio de 2008.  
CENTRO O INSTITUCIÓN: Universidad Maria Curie-Sklodowska, Lublin, Polonia.
-

1. AUTORES: L. G. MacDowell.  
TÍTULO: **Statistical Mechanics of Interfaces, I, II y III.**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada.  
CONGRESO: *Micro and Macro approaches for fluid/fluid and solid/fluid interfaces (coWet Marie Curie Initial Training Network)*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid, España.  
AÑO: 2016
2. AUTORES: L. G. MacDowell.  
TÍTULO: **Capillarity Theory at the Nanoscale**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia.  
CONGRESO: *Non-equilibrium Dynamics of Thin Films – Solids, Liquids and Bioactive Materials (CECAM Workshop)*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lausana, Suiza.  
AÑO: 2016
3. AUTORES: L. G. MacDowell.  
TÍTULO: **Capillarity Theory at the Nanoscale**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada.  
CONGRESO: *Energy-Materials-Nanotechnology Meeting on Droplets 2016*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: San Sebastián, España.  
AÑO: 2016
4. AUTORES: P. Bryk y L. G. MacDowell.  
TÍTULO: **Combined Self-Consistent-Field Density Functional Theory study of polymer solvation at an interface.**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada.  
CONGRESO: *Theory and Computer Simulation of Polymers: New Developments*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Halle, Alemania.  
AÑO: 2015
5. AUTORES: L. G. MacDowell, J. Benet, N. A. Katcho y J. M. G. Palanco.  
TÍTULO: **Capillary fluctuations, disjoining pressure and the film height dependent surface tension of adsorbed liquid films**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia  
CONGRESO: *9th Liquid Matter Conference (EPS)*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lisboa, Portugal.  
AÑO: 2014
6. AUTORES: Victor H. Elvira, L. G. MacDowell.  
TÍTULO: **Accelerated Convergence of the Real Space Ewald Summation**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia  
CONGRESO: *9th Liblice Conference on the Statistical Mechanics of Liquids*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Sec Dam Lake, Republica Checa.  
AÑO: 2014



7. AUTORES: L. G. MacDowell, J. Benet, N. A. Katcho y J. M. G. Palanco.  
TÍTULO: **Capillary fluctuations, interface potential and the film height dependent surface tension of adsorbed liquid films**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia  
CONGRESO: *The Physics of Soft and Biological Matter (IOP)*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Cambridge, Reino Unido.  
AÑO: 2014
8. AUTORES: L. G. MacDowell, J. Benet, N. A. Katcho.  
TÍTULO: **Interface potential and film thick dependent surface tension of adsorbed liquid films.**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia  
CONGRESO: *87th Symposium on Colloids and Interface Science (ACS)*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Riverside, California, Estados Unidos.  
AÑO: 2013
9. AUTORES: J. M. G. Palanco, L. G. MacDowell, J. Benet y V. H. Elvira  
TÍTULO: **Structure and Thermodynamics of Curved Interfaces.**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia  
CONGRESO: *18th Symposium on Thermophysical Properties (NIST)*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Boulder, Estados Unidos.  
AÑO: 2012
10. AUTORES: L.G. MacDowell  
TÍTULO: **Computer simulation of interface potentials: towards a first principle description of complex interfaces.**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Seminario por invitación.  
CONGRESO: *Hybrid modelling of flows of complex fluids*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Göttingen, Alemania.  
AÑO: 2011
11. AUTORES: L.G. MacDowell  
TÍTULO: **Role of Long Range Forces at Interfaces**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Seminario por invitación.  
CONGRESO: *Bifurcations and instabilities in interfacial complex fluid flows*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: San Lorenzo del Escorial, Madrid, España.  
AÑO: 2010
12. AUTORES: L.G. MacDowell, F. J. Blas and P. Bryk.  
TÍTULO: **The Role of Long Range Forces on Surface Free Energies.**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia  
CONGRESO: *17th Symposium on Thermophysical Properties (NIST)*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Boulder, Estados Unidos.  
AÑO: 2009
13. AUTORES: L.G. MacDowell y C. Vega.  
TÍTULO: **The Dielectric Constant of Ice.**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia  
CONGRESO: *17th Symposium on Thermophysical Properties (NIST)*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Boulder, Estados Unidos.  
AÑO: 2009

14. AUTORES: L.G. MacDowell, R. de Gregorio y F. J. Blas.  
TÍTULO: **Sobre el papel de las fuerzas de largo alcance en las interfaces.**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia  
CONGRESO: *Congreso de Física Estadística, FisEs-09 (RSEF)*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Universidad de Huelva, España.  
AÑO: 2009
15. AUTORES: L.G. MacDowell y M. Müller  
TÍTULO: **The role of Long Range Forces: First and Second Order Wetting on a brush**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia  
CONGRESO: *16th Symposium on Thermophysical Properties (NIST)*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Boulder, Estados Unidos.  
AÑO: 2006
16. AUTORES: L.G. MacDowell, V. K. Shen y J. R. Errington  
TÍTULO: **Condensation and Cavitation of spherical, cylindrical and slab like droplets and bubbles**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia  
CONGRESO: *7th Liblice Conference*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lednice, Republica Checa.  
AÑO: 2006
17. AUTORES: L.G. MacDowell y M. Müller  
TÍTULO: **The role of Long Range Forces: First and Second Order Wetting on a brush**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia  
CONGRESO: *6th Liquid Matter Conference (EPS)*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Utrecht, Holanda.  
AÑO: 2005
18. AUTORES: L.G. MacDowell, M. Müller, P. Virnau y K. Binder  
TÍTULO: **La nucleación en sistemas confinados o el intrigante lazo de Van der Waals**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia  
CONGRESO: *Primer Simposio de Investigadores Jóvenes, RSEQ*  
PUBLICACIÓN: *El intrigante lazo de Van der Waals*, ed. Nazario Martín, (en prensa)  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid, España.  
AÑO: 2005
19. AUTORES: L.G. MacDowell, M. Müller, P. Virnau and K. Binder  
TÍTULO: **The condensation/evaporation transition of liquid droplets**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia Invitada (IUPAP)  
CONGRESO: *Disorder, Complexity and Biology 2004*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Benarés, India.  
AÑO: 2004
20. AUTORES: L.G. MacDowell, M. Müller, P. Virnau and K. Binder  
TÍTULO: **Computer Simulation Study of a First Order Phase Transition: The Condensation of a Droplet**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia  
CONGRESO: *Thermodynamics 2003*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Cambridge, Reino Unido.  
AÑO: 2003

21. AUTORES: L.G. MacDowell, C. McBride, C. Mendiña, E. Sanz y C. Vega  
TÍTULO: **Simulación por Ordenador de Fluidos Moleculares**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia  
CONGRESO: *Reunión de Expertos en Tecnologías de Fluidos Comprimidos 2003 (FLUCOMP)*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid, España.  
AÑO: 2003
22. AUTORES: L.G. MacDowell, M. Müller and K. Binder  
TÍTULO: **Wetting of Polymeric Liquids: Monte Carlo Simulations and Self Consistent Field Theory**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia  
CONGRESO: *TRI-Princeton 2001*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Princeton, Estados Unidos.  
AÑO: 2001
23. AUTORES: L.G. MacDowell, M. Müller, P. Virnau, C. Vega and K. Binder  
TÍTULO: **Critical Behaviour of Chain Molecules and their Mixtures and Prediction of the Critical Point of Polyethylene**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia  
CONGRESO: *Thermodynamics 2001*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Bristol, Inglaterra.  
AÑO: 2001

**TESIS DOCTORALES DIRIGIDAS**  
(referidas a los últimos diez años)

---

TÍTULO: Termodinámica Estadística de Fluidos Moleculares y sus Interfases.

DOCTORANDO: José María García Palanco

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense

FACULTAD/ESCUELA: CC. Químicas

AÑO: 2013

CALIFICACIÓN: Sobresaliente cum laude

---

TÍTULO: Estudio por Simulación de Fluctuaciones Capilares: Interfases Fluidas, Adsorbidas y Sólidas (co-dirigida con Eduardo Sanz).

DOCTORANDO: Jorge Benet Villanueva

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense

FACULTAD/ESCUELA: CC. Químicas

AÑO: 2015

CALIFICACIÓN: Sobresaliente cum laude

---

## OTROS MÉRITOS Y ACLARACIONES QUE SE DESEE HACER CONSTAR

---

### Resumen de publicaciones internacionales con revisión por pares

Revista	Publicaciones	Impacto aproximado
Physical Review Letters	4	6.5
Advances in Colloid and Interface Science	1	6.2
Advances in Polymer Science	1	5.4
Macromolecules	1	3.7
Journal of Chemical Physics	40	3.3
Physical Chemistry Chemical Physics	4	1.1
Journal of Physical Chemistry C	1	4.8
Journal of Physical Chemistry B	1	3.5
Journal of Physical Chemistry A	1	2.7
New Journal of Physics	1	2.5
Europhysics Letters	1	2.2
Physical Review E	3	2.1
Journal of Chemical & Engineering Data	1	1.6
Molecular Physics	7	1.6
Journal of Physics Condensed Matter	4	1.6
European Physical Journal–ST	3	1.6
Computer Physics Communications	1	1.1
Physica-B	1	0.90
Colloids and Surfaces A	1	0.87
Journal of Molecular Liquids	2	0.83

---

- **79 artículos en revistas ISI.**

- Más de 1700 citas
- Factor de impacto  $h=27$  (ISI).

### Actuación como revisor en artículos con revisión por pares

- Revisor habitual: The Journal of Chemical Physics, The Journal of Physical Chemistry, Physical Review Letters, Physical Review E.
- Revisor ocasional: Physical Review, Macromolecules, Colloids and Surfaces A.
- Revisiones también en: The Journal of Physical Chemistry Letters, Journal of the American Chemical Society, Physical Chemistry-Chemical Physics, Soft Matter, Langmuir, Journal of Statistical Physics, Polymer, International Journal of Thermophysics, Industrial & Engineering Chemical Research, Molecular Physics, European Journal of Physics-E, Chemical Physics, Journal of Computational Chemistry, Theoretical Chemistry Accounts, Physics of Fluids, Fluid Phase Equilibria, Journal of Physics: Condensed Matter.

### Actuación como revisor de proyectos

- Evaluador de la “Agence Nationale de la Recherche (ANR)”, convocatoria ‘Blanc’ de proyectos 2009 (Francia).
- Evaluador de la Agencia Nacional de Evaluación (ANEP), convocatoria 2009, 2013.
- Evaluador de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT) 2014 (Argentina).
- Evaluador de la “Czech Science Foundation”, convocatoria 2014 (República Checa).

<b>Fecha del CVA</b>	10-05-2017
----------------------	------------

**Parte A. DATOS PERSONALES**

Nombre y apellidos	ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ		
DNI/NIE/pasaporte		Edad	
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	C-7578-2015	
	Código Orcid	0000-0002-0655-5782	

**A.1. Situación profesional actual**

Organismo	FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS, UCM		
Dpto./Centro	QUÍMICA FÍSICA I		
Dirección	Ciudad Universitaria, Avda. Complutense, s/n, 28040-Madrid		
Teléfono	+34913944131	correo electrónico	<a href="mailto:junquera@ucm.es">junquera@ucm.es</a>
Categoría profesional	CATEDRÁTICO DE UNIVERSIDAD	Fecha inicio	18-11-2014
Espec. cód. UNESCO	2307, 2406, 221004, 221005, 221016, 221019, 221030, 221032		
Palabras clave	Química Coloidal y Supramolecular, Terapia Génica, Biofísica, DNA, siRNA, Lipoplejos, Transfección, Silenciamiento, Electroquímica, Fluorescencia, SAXS, crio-TEM, Macrociclos		

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

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciado en CC. Químicas	UCM	1988
Doctor en Ciencias Químicas	UCM	1992

**A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica (véanse instrucciones)**

Nº de Sexenios de Investigación: <b>4</b>	Fecha Concesión último: <b>2012</b>
Nº Tesis doctorales dirigidas (últimos 10 años): <b>5 (+1 en curso)</b>	
Publicaciones totales = <b>97</b>	Publicaciones en el 1er cuartil (Q1) = <b>65</b>
Citas totales (excluyendo autocitas) = <b>1410</b>	Citas (últimos 5 años, sin autocitas) = <b>135</b>
Promedio citas (sin autocitas)/año = <b>52</b>	Promedio citas/año (últimos 5 años) = <b>26</b>
Índice H = <b>26</b>	Índice H5 (últimos 5 años) = <b>8</b>

**Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM (máximo 3500 caracteres, incluyendo espacios en blanco)**

Elena Junquera González es Catedrática de Química Física en el Departamento de Química Física I de la Universidad Complutense de Madrid. Es co-fundadora y co-líder del Grupo de Química Coloidal y Supramolecular, reconocido por la CAM como Grupo Consolidado de Investigación UCM, con una trayectoria científica de más de 25 años involucrado en la caracterización de los sistemas coloidales y supramoleculares como vectores o agentes solubilizantes de sustratos de interés biológico. La Prof. Junquera obtuvo los Grados de Licenciado en 1988 (UCM, *Premio Extraordinario de Licenciatura*) y de Doctor en 1992 (UCM, *Premio Extraordinario de Doctorado*). Posteriormente, participó en dos estancias posdoctorales, la primera en 1994-95 en el Grupo de Carbohidratos del Instituto de Química Orgánica (CSIC, Madrid), trabajando en la caracterización de la interacción carbohidrato-carbohidrato en medios acuosos desde un punto de vista físico-químico mediante RMN, y la segunda en la Universidad de California Irvine (UCI) en 1997-98, participando en un proyecto sobre el plegamiento de láminas  $\beta$  proteicas (química péptidomimética) mediante técnicas avanzadas de RMN. Desde entonces, la Prof. Junquera ha iniciado y puesto a punto distintas líneas de investigación en su grupo, todas con una característica en común, un claro enfoque multidisciplinar de distintos problemas y fenómenos biofísicos y bioquímicos. En la actualidad, su línea de investigación más activa se centra en la búsqueda de vectores génicos (DNA y siRNA) no virales eficaces y seguros, con prestaciones mejoradas con respecto a los vectores virales y no virales existentes, un reto importante en el campo de la Terapia Génica. El laboratorio que lidera es referencia nacional e internacional en el campo de la caracterización biofísica de sistemas vehiculizadores de sustratos de interés biológico. Habida cuenta del marcado carácter multidisciplinar de sus

líneas de investigación, la Prof. Junquera ha establecido un completo engranaje de prestigiosas colaboraciones científicas, nacionales e internacionales, que abarcan la síntesis orgánica, la bioquímica y biología molecular y la física teórica. Ello, conjuntamente con su dilatada experiencia en el área de la química física y la biofísica, hacen de su línea de investigación una potente herramienta experimental y teórica en el campo de la terapia génica. Es coautora de 97 publicaciones con índices de impacto medio-altos, especialmente en su última etapa. La mayoría aparecen en revistas del primer cuartil de su categoría (ordenadas por índice de impacto), y el resto (salvo alguna excepción) quedarían emplazadas en el segundo cuartil. Además, según la *Web of Knowledge*, sus trabajos suelen ser bastante citados, con un promedio de citaciones de 17 citaciones/publicación y 52 citaciones/año. Todo ello conduce a un *índice de Hirsch* de 26. Si sólo se analizan los últimos 7 años (período 2010-2016), período en el que se ha puesto a punto la línea de investigación relativa a la vectorización de ácidos nucleicos con fines terapéuticos, las estadísticas arrojan los siguientes resultados promedio: 8 citaciones/publicación y 26 citaciones/año, y un *índice H7* de 12.

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

#### C.1. Publicaciones

1. Barrán-Berdón, Ana L.; Martínez-Negro, M.; García-Río, L.; Domènech, O.; Tros de Ilarduya, C.; Aicart, E.; Junquera, E., Biophysical study of gene nanocarriers formed by anionic/zwitterionic mixed lipids and pillar[5]arene polycationic macrocycles, *Journal of Materials Chemistry B*, **HOT PAPER** (DOI: 10.1039/C6TB02939F), **FI: 4,872**
2. Martínez-Negro, M; Caracciolo, G.; Palchetti, S.; Pozzi, D.; Capriotti, C. Cavaliere.; Laganà, A.; Ortiz Mellet, C.; Benito, J.M.; García Fernández, J.M.; Aicart, E.; Junquera, *Biophysics and protein corona analysis of Janus cyclodextrin-DNA nanocomplexes. Efficient cellular transfection on cancer cells*, *BBA-General Subjects* (DOI: 10.1016/j.bbagen.2017.03.010), **2017**. **FI: 5,083**
3. M. Martínez-Negro, K. Kumar, A. L. Barrán-Berdón, S. Datta, P. Kondaiah, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart, *Efficient cellular knockdown mediated by siRNA nanovectors of gemini cationic lipids having delocalizable headgroups and oligo-oxyethylene spacers*, *ACS APPLIED MATERIALS & INTERFACES*, **2016**, 8, 22113-22126. **FI: 7,145**
4. K. Kumar, A. L. Barrán-Berdón, S. Datta, M. Muñoz-Úbeda, C. Aicart-Ramos, P. Kondaiah, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart, *A delocalizable cationic headgroup together with an oligo-oxyethylene spacer in gemini cationic lipids improves their biological activity as vectors of plasmid DNA*, *J. Mat. Chemistry B*, **2015**, 3, 1495-1506. **FI: 6,626**
5. A.L. Barrán-Berdón, S. K. Misra, S. Datta, M. Muñoz-Úbeda, P. Kondaiah, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart, *Cationic gemini lipids containing polyoxyethylene spacers as improved transfecting agents of plasmid DNA in cancer cells*, *J. MATERIALS CHEMISTRY B*, **2014**, 2, 4640-4652. **FI: 6,626**
6. S. K. Misra, M. Muñoz-Úbeda, S. Datta, A. L. Barrán-Berdón, C. Aicart-Ramos, P. Castro-Hartmann, P. Kondaiah, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart, *Effects of a delocalizable cation on the headgroup of gemini lipids on the lipoplex-type nanoggregates directly formed from plasmid DNA*, *BIOMACROMOLECULES*, **2013**, 14, 3951-3963. **FI: 5,788**.
7. B. Dávila-Ibañez, V. Salgueirino, V. Martínez-Zorzano, R. Mariño-Fernández, A. García-Lorenzo, M. Maceira-Campos, M. Muñoz-Úbeda, E. Junquera, E. Aicart, J. Rivas, F. J. Rodríguez-Berrocal y J. L. Legido, *Magnetic silica nanoparticle cellular uptake and cytotoxicity regulated by electrostatic polyelectrolytes DNA loading at their surface*, *ACS NANO*, **2012**, 6, 747-759. **FI: 12,062**.
8. M. Muñoz-Úbeda, S. K. Misra, A.L. Barrán-Berdón, S. Datta, C. Aicart-Ramos, P. Castro-Hartmann, P. Kondaiah, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart, *How does spacer length of cationic gemini lipids influence the lipoplex formation with plasmid DNA? Physicochemical and biochemical characterizations and their relevance in gene therapy*, *BIOMACROMOLECULES*, **2012**, 13, 3926-3937. **FI: 5,371**.
9. M. Muñoz-Úbeda, A. L. Barrán-Berdón, S. K. Mishra, C. Aicart-Ramos, M. B. Sierra, J. Biswas, P. Kondaiah, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart, *Why is less cationic lipid required to prepare lipoplexes from plasmid DNA than linear DNA in gene therapy?*, *J. AMER. CHEM. SOC.*, **2011**, 133, 18014-18017. **FI: 9,907**.

10. H. Vázquez-Villa, J. A. González-Vera, B. Benhamú, A. Viso, R. Fernández-Pradilla, E. Junquera, E. Aicart, M. L. López-Rodríguez, y S. Ortega-Gutiérrez, *Development of molecular probes for the human 5-HT<sub>6</sub> receptors*, *J. MEDICINAL CHEMISTRY*, **2010**, *53*, 7095-7106. **FI: 5,207.**

**C.2. Proyectos.** 25 Proyectos Financiados, IP en 6, colP en 7. Los más destacables de los últimos 10 años son:

1. **Referencia:** CTQ2015-65972R  
*Título:* Macrociclos policatiónicos como vectores de ácidos nucleicos (pDNAs y siRNAs): un planteamiento pluridisciplinar en terapia génica  
*Entidad financiadora:* MEC (convocatoria CTQ 2015)  
*Investigador principal:* ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ (Univ. Complutense de Madrid)  
*Inicio:* Enero 2016 *Finalización:* Diciembre 2018  
*Cuantía de la subvención:* 74.000.- € *Tipo de participación:* IP
2. **Referencia:** CTQ2012-30821  
*Título:* Nuevos vectores coloidales biocompatibles de compactación y transfección del DNA o siRNA: una aproximación multidisciplinar.  
*Entidad financiadora:* MEC (convocatoria CTQ 2012)  
*Investigador principal:* ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ (Univ. Complutense de Madrid)  
*Inicio:* Enero 2013 *Finalización:* Diciembre 2015  
*Cuantía de la subvención:* 81.000.- € *Tipo de participación:* IP
3. **Referencia:** CTQ2009-10002BQU  
*Título:* Compactación del ADN mediante nanoagregados coloidales: lipoplejos y surfoplejos.  
*Entidad financiadora:* MICINN (convocatoria CTQ 2009)  
*Investigador principal:* ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ (Univ. Complutense de Madrid)  
*Inicio:* Enero 2010 *Finalización:* Junio 2013  
*Cuantía de la subvención:* 78.000.- € *Tipo de participación:* IP
4. **Referencia:** CTQ2009-ACI2009-0867  
*Título:* Compactación de DNA/siRNA con nuevos lípidos gemini: Transfección de formulaciones en terapia génica.  
*Entidad financiadora:* MICINN (convocatoria ACI COLABORA 2009)  
*Investigador principal:* EMILIO AICART SOSPEDRA (Univ. Complutense de Madrid)  
*Inicio:* Diciembre 2009 *Finalización:* Diciembre 2013  
*Cuantía de la subvención:* 56.000.- € *Tipo de participación:* Investigador
5. **Referencia:** FIS2008-06197-C02-01  
*Título:* Nanocompactación coloidal del ADN: una aproximación experimental y teórica.  
*Entidad financiadora:* MICINN (convocatoria FIS 2008)  
*Investigador principal:* ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ (Univ. Complutense de Madrid)  
*Inicio:* Enero 2009 *Finalización:* Diciembre 2009  
*Cuantía de la subvención:* 20.000.- € *Tipo de participación:* IP
6. **Referencia:** S-SAL-0249-2006  
*Título:* Aproximación multidimensional a la identificación y caracterización de nuevas dianas terapéuticas y al desarrollo de nuevos fármacos mediante el empleo de química modular, nanocristales semiconductores (*quantum dots*) y proteómica.  
*Entidad financiadora:* CAM (convocatoria de Excelencia 2006 de la CAM)  
*Investigador principal:* EMILIO AICART SOSPEDRA (Univ. Complutense de Madrid)  
*Inicio:* Diciembre 2007 *Finalización:* Diciembre 2010  
*Cuantía de la subvención:* 700.000.- € *Tipo de participación:* Investigador
7. **Referencia:** CTQ2005-01106BQU  
*Título:* Auto-organización y reconocimiento molecular en nanoestructuras coloidales.  
*Entidad financiadora:* MEC (convocatoria CTQ2005)  
*Investigador principal:* ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ (Univ. Complutense de Madrid)  
*Inicio:* Octubre 2005 *Finalización:* Abril 2009  
*Cuantía de la subvención:* 85.300.- € *Tipo de participación:* IP

### C.3. Contratos

1. *Generación y caracterización de nanopartículas lipídicas* (Art. 83 de la LOU).  
*Empresa/Administración financiadora:* BIODAN Sciences *Cuantía:* 12222,22.- (+IVA)



*Investigador responsable:* ELENA JUNQUERA GONZALEZ y EMILIO AICART SOSPEDRA

*Inicio:* Abril de 2013 *Finalización:* Julio de 2013

2. *Determinación del Potencial Zeta en disoluciones de agua de mar* (Art. 83 de la LOU).

*Empresa/Administración financiadora:* VEOLIA WATER Solutions & Technologies

*Investigador responsable:* ELENA JUNQUERA GONZALEZ

*Inicio:* Junio de 2008 *Finalización:* Junio de 2009 *Cuantía:* 100 € por muestra (+IVA)

3. *Determinación del Potencial Zeta en disoluciones de agua de mar* (Art. 83 de la LOU).

*Empresa/Administración financiadora:* VEOLIA WATER Solutions & Technologies

*Investigador responsable:* EMILIO AICART SOSPEDRA

*Inicio:* Junio de 2006 *Finalización:* Sept. de 2006 *Cuantía:* 100 € por muestra (+IVA)

#### C.4. Patentes

E. Junquera, M. Ruiz, S. López y E. Aicart, *N. de solicitud:* P200101592, España

*Título:* Técnica y un método para la medida continua, simultánea y automática de la velocidad del sonido y la densidad en líquidos y disoluciones.

*Fecha de prioridad:* 6-7-2001; *Fecha de concesión:* 15-6-2006

*Entidad titular:* Univ. Complutense de Madrid / Univ. Politécnica de Madrid

#### C.5. Estancias de Investigación

CLAVE: D = doctorado, P = postdoctoral, I = invitado, C = contratado, O = otras

1. University of Saskatchewan, Saskatoon (Canada), 1990, 26 semanas (D,C)

2. Grupo de Carbohidratos, IQO-CSIC (Madrid), 1994-95, 56 semanas (P)

3. University of California, Irvine (CA, USA), 1997-98, 30 semanas (P)

#### C.6. Dirección de Trabajos de Investigación

- Dirección de 5 tesis doctorales + 1 en curso
- Dirección de 12 Tesis de Licenciatura y Proyectos Fin de Carrera
- Dirección de 3 Diplomas de Estudios Avanzados (DEA)
- Dirección de 12 estancias de Investigación de Profesores e Investigadores nacionales y extranjeros en mi laboratorio de Investigación.

#### C.7. Gestión de Actividad Científica

- Tesorera del Grupo Especializado de Coloides e Interfases, 2006-2015.
- Miembro del Comité Científico del III Reunión Ibérica de Coloides e Interfases (RICI3) y VIII Reunión del Grupo Especializado de Coloides e Interfases (GECI), 2009.
- Miembro del Comité Organizador del 4th International Colloids Conference, 2014.

#### C.8. Evaluador de Agencias de Calidad y Revistas Internacionales

- Evaluador de la ANEP *Fecha:* 2007-cont
- Evaluador de la ISF (Israel Science Foundation) *Fecha:* 2007-cont
- Evaluador de la Dirección Xeral Investigación (Galicia) *Fecha:* 2006-cont
- Evaluador de la Agencia para la Calidad del Sistema Universitario de Castilla y León *Fecha:* 2008-cont
- Evaluador de la Agencia Andaluza de Evaluación de la Calidad y Acreditación Universitaria *Fecha:* 2009-cont
- Evaluador de MICINN *Fecha:* 2010-cont
- Panel de Expertos MICINN *Fecha:* 2010-2011, 2015-2016
- Censor de 15 revistas internacionales indexadas (JCR) *Fecha:* 1995-cont

#### C.9. Otros

- 97 publicaciones científicas en revistas de factor de impacto medio-alto.
- 79 Comunicaciones a Congresos (conferencias, pósters y presentaciones orales).
- 25 proyectos nacionales o autonómicos de investigación (11 como IP o colP)
- Traductor para Editorial Elzaburu de 66 patentes de Química Coloidal y Polimérica (2000-2005).
- Premio Extraordinario Licenciatura (1988) y Premio Extraordinario Doctorado (1992)
- Red Europea de Microencapsulación de Fármacos, ERB-BRRT-CT98-5100,1999-2002



---

**Comisión Interministerial de Ciencia y  
Tecnología**

---

## **Curriculum vitae**

Nombre: Otilia Mó Romero

Fecha: 10/02/2014

Research ID : A-7035-2012

Orcid Numero- 000-003-2596-5987

***Plan Nacional de I+D+I (2000-2003)***

DNI:

Fecha de nacimiento : / /

Sexo: M

---

**Situación profesional actual**

Organismo: Universidad Autónoma de Madrid

Facultad, Escuela o Instituto: Ciencias

Depto./Secc./Unidad estr.: Química

Dirección postal: Departamento de Química, C-9. Universidad Autónoma de Madrid. Cantoblanco. 28049-Madrid

Teléfono (indicar prefijo, número y extensión): 91-397-4511

Fax: 91-396-5238

Correo electrónico: otília.mo@uam.es

Especialización (Códigos UNESCO): 2307-2210

Catedrática de Universidad

Fecha de inicio: Mayo de 2000

Situación administrativa

Plantilla

Contratado

Interino

Becario

Otras situaciones especificar:

Dedicación

A tiempo completo

A tiempo parcial

---

**Líneas de investigación**

Breve descripción, por medio de palabras claves, de la especialización y líneas de investigación actuales.

Reactividad Intrínseca . Procesos de Interés en Química de la Atmosfera. Enlaces de Hidrógeno. Nuevos Materiales Moleculares.

---

**Formación Académica**

Titulación Superior	Centro	Fecha
Licenciada en Ciencias Químicas	Univ. Santiago de Compostela	1970
Grado de Licenciatura en C. Químicas	Univ. Santiago de Compostela	1971

Doctorado	Centro	Fecha
Ciencias Químicas	Universidad Autónoma de Madrid	1974

---

**Actividades anteriores de carácter científico profesional**

Puesto

Institución

Fechas

Becaria de FPI	Universidad Autónoma de Madrid	1971-73
Postdoctoral Res. Asociated	Carnegie-Mellon University	1974-76
Prof. Adjunto Interino	Universidad Autónoma de Madrid	1976-77
Prof. Adjunto Numerario	Universidad Autónoma de Madrid	1978-83
Prof. Titular de Universidad	Universidad Autónoma de Madrid	1983-00

**Idiomas (R = regular, B = bien, C = correctamente)**

Idioma	Habla	Lee	Escribe
Inglés	C	C	C
Francés	C	C	B
Gallego	C	C	B
Portugués	B	B	R

## **PARTICIPACION EN PROYECTOS DE INVESTIGACION FINANCIADOS EN LOS ULTIMOS 10 AÑOS**

---

TITULO DEL PROYECTO: Profesores Visitantes Iberdrola.

ENTIDAD FINANCIADORA: Fundación Iberdrola.

DURACION DESDE: 1999 HASTA: 2002

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Determinación experimental de la acidez y basicidad en fase gaseosa de sistemas insaturados heteroatómicos por espectrometría de masas de resonancia ciclotrónica de iones (ICR) y modelización mediante cálculos ab initio.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGES Acción Integrada Hispano-Francesa HF2000-0040

DURACION DESDE: 2000 HASTA: 2002

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad de Acidos hidroxycarboxilicos con cationes metálicos. Estudio Teórico y experimental de la formación, solvatación y reactividad de las especies organometálicas formadas.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGES Acción Integrada Hispano-Frances HF 1999-0015.

DURACION DESDE: 2000 HASTA: 2002

INVESTIGADOR PRINCIPAL: O. Mó.

---

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad iónica y clusters. Aplicaciones bioquímicas y medioambientales.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MCYT BQU2000-0245

DURACION DESDE: 2000 HASTA: 2003

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Complejación en fase gaseosa de ácidos ribonucleicos y desoxirribonucleicos con cationes  $Pb^{2+}$  en presencia de  $Mg^{2+}$ . Estudio teórico y experimental

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI-MCyT Acción Integrada Hispano-Frances HF 2001-0042.

DURACION DESDE: 2002 HASTA: 2004

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Red de excelencia en Química Teórica y Computacional.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MCYT BQU2001-5037-E

DURACION DESDE: 2003 HASTA: 2004

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Intrinsic Reactivity of New Molecular Materials.

ENTIDAD FINANCIADORA: Cost Action D26 /0014/03

DURACION DESDE: 2003 HASTA: 2007

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad intrínseca de Nuevos Materiales Moleculares.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MCYT BQU2003-00894

DURACION DESDE: 2003 HASTA: 2006

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Estructura y Dinámica en Procesos de Reactividad Química.

ENTIDAD FINANCIADORA: Proyectos de Investigación UAM-Grupo Santander Para la Cooperación con América Latina.

DURACION DESDE: 1-1-2006 HASTA: 31-12-2007

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Florentino Borondo Rodríguez

---

TITULO DEL PROYECTO: Materiales Foto- y Electroactivos para Celulas Solares Orgánicas e Híbridas. (MADRISOLAR)

ENTIDAD FINANCIADORA: Dirección General de Universidades e Investigación. Consejería de Educación. CAM. P-PPQ-000225-0505.

DURACION DESDE: 2006 HASTA: 2010

INVESTIGADOR PRINCIPAL: N. Martín.

---

TITULO DEL PROYECTO: Modelización de Materiales Moleculares y Nanoestructuras.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MEC CTQ2006-08558

DURACION DESDE: 2006 HASTA: 2009

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: International Seminar in Theoretical Chemistry and Computational Modelling.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MEC CTQ2006-28324-E

DURACION DESDE: 2007 HASTA:

INVESTIGADOR PRINCIPAL: O. Mó.

---

TITULO DEL PROYECTO: CONSOLIDER on Molecular Nanoscience.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MEC CSD 2007-00010

DURACION DESDE: 2007 HASTA: 2011

COORDINADOR: E. Coronado.

---

TITULO DEL PROYECTO: Clusters as building blocks in nanotechnology.

ENTIDAD FINANCIADORA: Acción Integrada Hispano-Francesa HF2007-0067

DURACION DESDE: 2007 HASTA: 2009

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Alcamí

---

-TITULO DEL PROYECTO: Chemistry with Ultrashort Pulses and Free-Electron Lasers: Looking for Control Strategies Through <sup>3</sup>Exact<sup>2</sup> Computations. COST action CM0702.

ENTIDAD FINANCIADORA: European Science Foundation

DURACION DESDE: 2008 HASTA: 2012

INVESTIGADOR PRINCIPAL: F. Martín

---

TITULO DEL PROYECTO: Dinámica de moléculas y clusters en fase gas y superficies.

ENTIDAD FINANCIADORA: Centro Estudios de America Latina de la UAM (CEAL-UAM) y Banco de Santander

DURACION DESDE: 2009 HASTA: 2010

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Alcamí

---

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad en fase gas. Nuevos materiales moleculares y discriminación quiral.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGPTC- MICINN CTQ2009-13129-C02-01

DURACION DESDE: 2009 HASTA: 2012

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Estudio de la Interacción de Iones de Metales Pesados con Biomoléculas.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MICINN CTQ2009-07197-E

DURACION DESDE: 2010 HASTA: 2012

INVESTIGADOR PRINCIPAL: O. Mó.

---

TITULO DEL PROYECTO: Materiales Foto- y Electroactivos para Celulas Solares Orgánicas e Híbridas. (MADRISOLAR2)

ENTIDAD FINANCIADORA: Dirección General de Universidades e Investigación. Consejería de Educación. CAM. S2009PPQ-1533.

DURACION DESDE: 2010 HASTA: 2014

INVESTIGADOR PRINCIPAL: N. Martín.

---

TITULO DEL PROYECTO: Gestión del Programa Consolider- Ingenio 2011-2012

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MICINN CTQ2011-13605-E

DURACION DESDE: 2012 HASTA: 2013

INVESTIGADOR PRINCIPAL: O. Mó.

---

TITULO DEL PROYECTO: Interacciones no-covalentes y Quiralidad en Nuevos Materiales

ENTIDAD FINANCIADORA: DGICT CTQ2012-35513-C02-01

DURACION DESDE: 2013 HASTA: 2016

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: ERASMUS MUNDUS “European Joint Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling (TCCM)”

ENTIDAD FINANCIADORA: European Commission. EACEA. Ref. EMMC FPA 2010-0147

DURACION DESDE: 2010 HASTA: 2019

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: XUV/X-ray Light and Fast ions for ultrafast chemistry. XLIC

ENTIDAD FINANCIADORA: European Science Foundation. COST Action CM 1204

DURACION DESDE: 2012 HASTA: 2016

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Alcamí

---

TITULO DEL PROYECTO: Dinámicas a diferentes escalas: desde moléculas pequeñas aisladas a nanodispositivos complejos.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI. CTQ2013-43698-P

DURACION DESDE: 2014 HASTA: 2016

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Alcamí.

---

TITULO DEL PROYECTO: Theoretical Chemistry and Computational Modelling. TCCM

ENTIDAD FINANCIADORA: European Commission. Research Executive Agency. **MSCA-ITN-EJD**. SEP-210137947

DURACION DESDE: 2015 HASTA: 2019

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Materiales Avanzados de Carbono para Fotovoltaica Molecular (FOTOCARBON)

ENTIDAD FINANCIADORA: Dirección General de Universidades e Investigación. Consejería de Educación. CAM. S2013/MIT-2841.

DURACION DESDE: 2014 HASTA: 2018

INVESTIGADOR PRINCIPAL: N. Martín

---

TITULO DEL PROYECTO: Modificación de la Reactividad y Diseño de Nuevos Materiales mediante Enlaces de Berilio y otras Interacciones No-Covalentes.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGICT CTQ2015-63997-C2-1-P

DURACION DESDE: 2016 HASTA: 2019

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

## PUBLICACIONES

---

1. AUTORES: O. Mó y M.A. Rios.  
TITULO: *Estudio Teórico de la Reactividad de Cresoles.*  
REF. REVISTA: *Afinidad* **38**, 1135 (1971). CLAVE=A
2. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J.I. Fernández Alonso.  
TITULO: *Theoretical study of charge-transfer complexes.*  
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem.*, **79**, 137 (1975). CLAVE=A
3. AUTORES: M. Yáñez, O. Mó and J.I. Fernández Alonso.  
TITULO: *A theoretical study of the electrophilic substitution on aminophenols and aminobenzenethiols.*  
REF. REVISTA: *Tetrahedron*, **31**, 245 (1977). CLAVE=A
4. AUTORES: J. Catalán, A. Macías, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Calculations on the inversion of anhydrous and hydrated aziridine.*  
REF. REVISTA: *Mol. Phys.*, **34**, 1429 (1977). CLAVE=A
5. AUTORES: O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Influence of polarization functions on molecular electrostatic potentials.*  
REF. REVISTA: *Theoret. Chim. Acta*, **47**, 263 (1978). CLAVE=A
6. AUTORES: J. Catalán, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Theoretical study of the structure of azetidione.*  
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.* **43**, 251 (1978). CLAVE=A
7. AUTORES: O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Structure and charge distribution of some alkynoyl cations. A theoretical study.*  
REF. REVISTA: *Theoret. Chim. Acta*, **53**, 337, (1979). CLAVE=A
8. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *Proton affinities and preferred protonation sites in 3- and 4- substituted pyridines. Prediction from 1s orbital energies.*  
REF. REVISTA: *J. Am. Chem. Soc.* **101**, 6520 (1979). CLAVE=A
9. AUTORES: M. Dorado, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study of the structure and charge distribution of some alkynylcarbenium ions.*  
REF. REVISTA: *J. Am. Chem. Soc.*, **102**, 947 (1980) CLAVE=A
10. AUTORES: J. Catalán, F. Escudero, J. Laso, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *The effect of substituents on the structure of dioxirane.*  
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.*, **69**, 217 (1980). CLAVE=A
11. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *Prediction of proton affinities and protonation sites using a multivariate linear correlation.*  
REF. REVISTA: *J. Chem. Soc. Perkin Trans. II*, 1409 (1982). CLAVE=A
12. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study of the structure, charge distribution and gas-phase basicity of 1H-indazole and its N-methyl derivatives.*  
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.*, **94**, 143 (1983). CLAVE=A



13. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study of the structure, charge distribution and gas-phase basicity of azaindoles.*  
REF. REVISTA: Tetrahedron, **39**, 2851 (1983). CLAVE=A
14. AUTORES: F. Escudero, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study of the charge distribution of aminopyridines, aminopyrimidines and some diazine N-oxides.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Soc. Perkin Trans. II, 1735 (1983). CLAVE=A
15. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *Theoretical study on the stable conformers of 1,3-diazetidone.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM, **106**, 251 (1984). CLAVE=A
16. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *Conformation of four-membered rings. Comparison between azetidone and 1,3-diazetidone.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM, **107**, 269 (1984). CLAVE=A
17. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *Influence of the tautomeric forms of azaindoles on their basicity in solution.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM, **107**, 263 (1984). CLAVE=A
18. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez, M. Yáñez and F. Amat-Guerri.  
TITULO: *Comparative study of the structure and properties of 1-methyl-7-azaindole and 7-methyl-7H-pyrrolo(2,3-b)pyridine, in their ground states.*  
REF. REVISTA: Nouv. J. Chim., **8**, 87 (1984). CLAVE=A
19. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, J.L.G. de Paz, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation of azanaphthalenes, azaindoles and purine bases. The "lone-pair charge" approach.*  
REF. REVISTA: Nucleic Acid Symposium Series, **14**, 105 (1984). CLAVE=A
20. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, J.L.G. de Paz, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study on the tautomer preference for 4(5)-substituted imidazoles.*  
REF. REVISTA: Nucleic Acid Symposium Series, **14**, 161 (1984). CLAVE=A
21. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, J.L.G. de Paz, P. Pérez, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *Basicity of azoles. Part 6. Calculated intrinsic basicities for methyl-substituted pyrazoles and imidazoles. Comparison to aqueous solution data: N-methylation effect.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem., **49**, 4379 (1984). CLAVE=A
22. AUTORES: F. Escudero, O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Structure and charge distribution of 4-substituted benzenediazonium ions.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **120**, 377 (1985). CLAVE=A
23. AUTORES: O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Calculation of radial couplings in the model potential and pseudopotential approaches. The NaH quasimolecule.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev., **A31**, 3977 (1985). CLAVE=A
24. AUTORES: L.F. Errea, L. Méndez, O. Mó and A. Riera.  
TITULO: *Nonadiabatic ionic-covalent transitions. Exponential model for the charge exchange and neutralization reaction  $Na + H \rightarrow Na^+ + H$ .*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **84**, 147 (1985). CLAVE=A

25. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz, and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation energies and tautomerism of azoles. Basis set effects.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **90**, 5597 (1986). CLAVE=A
26. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz, and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation of azines. An ab initio molecular orbital study.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **150**, 135 (1987). CLAVE=A
27. AUTORES: R. Mendizábal, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Energies and radial couplings for the  $^1\Sigma$  and  $^3\Sigma$  states of  $\text{NaHe}^+$  quasimolecule.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **150**, 345 (1987). CLAVE=A
28. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *Binding of  $\text{NH}_4^+$  to azoles in the gas phase. A theoretical study of the  $\text{N}\dots\text{H}^+\dots\text{N}$  Ionic hydrogen bond.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem., **52**, 1713 (1987). CLAVE=A
29. AUTORES: F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Feshbach resonant energies and widths in a pseudopotential approach.*  
REF. REVISTA: Europhys. Lett. **4**, 799 (1987). CLAVE=A
30. AUTORES: F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Feshbach and pseudopotential theories. A useful analogy.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **87**, 6635 (1987). CLAVE=A
31. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation of three membered ring heterocycles. An ab initio molecular orbital study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **91**, 6484 (1987). CLAVE=A
32. AUTORES: O. Mó and A. Riera.  
TITULO: *Excitation and charge exchange in  $\text{He}^+ + \text{Na}$  collisions.*  
REF. REVISTA: J. Phys. B **21**, 119 (1988). CLAVE=A
33. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Counterpoise estimates of the BSSE in the evaluation of protonation energies.*  
REF. REVISTA: Theoret. Chim. Acta **73**, 307 (1988). CLAVE=A
34. AUTORES: F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Energies and widths of  $(1s^2 3131')$  resonant states of  $\text{C}^{2+}$ ,  $\text{N}^{5+}$ ,  $\text{O}^{4+}$  and  $\text{N}^{6+}$ .*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. A **38**, 1094 (1988). CLAVE=A
35. AUTORES: O. Mó, and A. Riera.  
TITULO: *Energies and Radial couplings of  $^{1,3}\Sigma$  and  $^{1,3}\Pi$  states of  $\text{NaHe}^+$ , modified with a common translation factor.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **164**, 135 (1988). CLAVE=A
36. AUTORES: A. Macías, F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Atomic and molecular autoionizing states. A theoretical approach.*  
REF. REVISTA: J. Physique **50**, C1-37 (1989). CLAVE=A
37. AUTORES: A. Macías, O. Mó, A. Riera, M. Yáñez, H. Bachau, P. Galán and F. Martín.

- TITULO: *Extension of the conventional and pseudopotential Feshbach methods to the study of "two active electrons + core" resonance states. Application to  $C^{2+}$  ( $1s^2 3131'$ ) and  $Ne^{6+}$  ( $1s^2 3131'$ ) systems.*  
 REF. REVISTA: J. Physique **50**, C1-99 (1989). CLAVE=A
38. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *A molecular orbital study of azole- $Li^+$  complexes.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **93**, 3929 (1989). CLAVE=A
39. AUTORES: F. Fernández-Lázaro, J. Mendoza, O. Mó, S. Rodríguez-Morgade, T. Torres, M. Yáñez, and J. Elguero.  
 TITULO: *Phtalocyanine analogues. Part I. Synthesis, spectroscopy and theoretical study of 9,20-Dihydro-5,24:12,17-Diimino-7,10:19,22-dinitrilobenz (f,p)[1,2,4,9,11,12,14,19] octaazacycloicosine and MNDO calculations on its related Hückel heteroannulene.*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Soc. Perkin 2, 797 (1989). CLAVE=A
40. AUTORES: L.F. Errea, L. Méndez, O. Mó and A. Riera.  
 TITULO: *Molecular treatment of charge exchange in slow  $C^{+3} + H$  collisions.*  
 REF. REVISTA: Phys. Scripta **T28**, 67 (1989). CLAVE=A
41. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
 TITULO: *A MO analysis of the aromaticity of some nitrogen heterocyclic compounds.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **201**, 17 (1989). CLAVE=A
42. AUTORES: A. Macías, F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
 TITULO: *A new method to calculate lifetimes of atomic and molecular autoionizing states.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **202**, 235 (1989). CLAVE=A
43. AUTORES: S. Osimitsch, W. Jitschin, H. Reihl, K. Kleinpoppen, H.O. Lutz, O. Mó and A. Riera.  
 TITULO: *Alignment and spin exchange in the  $Na(3p)$  excitation by  $He^+$  ion impact.*  
 REF. REVISTA: Phys. Rev. A **40**, 2958 (1989). CLAVE=A
44. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz, M. Yáñez, I. Alkorta, J. Elguero, P. Goya and I. Rozas.  
 TITULO: *A molecular orbital study of the conformation (inversion and rotational barriers) and electronic properties of sulfamide.*  
 REF. REVISTA: Can. J. Chem. **67**, 2227 (1989). CLAVE=A
45. AUTORES: F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
 TITULO: *A study of core effects in quasimolecular structure.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **205**, 43 (1990). CLAVE=A
46. AUTORES: O. Mó.  
 TITULO: *Etats autoionisats. Une analogie utile entre les methodes de Feshbach et du Pseudo-potentiel.*  
 Capitulo del libro: "12ème Colloque sur la Physique des Collisions Atomiques et Electroniques", Vol. 2. Université de Caen et C.I.R.I.L. (1989). CLAVE:CL
47. AUTORES: O. Mó.  
 TITULO: *Interacciones en estados excitados. Uso de Potenciales efectivos.*  
 Capítulo del Libro: "Modelos teóricos e informáticos en la Química actual".  
 Ed. A. Riera. Editorial Centro de Estudios Ramón Areces, Madrid (1989). CLAVE=L

48. AUTORES: F. Borondo, O. Mó and A. Riera.  
 TITULO: *El continuo vibracional de moléculas diatómicas. Colisiones atómicas.*  
 Capitulo del libro: "Nuevas Tendencias de la Química Teórica". Vol. 2. Ed. S. Fraga.  
 C.S.I.C. (Madrid) 1989. CLAVE=CL
49. AUTORES: O. Mó and A. Riera.  
 TITULO: *Charge exchange in  $He^+ + Na(3p)$  collisions.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. B **23**, L373 (1990). CLAVE=A
50. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
 TITULO: *Enhanced  $Li^+$  binding energies of some azines: a molecular orbital study.*  
 REF. REVISTA: Theoret. Chim. Acta **77**, 1,(1990). CLAVE=A
51. AUTORES: J. Elguero, P. Goya, A. Martínez, I. Rozas, O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
 TITULO: *On the problem of the aromaticity of 1,2,6-Thiadiazine 1,1-Dioxides.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **3**, 470 (1990). CLAVE=A
52. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, F. Anvia and R.W. Taft.  
 TITULO: *An experimental and theoretical study of  $Li^+$  affinities of methyl diazoles.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **94**, 4796, (1990). CLAVE=A
53. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, J.L.M. Abboud and J. Elguero.  
 TITULO: *Bond Activation by protonation in the gas phase.*  
 REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **172**, 471 (1990). CLAVE=A
54. AUTORES: O. Mó  
 TITULO: *Polarización e Intercambio de Spín en Colisiones Ión-Atomo.*  
 REF. REVISTA: Anal. de Física A **86**, 111 (1990). CLAVE=A
55. AUTORES: L. Méndez, I.L. Cooper, A.S. Dickinson, O. Mó and A. Riera.  
 TITULO: *Molecular treatment of mutual neutralization in slow  $Li^+ + H$  collisions.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. B **23**, 2797 (1990). CLAVE=A
56. AUTORES: M. Alcamí, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *A topological analysis of the bond activation in  $N_2H_4X^+$  and  $H_2O_2X^+$  ( $X=H, Li, Na, Al$ ) complexes.*  
 REF. REVISTA: Chem. Phys. Res. **1**, 119, (1990). CLAVE=A
57. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez and J.L.M. Abboud.  
 TITULO: *Ab initio MO study of the halogen cation basicities of some organic bases.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **4**, 177, (1991). CLAVE=A
58. AUTORES: L.F. Errea, B. Herrero, L. Méndez, O. Mó and A. Riera.  
 TITULO: *Charge exchange and excitation in  $C^{+3} + H$  collisions. I Molecular calculations.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. B **24**, 4049 (1991) CLAVE=A
59. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Ab initio molecular orbital treatment of hydroxylamine- $X^+$ -water and hydroxylamine- $X^+$ -ammonia ( $X=H, Li$ ) clusters.*  
 REF. REVISTA: Chem. Phys. **151**, 21, (1991). CLAVE=A

60. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *An ab initio molecular orbital study of the structure, energetics and bond activations of Al<sup>+</sup> complexes.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **234**, 357 (1991). CLAVE=A
61. AUTORES: O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical approach to ion-molecule interactions in the gas-phase.*  
Capítulo del Libro: "Trends in Physical Chemistry". Vol. 3, 81 (1992) CLAVE=CL
62. AUTORES: L. F. Errea, L. Méndez, O. Mó and A. Riera.  
TITULO: *Frontiers in Atomic Collisions.*  
Capítulo del Libro: "Computational Chemistry: Structure, Interactions and Reactivity."  
Editor: S. Fraga, Ed. Elsevier, Amsterdam, 1992. CLAVE=CL
63. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Enhanced Al<sup>+</sup> binding energies of some azoles. A theoretical study of azole-X<sup>+</sup> (X=Na, K, Al) complexes.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **96**, 3022 (1992). CLAVE=A
64. AUTORES: O. Mó and A. Riera.  
TITULO: *On Na atom excitation in low energy H + Na collisions.*  
REF. REVISTA: J. Phys. B **25**, L101 (1992). CLAVE=A
65. AUTORES: J.L.M. Abboud, T. Cañada, H. Homán, R. Notario, C. Catiuela, M.D. Díaz de Villegas, M.C. Bordejé, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas phase basicities of  $\beta$ -Lactams and azetidines. Cyclation effects. An experimental and theoretical study.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc., **114**, 4728, (1992). CLAVE=A
66. AUTORES: A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A GI ab initio MO study of the distonic ions H<sub>2</sub>C-O-Si<sup>+</sup> and their isomers.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett., **197**, 581, (1992). CLAVE=A
67. AUTORES: J. Tortajada, A. Total, J.P. Morizur, M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Experimental and theoretical study of C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>OAl<sup>+</sup> complexes in the gas phase.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem., **96**, 8309, (1992). CLAVE=A
68. AUTORES: A.L. Llamas-Saiz, C. Foces-Foces, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *Nature of the hydrogen bond: crystallographic vs. theoretical description of the O-H...N(sp<sup>2</sup>) hydrogen bond.*  
REF. REVISTA: Acta Cryst. **B48**, 700, (1992). CLAVE=A
69. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *Cooperative (nonpairwise) effects in water trimers: an ab initio molecular orbital study.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys., **97**, 6628 (1992). CLAVE=A
70. AUTORES: J.C. Madroñal, O. Mó, I.L. Cooper and A.S. Dickinson.  
TITULO: *Bonding in MgH<sup>+</sup> Quasimolecule.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **260**, 63 (1992). CLAVE=A
71. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, A. Total, J. Tortajada and J.P. Morizur.  
TITULO: *Structures and stabilities of [C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>NAI]<sup>+</sup> molecular ions. An ab initio molecular orbital study.*

- REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **97**, 5553 (1993) CLAVE=A
72. AUTORES: M.C. Bordejé, O. Mó, M. Yáñez, M. Herreros and J.L.M. Abboud.  
TITULO: *Cyclization effects on the gas-phase basicities of esters and ethers. An experimental and MO study.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **115**, 7389 (1993). CLAVE=A
73. AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *G2 ab initio Calculations on the Thermochemistry of [P,N,H<sub>n</sub>] (n=0,2) and [P,N,H<sub>n</sub>]<sup>+</sup> (n=0,3) species and on the potential energy surfaces of [P,N,H<sub>3</sub>]<sup>+</sup> singlet and triplet state cations.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **97**, 6607 (1993). CLAVE=A
74. AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *High level ab initio calculations on the structures and relative stabilities of [O,P,H] systems and their cations.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Let. **209**, 557 (1993). CLAVE=A
75. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz, M. Yáñez, M. Esseffar, W. Bouab, E. Ballesteros, M. Herreros, H. Homan, C. Lopez-Mardomingo, R. Notario and J.L.M. Abboud.  
TITULO: *Thiocarbonyl vs. Carbonyl Compounds: A Comparison of Intrinsic Reactivities.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **115**, 12468 (1993) CLAVE=A
76. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Stabilization of nitrogen containing three-membered rings by H<sup>+</sup> and Li<sup>+</sup> association in the gas -phase.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **115**, 11074 (1993) CLAVE=A
77. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, I. Rozas and J. Elguero  
TITULO: *Structure, Vibrational Frequencies and Thermodynamic Properties of Hydrogen Peroxide Dimers. An Ab Initio Molecular Orbital Study.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **100**, 2871 (1994) CLAVE=A
78. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, I. Rozas and J. Elguero  
TITULO: *Structure, Vibrational Frequencies and Thermodynamic Properties of Hydrogen Peroxide-Water Dimers. An Ab Initio Molecular Orbital Study.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Let. **219**, 45 (1994) CLAVE=A
79. AUTORES: J.-L.G. Abboud, R. Notario, E. Ballesteros, M. Herreros, O. Mó, M. Yáñez, J. Elguero, G. Boyer and R. Claramunt.  
TITULO: *Dissociative Attachment of Protons to 1-Fluoro- and 1-Chloro-Adamantane in the Gas-phase.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **116**, 2486 (1994) CLAVE=A
80. AUTORES: A. Martínez, J. Elguero, O.Mó and M. Yáñez  
TITULO: *An ab initio study of the azoniaspiro[2.2]pentane cation (azirineaziridinium ion).*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **115**, 45 (1994) CLAVE=A
81. AUTORES: A. Luna, M. Manuel, O.Mó and M. Yáñez  
TITULO: *G2 ab initio Calculations on the F<sup>+</sup> + OH<sub>2</sub> singlet and triplet potential energy surfaces.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **98**, 6980 (1994) CLAVE=A
82. AUTORES: M. Esseffar, O.Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Is the Depletion of Ozone by HSO an Exothermic Process?.*

- REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **101**, 2175 (1994) CLAVE=A
83. AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Thermochemistry of the Reactions of  $PH_2^+(\ ^3B_1)$  with CO. A G2 Molecular Orbital Study.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Let. **223**, 240 (1994). CLAVE=A
84. AUTORES: A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A topological description of  $Si^+$  and  $C^+$  adducts of formaldehyde.*  
REF. REVISTA: Anales de Física, **90**, 205 (1994). CLAVE=A
85. AUTORES: M.C. Bordejé, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Bond activation of four membered cycles by protonation in the gas phase.*  
REF. REVISTA: Anales de Física, **90**, 209 (1994). CLAVE=A
86. AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Thermochemistry of the Reactions of  $P^+(\ ^3P)$  and  $P^+(\ ^1D)$  with Formaldehyde. A G2 Molecular Orbital Study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **98**, 8679 (1994). CLAVE=A
87. AUTORES: A. Luna, O.Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Gas-Phase reactions of  $C^+(\ ^2P)$  and  $Si^+(\ ^2P)$  with oxygen bases. A G2 ab initio molecular orbital study.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **310**, 135 (1994) CLAVE=A
88. AUTORES: O.Mó, M. Yáñez and J. Elguero  
TITULO: *Cooperative Effects in the Cyclic Trimer of Methanol. An ab initio Molecular Orbital Study.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **314**, 73 (1994) CLAVE=A
89. AUTORES: O.Mó, M. Yáñez, M. Esseffar and J.L.M. Abboud  
TITULO: *The Topological Analysis of the Electronic Charge Densities as a Tool to Study Protonation Effects on Thiocarbonyl Compounds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **7**, 685 (1994) CLAVE=A
90. AUTORES: J. Tortajada, E. León, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Ab initio calculations on Formamidine- $X^+$  ( $X = H, Li, Na, Mg, \text{ and } Al$ ) complexes.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **98**, 12919 (1994). CLAVE=A
91. AUTORES: A.L. Llamas, C. Foces-Foces, O.Mó, M. Yáñez E. Elguero and J. Elguero  
TITULO: *The Geometry of Pyrazole: a test for ab initio calculations.*  
REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **16**, 263 (1995) CLAVE=A
92. AUTORES: S. Blanco, J.C. López, J.L. Alonso, O.Mó, M. Yáñez, N. Jagerovic and J.Elguero.  
TITULO: *Microwave Spectra and ab initio calculations of 1-Nitropyrazole.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. **344**, 241 (1995) CLAVE=A
93. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M. Eckert-Maksic and Z.B. Maksic.  
TITULO: *Bent Bonds in Bezocyclopropenes and their fluorinated derivatives.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **60**, 1638 (1995). CLAVE=A
94. AUTORES: O.Mó, M. Yáñez, A.L. Llamas-Saiz, C. Foces-Foces and J. Elguero  
TITULO: *Ab initio study of the effect of N-substituents on properties of pyrazoles.*

- REF. REVISTA: Tetrahedron **51**, 7045 (1995) CLAVE=A
95. AUTORES: M. Alcamí, I.L. Cooper, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Potential energy surfaces of the  $C_{2v}$  and  $D_{3h}$  ozone complexes with  $Li^+$ .*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **103**, 253 (1995) CLAVE=A
- 96.- AUTORES: J. Tortajada, E. León, J.P. Morizur, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Potential energy surface of protonated formamide and of formamide- $X^+$  ( $X = Li, Na, Mg, and Al$ ) complexes.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **99**, 13890 (1995). CLAVE=A
- 97.- AUTORES: F. Ijjaali, O. Mó, M. Yáñez and J.-L.G. Abboud.  
TITULO: *Hybridization effects on the intrinsic basicities of phosphorus and nitrogen containing bases.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **338**, 225 (1995). CLAVE=A
98. AUTORES: G. Boucoux, D. Drancourt, D. Leblanc, M. Yáñez and O. Mó.  
TITULO: *Gas-phase basicities of lactones.*  
REF. REVISTA: New J. Chem. **19**, 1243 (1995). CLAVE=A
- 99.- AUTORES: J.-L.G. Abboud, M. Herreros, R. Notario, M. Esseffar, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A New Bond from an Old Molecule: Formation, Stability, and Structure of  $P_4H^+$ .*  
REF. REVISTA: J. American Chem. Soc. **118**, 1126 (1996). CLAVE=A
- 100 AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *High-level ab initio calculations on  $CH_2^+(^2A_1)$  with  $PO(^2\Pi)$  reactions.*  
REF. REVISTA: Int. J. Quant. Chem. **57**, 559 (1996). CLAVE=A
- 101.- AUTORES: A.I. González, O. Mó, M. Yáñez, E. León, J. Tortajada, J.P. Morizur, I. Leito, P.C. Maria and J.F. Gal.  
TITULO: *Basicity of Acetamidine. Experimental and Theoretical Study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **100**, 10490 (1996) CLAVE=A
- 102.- AUTORES: O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The Theory of Atoms in Molecules as a Tool to Investigate the Reactivity of Tetraphosphacubane*  
REF. REVISTA: Canadian Journal of Chem. **74**, 901 (1996) CLAVE=A
103. AUTORES: M. T. Molina, W. Bouab, M. Esseffar, M. Herreros, R. Notario, J.-L.G. Abboud, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *The Intrinsic Acidity and Basicity of 2,2,2-Trifluoroethanethiol. The First Experimental and Theoretical Study.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **61**, 5485 (1996) CLAVE=A
104. AUTORES: J.-L.G. Abboud, M. Herreros, R. Notario, O. Mó, M. Yáñez, M. Regitz and J. Elguero.  
TITULO: *Tetraphosphacubane: An unexpectedly strong base in the gas-phase.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **61**, 7813 (1996) CLAVE=A
- 105.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Modeling Intrinsic Basicities: The Use of the Electrostatic Potentials and the Atoms-in-Molecules Theory.*  
REF. REVISTA: Theoretical and Computational Chemistry Series. Vol 3. Molecular Electrostatic Potentials: Concepts and Applications. Ed. J.S. Murray and K. Sen. Elsevier Amsterdam 1996. CLAVE=CL



- 106.- AUTORES: B. Amekraz, J. Tortajada, J.P. Morizur, A.I. González, O. Mó, M. Yáñez, I. Leito, P.C. Maria and J.F. Gal.  
TITULO: *Experimental and Theoretical Study of the Basicity of Guanidine. The Performance of DFT calculations vs. high level ab initio approaches.*  
REF. REVISTA: New. J. of Chem. **20**, 1011 (1996) CLAVE=A
- 107.- AUTORES: L. González, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *Cooperative Effects in Water Trimers. The Performance of Density Functional Approaches.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **371**, 1 (1996). CLAVE=A
- 108.- AUTORES: B. Amekraz, J. Tortajada, J.P. Morizur, A.I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Acetamidine-Mg<sup>+</sup>(<sup>2</sup>S) complexes. The performance of different exchange and correlation density functionals approaches.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **371**, 313 (1996) CLAVE=A
- 109.- AUTORES: M.C. Bordejé, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Binding Energies of Metal Monocations to  $\beta$ -lactones and  $\beta$ -lactams. A theoretical Study of cyclization effects.*  
REF. REVISTA: Structural Chem. **7**, 309 (1996). CLAVE=A
- 110.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *High level ab initio calculations on the 1,2-dithioglyoxal/1,2-dithiete isomerism.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **263**, 407 (1996). CLAVE=A
- 111.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M. Esseffar, A. El-Hammadi, M. Herreros, R. Notario and J.L.G. Abboud.  
TITULO: *Role of chelation and resonance an the intrinsic acidity and basicity of tropolone.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **62**, 3200 (1997) CLAVE=A
- 112.- AUTORES: M. Manuel, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *G2 molecular orbital study of the reactions of water with Cl<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P) and Cl<sup>+</sup>(<sup>1</sup>D).*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **101**, 1722 (1997). CLAVE=A
- 113.- AUTORES: E. Leon, B. Amekraz, J. Tortajada, J.P. Morizur, A.I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Acetamidine-X<sup>+</sup> and Guanidine-X<sup>+</sup> (X = Li, Na, Mg, Al) Complexes in the Gas-Phase. A Theoretical Study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **101**, 2489 (1997) CLAVE=A
114. AUTORES: M.T. Molina, M. Yáñez, O. Mó, R. Notario and J.-L.G. Abboud.  
TITULO: *The Thiocarbonyl Group.*  
REF. REVISTA: The chemistry of double-bonded functional groups. Supp. A3. Chapter 25  
Ed. S. Patai. J. Wiley & Sons Ltd. New York (1997) CLAVE=CL
- 115.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *High-level ab initio vs. DFT calculations on (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O complexes as prototypes of multiple hydrogen bond systems.*  
REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **18**, 1124 (1997). CLAVE=A
- 116.- AUTORES: M. Manuel, O. Mó and M. Yáñez.

- TITULO: *Thermochemistry of the reactions  $F^+(\ ^3P)$  and  $F^+(\ ^1D)$  with hydrogen sulfide. A Molecular orbital study.*  
REF. REVISTA: Mol. Phys. **91**, 503 (1997). CLAVE=A
- 117.- AUTORES: A. Luna, B. Amekraz, J. P. Morizur, J. Tortajada, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Reaction between Guanidine and  $Cu^+$  in the gas phase. An Experimental and Theoretical Study*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **101**, 5931 (1997) CLAVE=A
- 118.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *Study of the methanol trimer potential energy surface.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **107**, 3592 (1997). CLAVE=A
- 119.- AUTORES: M. Manuel, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Structure and Stability of  $[H_2, Cl, O]^+$  triplet state cations. A G2 ab initio molecular orbital study.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. **398/399**, 417 (1997). CLAVE=A
- 120.- AUTORES: J.M. Orza, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *Vibrational Spectra of N-Methylpyrazole: An experimental and theoretical study.*  
REF. REVISTA: Spectrochimica Acta A **53**, 1383 (1997). CLAVE=A
- 121.- AUTORES: A.I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Structure and stability of  $[H_2O_2]^+$  Doublet and Quartet State Cations. An ab initio Molecular Orbital Study.*  
REF. REVISTA: Anales de Química (International Edition) **93**, 310 (1997). CLAVE=A
- 122.- AUTORES: H. Homan, M. Herreros, R. Notario, J.-L.G. Abboud, M. Esseffar, O. Mó, M. Yáñez, C. Foces-Foces, A. Ramos-Gallardo, M. Martinez-Ripoll, A. Vegas, M.T. Molina, J. Casanovas, C. Turrión, P. Jimenez, M.V. Roux,  
TITULO: *Strain effects in protonated carbonyl compounds. An experimental and ab initio, treatment of acyclic carboxamides and ketones.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **62**, 8503 (1997) CLAVE=A
- 123.- AUTORES: G. Bouchoux, D. Leblanc, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Structural effects on the intrinsic basicities of  $\alpha,\beta$ -unsaturated lactones and ketones.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **62**, 8439 (1997). CLAVE=A
- 124.- AUTORES: J.C. Guillemin, M. Decouzon, PC Maria, JF Gal, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas-Phase basicities and acidities of ethyl-, vinyl- and ethynylarsines. An Experimental and Theoretical Study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **101**, 9525 (1997). CLAVE=A
- 125.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *High-level ab initio calculations on the intramolecular hydrogen bond in thiomalonaldehyde.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **101**, 9710 (1997). CLAVE=A
- 126.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Ionic Intrinsic Reactivities of Strained Systems*  
REF. REVISTA: **Recent Research Developments in Physical Chemistry (1997)**  
CLAVE=CL
- 127.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Proton Transfer in Dissociative Protonation Processes.*

- REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 1356 (1998). CLAVE=A
- 128.-** AUTORES: A. Luna, B. Amekraz, J. Tortajada, J.P. Morizur, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Modeling the interactions between peptide functions and Cu(I): Formamide Cu<sup>+</sup> reaction in the gas-phase.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **120**, 5411 (1998) CLAVE=A
- 129.-** AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *G2 ab initio Calculations on three-membered rings. The role of Hydrogen Atoms*  
REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **19**, 1072 (1998) CLAVE=A
- 130.-** AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Ab initio and density functional theory calculations on the protonated species of As<sub>4</sub> clusters.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **108**, 8957 (1998) CLAVE=A
- 131.-** AUTORES: A. Luna, J.P. Morizur, J. Tortajada, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The role of Cu<sup>+</sup> association on the formamide → formamidic acid → (aminohydroxy) carbene isomerization in the gas-phase.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 4652 (1998) CLAVE=A
- 132.-** AUTORES: **O. Mó.**  
TITULO: **Modelización de Clusters por enlaces de Hidrógeno.**  
REF. REVISTA: **Temas Actuales de la Química Cuántica. Cap.8 (1998).**  
CLAVE=CL
- 133.-** AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *High level ab initio and density functional theory studies on methanol-water dimers and cyclic methanol(water)<sub>2</sub> trimer.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **109**, 139 (1998) CLAVE=A
- 134.-** AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Stabilization of zwitterionic forms of three-membered rings by cationization in the gas phase*  
REF. REVISTA: J. Mol Struct. (THEOCHEM) **433**, 217 (1998) CLAVE=A
- 135.-** AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Very strong Hydrogen Bonds in Neutral Molecules: The Phosphinic Acid Dimers*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **109**, 2685 (1998) CLAVE=A
- 136.-** AUTORES: J.-L.G. Abboud, M. Esseffar, M. Herreros, O. Mó, M.T. Molina, R. Notario, and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation of S<sub>4</sub>, S<sub>6</sub> and S<sub>8</sub> sulfur cycles. A Quantitative study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 7996 (1998) CLAVE=A
- 137.-** AUTORES: O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Density Functional Theory Calculations on Hydrogen-Bonded Tropolone-(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub> Clusters.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 8174 (1998) CLAVE=A
- 138.-** AUTORES: G. Bouchoux, JF Gal, PC Maria, J.E.Szulejko, T.B. McMahon, J. Tortajada, A. Luna, M. Yáñez and O. Mó  
TITULO: *Gas-Phase Basicities of Acid Anhydrides.*  
REF. REVISTA: J. Phys.Chem. **102**, 9183 (1998). CLAVE=A
- 139.-** AUTORES: , M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, A. Luna, J. Tortajada and J.P. Morizur.

- TITULO: *Exploring the potential energy surface of the association of Cu<sup>+</sup> to oxaziridine, nitrosomethane and formaldoxime.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem., **102**, 10120 (1998) CLAVE=A
- 140.-** AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Ionic intrinsic reactivities of strained systems*  
REF. REVISTA: *Recent Res. Devel. in Physical Chemistry* **2**, 827 (1998) CLAVE=CL
- 141.-** AUTORES: A. I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Exploring the Potential Energy Surfaces of the Reactions of O<sup>+</sup>(<sup>4</sup>S) and O<sup>+</sup>(<sup>4</sup>S) with ammonia*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass. Spectr. **179/180**, 77 (1998) CLAVE=A
- 142.-** AUTORES: M. Begtrup, T. Balle, R.M. Claramunt, D. Sanz, JA. Jimenez, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *GIAO ab initio calculations of nuclear shieldings of monosubstituted benzenes and n-substituted pyrazoles.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **453** 255 (1998) CLAVE=A
- 143.** AUTORES: L. Infantes, C. Foces-Foces, P. Cabildo, R.M. Claramunt, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *The Structure of Aminoazoles and its Relationship with Aromaticity: crystal and molecular structure of two polymorphic forms of 4-aminopyrazole.*  
REF. REVISTA: Heterocycles **49**, 157 (1998) CLAVE=A
- 144.-** AUTORES: M. Manuel, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *The reactions of Cl<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P) and Cl<sup>+</sup>(<sup>1</sup>D) with hydrogen sulfide. A G2 molecular orbital study.*  
REF. REVISTA: Mol. Phys. **96**, 231 (1999). CLAVE=A
- 145.-** AUTORES: Z.B. Maksic , M. Eckert-Maksic, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *The Mills-Nixon Effect: Fallacies, Facts and Chemical Relevance.*  
REF. REVISTA: *Theoretical and Computational Chemistry vol 6. Pauling's Legacy. Modern Modeling of the Chemical Bonding.* Elsevier. Amsterdam (1999) CLAVE=CL
- 146.-** AUTORES: A. I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *A gas-phase basicity scale for selenocarbonyl compounds based on high-level ab initio and density functional theory calculations*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **103**, 1662 (1999) CLAVE=A
- 147.-** AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Substituent Effects on the Strength of the Intramolecular Hydrogen Bond of Thiomalonaldehyde.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **64**, 2314 (1999) CLAVE=A
- 148-** AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez and I.L. Cooper.  
TITULO: *An ab initio Molecular Orbital Study of XO<sub>2</sub><sup>+</sup> (X= F, Cl, Br, I) Systems.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **103**, 2793 (1999) CLAVE=A
- 149.-** AUTORES: N. Doslic, K. Sundermann, L. González, O. Mó, J. Giraud-Girard and O. Kuhn.  
TITULO: *Ultrafast photoinduced dissipative hydrogen switching dynamics in thioacetylaceton.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **1**, 1249 (1999) CLAVE=A
- 150.-** AUTORES: G. Bouchoux, M. Yáñez and O. Mó

- TITULO: *Isomerization and Dissociation Processes of Protonated Benzene and Protonated Fulvene in the Gas-Phase.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectr. **185/186/187**, 241 (1999). CLAVE=A
- 151.-** AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M. Decouzon, PC Maria, JF Gal and J.C. Guillemin  
TITULO: *Gas-Phase basicities and acidities trends in  $\alpha,\beta$ -unsaturated amines, phosphines and arsines.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **121**, 4653 (1999). CLAVE=A
- 152.-** AUTORES: M. Alcamí, A.I. González, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Performance of Density Functional Theory methods for the treatment of metal-ligand dications.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **307**, 244 (1999) CLAVE=A
- 153.-** AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Density Functional Theory Study on Ethanol Dimers and Cyclic Ethanol Trimers.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **111**, 3855 (1999) CLAVE=A
- 154.-** AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M.V. Roux, P. Jiménez, J.Z. Dávalos, M.A.V. Ribeiro da Silva, M. Agostinha, R. Matos, L.M. Amaral, A. Sánchez-Migallón, P. Cabildo, R. Claramunt, J. Elguero and J.F. Liebman.  
TITULO: *Enthalpies of Formation of N-Substituted Pyrazoles and Imidazoles.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **103**, 9336 (1999). CLAVE=A
- 155.-** AUTORES: J.A. Jiménez, R. Claramunt, O. Mó, F. Wehrmann, G. Buntkowsky, H.H. Limbach, R. Goddard and J. Elguero.  
TITULO: *The Structure of N-Aminopyrazole in the solid state and in solution: An experimental and computational study.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **1**, 5113 (1999) CLAVE=A
- 156.-** AUTORES: J.L. Abboud, R. Notario, O. Mó, M. Yáñez, R. Flammang, N. Jagerovic, I. Alkorta and J. Elguero.  
TITULO: *4-nitropyrazole: a nitrogen or an oxygen base in the gas phase?*  
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **12**, 787 (1999) CLAVE=A
- 157.-** AUTORES: A. I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The structure and stability of  $Sb_4H^+$  clusters. The importance of non-classical structures.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **112**, 2258 (2000) CLAVE=A
- 158.-** AUTORES: O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: ENLACE QUÍMICO Y ESTRUCTURA MOLECULAR  
Editorial J.M. Bosch (Barcelona 2000) CLAVE= Libro
- 159.-** AUTORES: A. Luna, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO:  *$Cu^+$  binding energies. Dramatic failure of the G2 method vs. Good performance of the B3LYP approach.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **320**, 129 (2000) CLAVE=A
- 160.-** AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, and I.L. Cooper.  
TITULO: *The performance of density-functional theory in challenging cases: Halogen oxides.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **112**, 6131 (2000) CLAVE=A
- 161.-** AUTORES: A. Luna, B. Amekraz, J.P. Morizur, J. Tortajada, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Reactions of Urea with  $Cu^+$  in the Gas Phase: An Experimental and Theoretical Study:*

- REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **104**, 3132 (2000) CLAVE=A
- 162.-** AUTORES: J.-L. M. Abboud, I. Alkorta, J.Z. Dávalos, J.F. Gal, M. Herreros, P.C. Maria, O. Mó, M.T. Molina, R. Notario and M. Yáñez.  
TITULO: *The P<sub>4</sub>...Li Ion in the Gas Phase: A Planetary System.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **122**, 4451 (2000) CLAVE=A
- 163.-** AUTORES: M. Lamsabhi, M. Alcamí, O. Mó, W. Bouab, M. Esseffar, J.L.M. Abboud, and M. Yáñez.  
TITULO: *Are the Thiouracils Sulfur Bases in the Gas-phase?.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **104**, 5122 (2000) CLAVE=A
- 164.-** AUTORES: G. Bouchoux, B. Gaudin, D. Leblanc, M. Yáñez and O. Mó.  
TITULO: *Is ionized cyclopropylamine cyclic?.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass. Spectrometr. Ion Chem. **199**, 59 (2000) CLAVE=A
- 165.-** AUTORES: M. C. Oliveira, M.A. Almoester-Ferreira, O. Mó, M. Yáñez and H. Audier.  
TITULO: *Exploring the potential energy surface associated with the HBr loss from 2-bromobutane radical cations.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem A, **104**, 9287 (2000) CLAVE=A
- 166.-** AUTORES: A. Luna, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Cu<sup>+</sup> reactivity trends in sp, sp<sup>2</sup> and sp<sup>3</sup> nitrogen, phosphorus and arsenic containing bases.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spect. **201**, 215 (2000) CLAVE=A
- 167.-** AUTORES: F. Ijjaali, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *A Theoretical Study of the Reaction between N<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P) and Formaldehyde and Related processes in the Gas Phase.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **104**, 11132 (2000) CLAVE=A
- 168.-** AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation and Deprotonation of Thiomalonaldehyde. The role of the Intramolecular Hydrogen Bond*  
REF. REVISTA: "Recent Theoretical and Experimental Advances in Hydrogen Bonded Clusters". Ed. S.S. Xantheas. Kluwer Academic Pub. (2000). The Netherlands. CLAVE=CL
- 169.-** AUTORES: F. Ijjaali, M. El-Mouhtadi, M. Esseffar, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The role of the spin-forbidden processes in N<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P)+ NH<sub>3</sub> reactions in the gas phase.*  
REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **3**, 179 (2001) CLAVE=A
- 170.-** AUTORES: A. Benidar, R. Le Doucen, J.C. Guillemin. O. Mó, M. Yáñez.  
TITULO: *Vibrational Spectra, DFT calculations and Assignments of the syn- and the gauche forms of vinylphosphine.*  
REVISTA: J. Mol. Spectrosc. **205**, 252 (2001) CLAVE=A
- 171.-** AUTORES: F. Ijjaali, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Thermochemistry of the reactions between CN<sup>+</sup> and H<sub>2</sub>O in the gas phase.*  
REVISTA: Mol. Phys. **99**, 1129 (2001) CLAVE=A
- 172.-** AUTORES: J.F. Gal, M. Decouzon, P.C. Maria, A.I. González, O. Mó, M. Yáñez, S. El Chaouch and J.C. Guillemin.  
TITULO: *Acidity trends in  $\alpha,\beta$ -Unsaturated alkanes, silanes, germanes and stannanes.*  
REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **123**, 6353 (2001) CLAVE=A

- 173.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, L. González and J. Elguero.  
TITULO: *Spontaneous Self-ionization in the Gas Phase. A Theoretical Prediction.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Chem. **7**, 465 (2001) CLAVE=A
- 174.- AUTORES: I. Alkorta, I. Rozas, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero.  
TITULO: *Hydrogen bond vs. proton transfer between neutral molecules in the gas phase*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **105**, 7481 (2001) CLAVE=A
- 175.- AUTORES: M.C. Oliveira, M.A. Almoester-Ferreira, O. Mó, M. Yáñez, and H. Audier.  
TITULO: *Reaction Mechanisms for the HBr Loss from 2-Bromobutane Radical Cations.*  
REF. REVISTA: Adv. Mass Spectrom. **15**, 753 (2001) Ed. E. Gelpi. John Wiley & Sons. New York. CLAVE=CL
- 176.- AUTORES: A. Hoz, I. Almena, C. Foces-Foces, M. Yáñez, O. Mó, M. Alcamí, N. Jagerovic and J. Elguero  
TITULO: *Synthesis, X-ray structure and properties of 2-(1'-pyridin-2'-one)benzimidazole*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. B **105**, 12759 (2001) CLAVE=A
- 177.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Computational Chemistry. A useful (some times mandatory) tool in mass spectrometry Studies.*  
REF. REVISTA: Mass Spectrom. Rev. **20**, 195-245 (2001) CLAVE=A
- 178.- AUTORES: F. Ijjaali, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *High level ab initio study of the  $N^+(\text{}^3P)+SH_2$  reactions in the gas phase. The role of spin forbidden pathways.*  
REVISTA: Int. J. Quantum Chem. **86**, 130 (2002) CLAVE=A
- 179.- AUTORES: L. Boutreau, J. Tortajada, A. Luna, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Perturbation of the intramolecular hydrogen bonds of Glucose by  $Cu^+$  association.*  
REVISTA: Int. J. Quantum Chem. **86**, 138 (2002) CLAVE=A
- 180.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Modeling Intrinsic Basicities and Acidities*  
REF. REVISTA: J. Phys Org. Chem. (Rev. Article) **15**, 174 (2002) CLAVE=A
- 181.- AUTORES: M. Alcamí, A. Luna, O. Mó, M. Yáñez, L. Boutreau and J. Tortajada  
TITULO: *An Experimental and Theoretical Investigation of the Reactions between Glucose and  $Cu^+$  in the Gas Phase.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 2641 (2002) CLAVE=A
- 182.- AUTORES: J.C. Guillemin, S. El Chaouch, J.F. Gal, P.C. Maria, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas-Phase acidity of primary  $\alpha,\beta$ -unsaturated germanes and stannanes.*  
REF. REVISTA: Main Group Metal Chemistry, **25**, 85 (2002). CLAVE=A
- 183.- AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *Competition between  $X...H...Y$  intramolecular hydrogen bonds and  $X...Y$  ( $X=O, S; Y=Se, Te$ ) chalcogen-chalcogen interactions.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A, **106**, 4661 (2002) CLAVE=A
- 184.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, I. Alkorta and J. Elguero.

- TITULO: *Triaziridine and Tetrazetidine vs. Cyclic Water trimer and tetramer: A computational approach to the relationship between Molecular and Supramolecular Conformational Analysis.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **4**, 2123 (2002) CLAVE=A
- 185.-** AUTORES: A. Luna, M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, and J. Tortajada  
TITULO: *A theoretical study of the interaction between Ni<sup>+</sup> and small oxygen- and nitrogen-containing Bases.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom **217**, 119 (2002) CLAVE=A
- 186.-** AUTORES: O. Mó, M. Yáñez J.F. Gal, P.C. Maria and J.C.Guillemin.  
TITULO: *Vinyl and Ethynyl Silanes, Germanes and Stannanes. A new case of Dissociative Proton Attachment.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **15**, 509 (2002) CLAVE=A
- 187.-** AUTORES: G. Bouchoux, D. Defaye, T. McMahon, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Structural and energetic aspects of the protonation of phenol, catechol, resorcinol and hydroquinone.*  
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **8**, 2900 (2002) CLAVE=A
- 188.-** AUTORES: A. Benidar, R. Le Doucen, J.C.Guillemin, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Vibrational Spectra of Vinylarsine and Vinylstibine. An Experimental and Theoretical Study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 6262 (2002) CLAVE=A
- 189.-** AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The Crucial role of agostic interactions in the binding of Cu<sup>+</sup> to alkanes, silanes and germanes in the gas phase.*  
REF. REVISTA: J. Comp. Methods in Sciences and Engineering **2**, 411 (2002) CLAVE=A
- 190.-** AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *The Role of Chalcogen-chalcogen interactions on the intrinsic basicity and acidity of  $\beta$ -chalcogenovinylaldehydes, HC(=X)-CH=CH-CYH (X=O, S; Y=Se, Te).*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **8**, 3999 (2002) CLAVE=A
- 191.-** AUTORES: J.F. Gal, P.C. Maria, M. Decouzon, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas-Phase Lithium cation basicity of some benzene derivatives. An experimental and theoretical study.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom **219**, 445 (2002) CLAVE=A
- 192.-** AUTORES: L. Bouteau, P. Toulhoat, J. Tortajada, A. Luna, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Reactions between Glycolic Acid and Cu<sup>+</sup> in the Gas-phase. An experimental and theoretical study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **106**, 9359 (2002) CLAVE=A
- 193.-** AUTORES: L. Galiano, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas Phase chemistry of ethyl- and vinyl-amines, phosphines and arsines. A DFT study of the structure and stability of their Cu<sup>+</sup> complexes.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 9306 (2002) CLAVE=A
- 194.-** AUTORES: I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, M. Yáñez, and J. Del Bene.



- TITULO: *An ab initio study of the structural, energetic, bonding, and IR spectroscopic properties of complexes with dihydrogen bonds.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **106** , 9325 (2002) CLAVE=A
- 195.-** AUTORES: J. Del Bene, S.A. Perera, R.J. Bartlett, I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *One-Bond ( $^1dJ_{H-H}$ ) and Three-Bond ( $^3dJ_{X-M}$ ) Spin-Spin Coupling Constants across X-H...H-M Dihydrogen Bonds.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 9331 (2002) CLAVE=A
- 196.-** AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, J.C. Guillemin, E.H. Riague, J.F. Gal, P.C. Maria and C. Dubin-Poliart.  
 TITULO: *The gas-phase acidity of HCP, CH<sub>3</sub>CP, HCAs and CH<sub>3</sub>Cas. An unexpected enhanced acidity of the methyl group.*  
 REF. REVISTA: Chemistry. Eur.J. **8**, 4919 (2002) CLAVE=A
- 197.-** AUTORES: L. Boutreau, E. Leon, L. Rodriguez-Santiago, P.Toulhoat, O. Mó, and J. Tortajada.  
 TITULO: *Gas-Phase Reactivity of Cu<sup>+</sup> and Ag<sup>+</sup> with Glycerol: an Experimental and Theoretical Study.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **106**, 10563 (2002) CLAVE=A
- 198.-** AUTORES: M. Esseffar, E. Quintanilla, J.Z. Dávalos, J.L.M. Abboud, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Nitro derivatives of pyrrole, furan and 1H-tetrazole: ring or nitro bases?.*  
 REF. REVISTA: New J. Chem. **26**,1567 (2002) CLAVE=A
- 199.-** AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
 TITULO: *1,8-Chalcogen-Bridged Naphthalenes. Strong Carbon Bases in the Gas Phase.*  
 REF. REVISTA: New J. Chem. **26**, 1747 ( 2002) CLAVE=A
- 200.-** AUTORES: L. Galiano, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Gas-Phase Chemistry of Ethynyl-Amine, Phosphine and Arsine. Structure and stability of their Cu<sup>+</sup> and Ni<sup>+</sup> complexes.*  
 REF. REVISTA: Chem. Phys. Chem. **4**. 72 (2003) CLAVE=A
- 201.-** AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, J. Elguero, M.V. Roux, P. Jiménez, J,Z. Dávalos, M.A.V. Ribeiro da Silva, M. das D. M. C. Ribeiro da Silva, P. Cabildo, R. Claramunt.  
 TITULO: *Substituent effects on enthalpies of formation. Benzene derivatives.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 366 (2003). CLAVE=A
- 202.-** AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
 TITULO: *Structure and stability of [H<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>, N]<sup>+</sup> singlet state cations. A comparison between DFT and high-level ab initio calculations.*  
 REF. REVISTA: Int. J. Quantum Chem. **91**, 438 (2003) CLAVE=A
- 203.-** AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Agostic vs.  $\pi$ -interactions in complexes of ethynyl-silanes and ethynyl-germanes with Cu<sup>+</sup> in the gas phase.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 1370 (2003) CLAVE=A
- 204.-** AUTORES: J. Del Bene, S.A. Perera, R.J. Bartlett, M. Yáñez. , O. Mó, I. Alkorta, and J. Elguero.  
 TITULO: *Two-Bond F-N Spin-Spin Coupling Constants ( $^2hJ_{N-F}$ ) across FH...N Hydrogen Bonds.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 3121 (2003) CLAVE=A

- 205.-** AUTORES: J. Del Bene, S.A. Perera, R.J. Bartlett, M. Yáñez, O. Mó, I. Alkorta, and J. Elguero.  
TITULO: *Two-Bond N-F Spin-Spin Coupling Constants ( $^{2h}J_{N-F}$ ) across NH<sup>+</sup>...F Hydrogen Bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 3126 (2003) CLAVE=A
- 206.-** AUTORES: J. Del Bene, S.A. Perera, R.J. Bartlett, M. Yáñez, O. Mó, J. Elguero, and I. Alkorta.  
TITULO: *Two-Bond  $^{13}C$ - $^{15}N$  Spin-Spin Coupling Constants ( $^{2h}J_{C-N}$ ) across C-H-N Hydrogen Bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 3222 (2003) CLAVE=A
- 207.-** AUTORES: M. Esseffar, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas-phase reactivity of lactones. Structures and stability of their Cu<sup>+</sup> complexes.*  
REF. REVISTA: Mol. Phys. **101**, 1249 (2003) CLAVE=A
- 208.-** AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Binding energies of Cu<sup>+</sup> to saturated and  $\alpha,\beta$ -unsaturated alkanes, silanes and germanes. The role of agostic interactions.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom. **227**, 401 (2003) CLAVE=A
- 209.-** AUTORES: A. Luna, O. Mó, M. Yáñez, J.P. Morizur, E. Leclerc, B. Desmazières, V. Haldys, J. Chamot-Rooke and J. Tortajada.  
TITULO: *Specific reactivity of alkenes with transition metal cations. 1-Pentene- and 1-Octene-Cu<sup>+</sup> reactions in the gas phase.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass. Spectrom. **228**, 359 (2003) CLAVE=A
- 210.-** AUTORES: J.F. Gal, P.C. Maria, M. Decouzon, O. Mó, M. Yáñez, and J.-L. M. Abboud.  
TITULO: *Lithium-Cation/ $\pi$  complexes of aromatic systems. The effect of increasing the number of fused rings.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **125**, 10394 (2003) CLAVE=A
- 211.-** AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *Characterization of intramolecular hydrogen bonds and other weak intramolecular interactions on the basis of the topology of the charge density.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **5**, 2942 (2003) CLAVE=A
- 212.-** AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *Cyclization triggered by deprotonation. The gas-phase acidity of 1,8-Chalcogen-bridged naphthalenes.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **4**, 830 (2003) CLAVE=A
- 213.-** AUTORES: O. Mó and M. Yáñez, J.F. Gal, P.C. Maria, M. Decouzon.  
TITULO: *Enhanced Li<sup>+</sup> Binding energies in alkylbenzene derivatives. The scorpion effect.*  
REF. REVISTA: Chemistry European J. **9**, 4330 (2003) CLAVE=A
- 214.-** AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *Resonance Assisted Intramolecular Chalcogen-Chalcogen Interactions?*  
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **9**, 4548 (2003) CLAVE=A
- 215.-** AUTORES: M.C. Sicilia, O. Mó, M. Yáñez, J.C. Guillemin, J.F. Gal and P.C. Maria.  
TITULO: *Is Allylphosphine a Carbon or a Phosphorus base in the gas phase?*  
REF. REVISTA: Eur. J. Mass Spectrom. **9**, 257 (2003) CLAVE=A

- 216.-** AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *The importance of agostic-type interactions on the gas-phase of saturated and  $\alpha,\beta$ -unsaturated alkanes, silanes and germanes towards  $Ni^+$ .*  
REF. REVISTA: New J. Chem. **27**, 1657 (2003) CLAVE=A
- 217.-** AUTORES: A. El Firdoussi, M. Esseffar, W. Bouab, A. Lamsabhi, J.L.M. Abboud, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Basicity of Lactones and cyclic ketones towards  $I_2$  and  $ICl$ . An experimental and theoretical study.*  
REF. REVISTA: New J. Chem. **27**, 1741 (2003) CLAVE=A
- 218.-** AUTORES: I. Corral, O. Mó, M. Yáñez, A. Scott, and L. Radom  
TITULO: *The Interaction between Neutral Molecules and  $Ca^{2+}$ : An Assessment of Theoretical Procedures.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **107**, 10456 (2003) CLAVE=A
- 219.-** AUTORES: A. M. Lamsabhi, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas-Phase Reactivity of uracil, 2-thiouracil, 4-thiouracil, and 2,4-dithiouracil towards the  $Cu^+$  cation: a DFT study.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **4**, 1011 (2003) CLAVE=A
- 220.-** AUTORES: J.-Y. Salpin, J. Tortajada, M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Optimization of extended basis sets and assessment of different theoretical schemes for Pb containing compounds.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **383**, 561 (2004) CLAVE=A
- 221.-** AUTORES: J. Del Bene, J. Elguero, I. Alkorta, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO:  *$^{19}F$ - $^{19}F$  Spin-Spin Coupling Constant surfaces for  $(HF)_2$  clusters: The orientation and distance dependence of the sign and magnitude of  $J_{F-F}$ .*  
REF. REVISTA: J. Chem Phys. **120**, 3237 (2004) CLAVE=A
- 222.-** AUTORES: A. Palacios, F. Martín, O. Mó, M. Yáñez, and Z. B. Maksic  
TITULO: *Stable doubly charged positive ions formed by direct attachment of alpha particles to HCN and HNC.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. Lett. **92**, 133001 (2004) CLAVE=A
- 223.-** AUTORES: M.A.V. Ribeiro da Silva, M. das D. M. C. Ribeiro da Silva, L.M.P.F. Amaral, P. Jiménez, M.V. Roux, J.Z. Dávalos, M. Temprano, P. Cabildo, R. Claramunt, J. Elguero, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Experimental thermochemical study of two 2-alkylbenzimidazole isomers (alkyl = propyl and isopropyl).*  
REF. REVISTA: J. Chem. Thermo. **36**, 533 (2004). CLAVE=A
- 224.-** AUTORES: J. Tortajada, B. Amekraz, M. Alcamí, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Unimolecular reactivity of strong metal cation complexes in the gas phase. Ethylenediamine- $Cu^+$*   
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **10**, 2927 (2004) CLAVE=A
- 225.-** AUTORES: P. Jiménez, M.V. Roux, J.Z. Dávalos, M. Temprano, M.A.V. Ribeiro da Silva, M. das D. M. C. Ribeiro da Silva, L.M.P.F. Amaral, P. Cabildo, R. Claramunt, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero.

- TITULO: *Substituent and ring effects on enthalpies of formation: 2-methyl- and 2-ethyl-benzimidazol vs. benzene- and imidazole-derivatives.*  
REF. REVISTA: Mol. Phys. **102**, 711 (2004). CLAVE=A
- 226.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *Bonding and Bonding Perturbation in Ion-Molecule Interactions in the Gas Phase.*  
REF. REVISTA: Encyclopedia of Computational Chemistry. Published on line  
URL: <http://www.mrw.interscience.wiley.com/ecc/articles/cn0062/frame.html> CLAVE=CL
- 227.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *The importance of non-conventional structures in the binding of Ni<sup>+</sup> to ethynyl-silanes and ethynyl-germanes.*  
REF. REVISTA: Theoret. Chem. Accounts. **112**, 298 (2004) CLAVE=A
- 228.- AUTORES: M. Alcamí, A. Luna, O. Mó, J. Tortajada and M. Yáñez  
TITULO: *A theoretical survey of the potential energy surface of Ethylenediamine + Cu<sup>+</sup> reactions.*  
REF. REVISTA: J. Phys.Chem. A **108**, 8367 (2004) CLAVE=A
- 229.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *Theoretical survey of the potential energy surfaces associated with the N<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P, <sup>1</sup>D) + C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> reactions in the gas phase.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **108**, 9762 (2004) CLAVE=A
- 230.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, M. Yáñez, J-Y. Salpin, J. Tortajada and L. Radom  
TITULO: *Gas-Phase Reactions between Urea and Ca<sup>2+</sup>: The importance of Coulomb explosions.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **108**, 10080 (2004) CLAVE=A
- 231.- AUTORES: A. El Firdoussi, M. Esseffar, W. Bouab, J.L.M. Abboud, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Push-pull electronic effects in charge-transfer complexes. The case of N-H and N-Me lactams.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **108**, 10568 (2004) CLAVE=A
- 232.- AUTORES: A. M. Lamsabhi, M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, and J. Tortajada.  
TITULO: *Cu<sup>2+</sup> association to uracil and its thio-derivatives. A theoretical study.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Chem. **5**, 1871-78 (2004) CLAVE=A
- 233.- AUTORES: I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, M. Yáñez, and J. Del Bene.  
TITULO: *Do coupling constants and chemical shift provide evidence for the existence of Resonance Assisted Hydrogen Bonds (RAHB)?*  
REF. REVISTA: Mol. Phys. **102**, 2563 (2004) CLAVE=A
- 234.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *Li<sup>+</sup> vs. Cu<sup>+</sup> association to toluene, phenyl-silane and phenyl-germane. Conventional vs. non-conventional  $\pi$ -complexes.*  
REF. REVISTA: Eur. J. Mass Spectrom. **10**, 921 (2004) CLAVE=A
- 235.- AUTORES: E. Quintanilla, J.Z. Dávalos, J.L.M. Abboud, M. Alcamí, M.P. Cabildo, R. Claramunt, J. Elguero, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Why does pivalaldehyde (trimethylacetaldehyde) unexpectedly seem more basic than 1-adamantanecarbaldehyde in the gas-phase?. A FT-ICR and high-level ab initio study.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **11**, 1826 (2005) CLAVE=A

- 236.- AUTORES: J.C. Guillemin, E. H. Riague, J.F. Gal, P.C. Maria, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Acidity trends in  $\alpha,\beta$ -unsaturated sulfur, selenium and tellurium derivatives. Comparison with C-, Si-, Ge-, Sn-, N-, P-, As-, and Sb-containing analogs.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **11**, 2145 (2005) CLAVE=A
- 237.- AUTORES: J. Del Bene, J. Elguero, I. Alkorta, O. Mó, and M. Yáñez .  
TITULO: *Ab initio study of the influence of trimer formation on one and two-bond spin-spin coupling constants across X-H-Y hydrogen bonds: Complexes AH:XH:YH<sub>3</sub> for A,X = <sup>19</sup>F, <sup>35</sup>Cl and Y = <sup>15</sup>N, <sup>31</sup>P.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem A. **109**, 2350 (2005) CLAVE=A
- 238.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, and J.C. Guillemin.  
TITULO: *A theoretical study on the dimmers of Aminoacrylonitrile (3-Amino-2-Propenenitrile), a compound of astrochemical interest.*  
REF. REVISTA: Arkivoc **IX**, 239 (2005) CLAVE=A
- 239.- AUTORES: O. Picazo, I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Chiral Recognition in phosphinic acids dimers.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **18**, 491 (2005) CLAVE=A
- 240.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M. Eckert-Maksic, Z.B. Maksic, I. Alkorta and J. Elguero.  
TITULO: *Periodic trends in bond dissociation energies. A theoretical study.*  
REF. REVISTA: J.Phys. Chem A **109**, 4359 (2005) CLAVE=A
- 241.- AUTORES: A. Benidar, J.C. Guillemin, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Infrared Spectra of a Species of Astrochemical Interest: Aminoacrylonitrile (3-Amino-2-Propenenitrile).*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **109**, 4705 (2005) CLAVE=A
- 242.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, J. Del Bene, I. Alkorta, and J. Elguero.  
TITULO: *Cooperativity and proton transfer in hydrogen-bonded triads.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **6**, 1411 (2005) CLAVE=A
- 243.- AUTORES: A. Palacios, I. Corral, O. Mó, F. Martín and M. Yáñez  
TITULO: *On the existence and lifetimes of Cu<sup>2+</sup> complexes with water, ammonia and hydrogen cyanide.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **123**, 014315 (1-5) (2005) CLAVE=A
- 244.- AUTORES: J. Zevallos, A. Toro-Labbé, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The role of Intramolecular Hydrogen Bond vs. other weak interactions on the conformation of hyponitrous acid and its mono- and dithio-derivatives.*  
REF. REVISTA: Struct. Chem. **16**, 295 (2005) CLAVE=A
- 245.- AUTORES: M.A.V. Ribeiro da Silva, M.das D. M. C. Ribeiro da Silva, L.M.P.F. Amaral, J. Elguero, P. Jiménez, M.V. Roux, J.Z. Dávalos, M. Temprano, P. Cabildo, R. Claramunt, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Thermochemical Properties of Two Benzimidazole Derivatives: 2-Phenyl- and 2-Benzylbenzimidazole.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Therm. **37**, 1168 (2005). CLAVE=A
- 246.- AUTORES: I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, M. Yáñez, and J. Del Bene.,  
TITULO: *Are RAHBs "resonance assisted"? A theoretical NMR study.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **411**, 411 (2005) CLAVE=A
- 247.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, M. Yáñez and L. Radom

- TITULO: *Why the  $\text{Ca}^{2+}$  and  $\text{K}^+$  binding energies of formaldehyde and ammonia are reversed with respect to their proton affinities?*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **109**, 6735 (2005) CLAVE=A
- 248.- AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *The NICS(Nucleus-Independent Chemical Shift) as a probe of the relative stability of  $\beta$ -Chalcogenovinylaldehydes stabilized through intramolecular chalcogen-chalcogen interactions.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **730**, 217 (2005) CLAVE=A
- 249.- AUTORES: A. El Firdoussi, M. Esseffar, W. Bouab, J.L.M. Abboud, O. Mó, M. Yáñez and M.F. Ruasse.  
TITULO: *Density Functional Theory Study of the Hydrogen Bond Interaction Between Lactones, Lactams and Methanol.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **109**, 9141 (2005) CLAVE=A
- 250.- AUTORES: X. Solans, M. Sodupe, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero.  
TITULO: *Hydrogen bond vs. Proton transfer in médium-size zeolitas. A Theoretical Study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. B **109**, 19301 (2005) CLAVE=A
- 251.- AUTORES: M. Güell, J. Poater, J. M. Luis, O. Mó, M. Yáñez and M. Solà  
TITULO: *An aromaticity analysis of Lithium-cation/ $\pi$  complexes of aromatic systems.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **6**, 2552 (2005) CLAVE=A
- 252.- AUTORES: G. Bouchoux, D. Leblanc, W. Bertrand, T.B. McMahon, J.E. Szulejko, F. Berruyer- Penaud, O. Mó, and M.Yáñez.  
TITULO: *Protonation thermochemistry of selected hydroxy and methoxy carbonyl molecules.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **109**, 11851 (2005) CLAVE=A
- 253.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *Analysis of the bonding in  $\text{XH}_3\text{-Cu}^+$  ( $X=\text{B,Al,Ga}$ ) complexes..*  
REF. REVISTA: Int. J. Quantum Chem. **106**, 659 (2006) CLAVE=A
- 254.- AUTORES: A. M. Lamsabhi, M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, and J. Tortajada.  
TITULO: *On the gas-phase deprotonation of Uracil- $\text{Cu}^{2+}$  and Thiouracil- $\text{Cu}^{2+}$  Complexes.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **110**, 1943 (2006) CLAVE=A
- 255.- AUTORES: L. Infantes, O. Mó, M. Yáñez, M.V. Roux, P. Jiménez, , J,Z. Dávalos, M. Temprano, M.A.V. Ribeiro da Silva, M.das D. M. C. Ribeiro da Silva, L.M.P.F. Amaral, P. Cabildo, R. Claramunt, and J. Elguero.  
TITULO: *Substituent Effects on Enthalpies of Formation of Nitrogen Heterocycles: 2-Substituted Benzimidazoles and Related Compounds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **110**, 2535 (2006). CLAVE=A
- 256.- AUTORES: C. Trujillo, A. M. Lamsabhi, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The reactions of  $F^+(\text{}^3P)$  and  $F^+(\text{}^1D)$  with silicon oxide. Possibility of spin-forbidden processes..*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **110**, 7130 (2006) CLAVE=A
- 257.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO:  *$\text{Cu}^+$  association to some  $\text{Ph-X}$  ( $X=\text{OH, NH}_2, \text{CHO, COOH, CF}_3$ ) phenyl derivatives. A comparison with  $\text{Li}^+$  complexes.*

- REF. REVISTA: Int. J. Mass. Spectrom. **255-256**, 20 (2006) CLAVE=A
- 258.-** AUTORES: J. Del Bene, J. Elguero, I. Alkorta, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *An ab initio study of  $^{15}\text{N}$ - $^{11}\text{B}$  spin-spin coupling constants for borazine and selected derivatives.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **110**, 9959 (2006) CLAVE=A
- 259.-** AUTORES: I. Corral, O. Mó, M. Yáñez J-Y Salpin, J. Tortajada, D. Moran and L. Radom  
TITULO: *An experimental and theoretical investigation of glycine+  $\text{Ca}^{2+}$  reactions in the gas phase*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **12**, 6787 (2006) CLAVE=A
- 260.-** AUTORES: J.F. Gal, P.C. Maria, O. Mó, M. Yáñez and D. Kuck.  
TITULO *Gaseous Complexes between Lithium Cation and Diphenylalkanes. The Pincer Effect.*  
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **12**, 7676 (2006) CLAVE=A
- 261.-** AUTORES: A. Luna, O. Mó, M. Yáñez J.F. Gal, P.C. Maria, and J.C. Guillemin.  
TITULO *Gas-phase protonation and deprotonation of acrylonitrile derivatives  $\text{N}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}-\text{X}$  ( $\text{X}=\text{CH}_3, \text{NH}_2, \text{PH}_2, \text{SiH}_3$ ).*  
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **12**, 9254 (2006) CLAVE=A
- 262.-** AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *On the stability of non-conventional  $\pi$ -complexes between  $\text{Ni}^+$  and toluene, phenyl-silane and phenyl-germane*  
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **19**, 495 (2006) CLAVE=A
- 263.-** AUTORES: A. M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez, J. Tortajada, and J-Y Salpin.  
TITULO *Unimolecular reactivity of Uracil- $\text{Cu}^{2+}$  complexes in the Gas-Phase*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **8**, 181 (2007) CLAVE=A
- 264.-** AUTORES: J.Z. Dávalos, R. Herrero, J.L.M. Abboud, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *How can a carbon atom be covalently bound to five ligands?. The case of  $\text{Si}_2(\text{CH}_3)_7^+$  or the beauty of symmetry.*  
REF. REVISTA: Angew. Chem. Int. Ed. **46**, 381 (2007) CLAVE=A
- 265.-** AUTORES: J. Del Bene, J. Elguero, I. Alkorta, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *Attacking Boron Nucleophiles: NMR Properties of 5-membered Diazaborole Rings.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **111**, 419 (2007) CLAVE=A
- 266.-** AUTORES: M. Esseffar, R. Herrero, E. Quintanilla, J.Z. Dávalos, , J.L.M. Abboud, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *Activation of the disulfide bond and chalcogen-chalcogen interactions. An experimental (FT-ICR) and computational study .*  
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **13**, 1796 (2007) CLAVE=A
- 267.-** AUTORES: J. Del Bene, O. Mó, M. Yáñez, I. Alkorta, and J. Elguero.  
TITULO: *Spin-Spin Coupling Constants for Iminoboranes  $\text{RBNH}$ ,  $\text{HBNR}$ , and  $\text{RBNR}$  and Comparisons with Corresponding Isoelectronic Acetylenes  $\text{RCCH}$  and  $\text{RCCR}$ , for  $\text{R} = \text{H}, \text{CH}_3, \text{NH}_2, \text{OH},$  and  $\text{F}$ .*  
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **3**, 549 (2007) CLAVE=A
- 268.-** AUTORES: E. Rincón, O. Mó, A. Toro-Labbé, and M. Yáñez.

- TITULO: *Effect of Ni(II), Cu(II) and Zn(II) association on the keto-enol tautomerism of thymine.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **9**, 2531 (2007) CLAVE=A
- 269.-** EDITORS: O. Mó, M. Yáñez.  
TITULO: *Special Issue on "COMPUTATIONAL ORGANIC CHEMISTRY"*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM, **811** (2007) CLAVE=L
- 270.-** AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, J-Y Salpin, and J. Tortajada.  
TITULO: *Thermochemistry, Bonding and Reactivity of Ni<sup>+</sup> and Ni<sup>2+</sup> in the gas phase*  
REF. REVISTA: Mass Spectrom. Rev. **26**, 474-516 (2007) CLAVE=A
- 271.-** AUTORES: C. Trujillo, O. Mó, M. Yáñez, J-Y Salpin, and J. Tortajada.  
TITULO: *Gas-Phase Reactions between Thiourea and Ca<sup>2+</sup>. New evidences for the formation of [Ca(NH<sub>3</sub>)]<sup>2+</sup> and other doubly charged species*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **8**, 1330 (2007) CLAVE=A
- 272.-** AUTORES: P. Sanz, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero  
TITULO: *The structure of the enols of β-diketones and their nitrogen counterparts: a study on the nature of intramolecular hydrogen bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **111**, 3585 (2007) CLAVE=A
- 273.-** AUTORES: C. Trujillo, O. Mó, M. Yáñez.  
TITULO: *A Theoretical Study of hydration effects on the Prototropic Tautomerism of Selenouracils.*  
REF. REVISTA: Org. Biomol. Chem. **5**, 3092 (2007) CLAVE=A
- 274.-** AUTORES: P. Sanz, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero  
TITULO: *Intramolecular hydrogen bond in hydroxymethylene and aminomethylene cyclobutanones and cyclobutenones and their nitrogen counterparts. Another example of non-Resonance Assisted Hydrogen Bonding..*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **8**, 1950 (2007) CLAVE=A
- 275.-** AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, A. Martín-Pendás, I. Alkorta, J. Elguero, and J. Del Bene  
TITULO: *Unusual substituent effects on the bonding of iminoboranes.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **9**, 3970 (2007) CLAVE=A
- 276.-** AUTORES: A. Luna, O. Mó, M. Yáñez, J.C. Guillemin, J.F. Gal, and P.C. Maria.  
TITULO: *Cyano substituent effects on enol and enethiol acidity and basicity: the protonation and deprotonation of 3-hydroxy-2-propenenitrile and its thio analogue.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom. **267**, 125 (2007) CLAVE=A
- 277.-** AUTORES: J.A. Gámez, J.C. Guillemin, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Strong Dissimilarities between the Gas-Phase Acidities of Saturated and α,β-Unsaturated Boranes and the corresponding Alanes and Gallanes.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **14**, 2201 (2008) CLAVE=A
- 278.-** AUTORES: A. M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez, J. Tortajada, and J-Y Salpin.  
TITULO: *Ni<sup>+</sup> reactions with aminoacetonitrile, a potential pre-biological molecule precursor of glycine.*  
REF. REVISTA: J. Mass Spectrom. **43**, 317 (2008) CLAVE=A
- 279.-** AUTORES: A. Medina, C.G. Claessens, G.M. Aminur Rahman, A.M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez,



- D.M. Guldi and T. Torres.  
TITULO: *Accelerating charge transfer in a triphenylamine-subphthalocyanine donor-acceptor system.*  
REF. REVISTA: Chem. Comm. 1759-1761 (2008) CLAVE=A
- 280.- AUTORES: A. Cimas, J.A. Gámez, O. Mó, M. Yáñez and J-Y. Salpin.  
TITULO *Computational study on the kinetics of the reaction between  $Ca^{2+}$  and Urea..*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **456**, 156 (2008) CLAVE=A
- 281.- AUTORES: P. Sanz, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero  
TITULO: *Bonding in Tropolone, 2-Aminotropone and Aminotropoimine. No evidence of Resonance Assisted Hydrogen Bonding..*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **14**, 4225 (2008) CLAVE=A
- 282.- AUTORES: C. Trujillo, O. Mó, M. Yáñez, J. Tortajada, and J-Y Salpin.  
TITULO: *Selenourea- $Ca^{2+}$  Reactions in the Gas-Phase. Similarities and dissimilarities with urea and thiourea..*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. B. **112**, 5479 (2008) CLAVE=A
- 283.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and R. Boyd.  
TITULO: *Gas-phase Interactions of Calcium ( $Ca^{2+}$ ) with Seleno Derivatives of Uracil*  
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **4**, 1002 (2008.) CLAVE=A
- 284.- AUTORES: C. Trujillo, A.M. Lamsabhi, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO *The importance of the oxidative character of doubly charged metal cations in binding neutral bases.  $[Urea-M]^{2+}$  and  $[Thiourea-M]^{2+}$  ( $M = Mg, Ca, Cu$ ) Complexes.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **10**, 3229 (2008) CLAVE=A
- 285.- AUTORES: C. Trujillo, A. M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez, and J-Y. Salpin.  
TITULO *Interactions of  $Ca^{2+}$  with uracil and its thio derivatives in the gas phase .*  
REF. REVISTA: Org. Biomol. Chem. **6**, 3695 (2008) CLAVE=A
- 286.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez, J-Y. Salpin, V. Haldys, J. Tortajada, J.C. Guillemin.  
TITULO:  *$Ni^+$  reactions with aminoacrylonitrile, a species of astrochemical relevance*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **112**, 10509 (2008) CLAVE=A
- 287.- AUTORES: M. Yáñez, O. Mó, I. Alkorta, and J. Del Bene.,  
TITULO: *Structures, bonding, and one-bond B-N and B-h spin-spin coupling constants for a series of neutral and anionic five-membered rings containing BN bonds.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **4**, 1869 (2008) CLAVE=A
- 288.- AUTORES: C. Trujillo, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO *Why selenouracils are as basic as uracil but stronger acids in the gas phase?.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **9**, 1715 (2008) CLAVE=A
- 289.- AUTORES: A. Eizaguirre, O. Mó, M. Yáñez, and J.C. Guillemin.  
TITULO:  *$\alpha,\beta$ -unsaturated and saturated derivatives of Be, Mg and Ca. Are they carbon or metal acids in the gas phase?*  
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **14**, 10423 (2008) CLAVE=A
- 290.- AUTORES: C. Trujillo, O. Mó, M. Yáñez, and B. Silvi.

- TITULO *On the Bonding of selenocyanates and isoselenocyanates and their protonated derivatives.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **4**,1593 (2008) CLAVE=A
- 291.-** AUTORES: M. Hurtado, J.G. Contreras, A. Matamala, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Conformational analysis, magnetic properties and nitrogen inversion of N-substituted 1,3-oxazines.*  
REF. REVISTA: New J. Chem. **32**, 2209 (2008) CLAVE=A
- 292.-** AUTORES: A.M. Lamsabhi, O. Mó, S. Gutierrez-Oliva, P. Perez, A. Toro-Labbé, and M. Yáñez.  
TITULO: *The mechanism of double proton transfer in dimmers of uracyl and 2-thiouracyl The reaction force perspective.*  
REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **30**, 389 (2009) CLAVE=A
- 293.-** AUTORES: P. Sanz, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero  
TITULO: *The effects of C by N replacement on the hydrogen bonding of malonaldehyde: N-formylformimidic acid, N-(hydroxymethyl) formamide and related compounds.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **11**, 762 (2009) CLAVE=A
- 294.-** AUTORES: M. Hurtado, O. Mó, M. Yáñez, and J.C. Guillemin.  
TITULO: *Acidity enhancement of the cyclopentadiene cycle by PH<sub>2</sub> and AsH<sub>2</sub> substitution.*  
REF. REVISTA: Croatica Chimica Acta. **82**, 1 (2009) CLAVE=A
- 295.-** AUTORES: J.E. del Bene, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Substituent effects on B-N bonding and coupling constants in five-membered rings N<sub>3</sub>B<sub>2</sub>H<sub>4</sub>X and N<sub>2</sub>B<sub>3</sub>H<sub>4</sub>X for X= H, F, and Li.*  
REF. REVISTA: Croatica Chimica Acta. **82**, 149 (2009) CLAVE=A
- 296.-** AUTORES: I. Alkorta, J. E. Del Bene, J. Elguero, O.Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study of diborenes HRB=BRH for R = CO, NH<sub>3</sub>, OH<sub>2</sub> PH<sub>3</sub>, SH<sub>2</sub>, ClH: Structures, energies and spin-spin coupling constants.*  
REF. REVISTA: Theor. Chem. Acc. **124**, 186-195 (2009) CLAVE=A
- 297.-** AUTORES: P.Sanz, M. Yáñez, O.Mó, I. Alkorta, and J. Elguero.  
TITULO: *Beryllium bonds, do they exist?.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **5**, 2763-2771 (2009) CLAVE=A
- 298.-** AUTORES: M. Esseffar, A. El Firdoussi, W. Bouab, J.L.M. Abboud, O. Mo, and M. Yáñez.  
TITULO: *Combined Experimental and Theoretical Study on Hydrogen-Bonded Complexes between Cyclic Ketones, Lactones and Lactams and 3,4-Dinitrophenol*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **113**, 14711-14717 (2009) CLAVE=A
- 299.-** AUTORES: M. Hurtado, A.M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J.-C. Guillemin.  
TITULO: *Are cyclopentadienylberyllium, magnesium and calcium hydrides carbon or metal acids in the gas phase?.*  
REF. REVISTA: Dalton Trans. **39**, 4593-4601 (2010) CLAVE=A
- 300.-** AUTORES: M. Hurtado, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Homoselenocisteina. An Oxygen or a Selenium acid in the gas-phase?*  
REF. REVISTA: Can. J. Chem. **88**,744-753 (2010) CLAVE=A
- 301.-** AUTORES: A.M. Lamsabhi, O. Mó, and M. Yáñez.

- TITULO: *Serine-Ca<sup>2+</sup> vs. Serine-Cu<sup>2+</sup> complexes. A theoretical perspective.*  
REF. REVISTA: Can. J. Chem. **88**, 759-768 (2010) CLAVE=A
- 302.-** AUTORES: Alvaro Cimas, Inés Corral, Otilia Mó, Manuel Yáñez and Nazario Martín.  
TITULO: *Hydrogen bonding in electronically excited states: A comparison between formic acid dimer and its mono-substituted thioderivatives.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **12**, 13037-46 (2010) CLAVE=A
- 303.-** AUTORES: José A. Gámez, Inés Corral, Otilia Mó and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Unexpected gas-phase ion chemistry results unraveled by computational chemistry.*  
REF. REVISTA: Current Org. Chem. **14**, 1600-1611 (2010) CLAVE=A
- 304.-** AUTORES: Ibon Alkorta, José Elguero, Janet E. Del Bene, Otilia Mó, and Manuel Yáñez,  
TITULO: *New insights into factors which influence B-N bonding in X: BH<sub>3-n</sub>F<sub>n</sub> and X: BH<sub>3-n</sub>Cl<sub>n</sub> for X= N<sub>2</sub>, HCN, LiCN, H<sub>2</sub>CNH, NF<sub>3</sub>, NH<sub>3</sub> and n = 0-3: The importance of deformation.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **16**, 11897-11905 (2010) CLAVE=A
- 305.-** AUTORES: A. Benidar, J-C. Guillemin, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Infrared Spectra of a Species of Potential Prebiotic and Astrochemical Interest: Cyanoethenethiol (HS-CH=CH-CN).*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **114**, 9583-9588 (2010) CLAVE=A
- 306.-** AUTORES: A. Gonzalez-Castrillo, M. Hurtado, O. Mó, M. Yáñez, and J.C. Guillemin.  
TITULO: *The role of hyperconjugative  $\pi$ -aromaticity on the enhanced acidity of CpXH<sub>3</sub> (X= C, Si, Ge) derivatives.*  
REF. REVISTA: Mol. Phys. **108**, 2467-2476 (2010) CLAVE=A
- 307.-** AUTORES: Janet E. Del Bene, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez,  
TITULO: *Structural and Electronic Effects on One-bond Spin-spin Coupling Constants <sup>1</sup>J(B-N), <sup>1</sup>J(B-H), <sup>1</sup>J(B-F) for Complexes of Nitrogen Bases with BH<sub>3</sub> and its Fluoro-substituted Derivatives.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **114**, 12775-12779 (2010) CLAVE=A
- 308.-** AUTORES: A. Eizaguirre, O.Mó, M. Yáñez and R.J. Boyd  
TITULO: *Effect of Sr<sup>2+</sup> association on the tautomerization processes of uracil and its dithio- and diseleno-derivatives.*  
REF. REVISTA: Org. Biomol. Chem. **9**, 423-431 (2011) CLAVE=A
- 309.-** AUTORES: Otilia Mó and Manuel Yáñez.  
TITULO: *La Química Computacional en la Nueva Frontera.*  
REF. REVISTA: Arbor **187**, 143-155 (2011) CLAVE=A
- 310.-** AUTORES: A. Eizaguirre, A.M. Lamsabhi, O.Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Assisted Intramolecular Proton Transfer in (uracil)<sub>2</sub>Ca<sup>2+</sup> complexes*  
REF. REVISTA: Theor. Chem. Acc. **128**, 457-464 (2011) CLAVE=A
- 311.-** AUTORES: Otilia Mó and Manuel Yáñez.  
TITULO: *La Química Cuántica o la larga travesía del desierto*  
REF. REVISTA: Gaceta de la RSEM **14**, 229-246 (2011) CLAVE=A
- 312.-** AUTORES: C. Trujillo, A. M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J.-Y. Salpin.  
TITULO: *Unimolecular Reactivity upon collision of Uracil-Ca<sup>2+</sup> complexes in Gas Phase: Comparison with uracil-M<sup>+</sup> (M= H, alkali metals) and uracil-M<sup>2+</sup> (M=Cu, Pb) systems..*

- REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom. **306**, 27-36 (2011). CLAVE=A
- 313.-** AUTORES: A. Eizaguirre, O.Mó, M. Yáñez and J-Y. Salpin.  
TITULO: *Modeling the interaction between peptide functions and Sr<sup>2+</sup>: Formamide- Sr<sup>2+</sup> reactions in the gas phase*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **13**, 18409 (2011) CLAVE=A
- 314.-** AUTORES: M. Hurtado, A-M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J-C. Guillemin .  
TITULO: *Stability trends and tautomerization of chalcocyclopentadienes. The role of aromaticity.*  
REF. REVISTA: New J. of Chem. **35**, 2713-2719 (2011) CLAVE=A
- 315.-** AUTORES: A-M. Lamsabhi, M. Yáñez, O. Mó, C. Trujillo, F. Blanco, I. Alkorta, J. Elguero, E. Caballero, M.S. Rodríguez-Morgade, CG. Claessens and T. Torres.  
TITULO: *TDDFT study of the UV-vis spectra of subporphyrazines and subphthalocyanines*  
REF. REVISTA: Journal of Porphyrins and Phthalocyanines **15**, 1220-1230 (2011) CLAVE=A
- 316.-** AUTORES:, I. Corral, A.M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Infrared spectra of charge-solvated vs. salt-bridge conformations of glycine-, serine- and cisteine-Ca<sup>2+</sup> complexes.*  
REF. REVISTA: Int. J. Quant. Chem. **112**, 2126-2134 (2012) CLAVE=A
- 317.-** AUTORES: M. Hurtado, A-M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J-C. Guillemin.  
TITULO: *On the origin of the enhanced acidity of chalcocyclopentadienes(cyclopentadiene-chalcogenols) in the gas phase.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **13**, 1167-1172 (2012), Inside cover, VIP, CLAVE=A
- 318.-** AUTORES: Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, José Elguero.  
TITULO: *Modulating the strength of hydrogen bonds through beryllium bonds.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **8**, 2293-2300 (2012) CLAVE=A
- 319.-** AUTORES: Goar Sanchez-Sanz, Ibon Alkorta, José Elguero, Manuel Yáñez, Otilia Mó.  
TITULO: *Strong interactions between copper halides and unsaturated systems: new metallocycles? or the importance of deformation.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **14**, 11468-11477 (2012)CLAVE=A
- 320.-** AUTORES: A. Eizaguirre, O.Mó, M. Yáñez, J-Y. Salpin and J. Tortajada.  
TITULO: *Modelling peptide-metal dication interactions: Formamide-Ca<sup>2+</sup> reactions in the Gas Phase.*  
REF. REVISTA: Org. Biomol. Chem. **10**, 7552-7561 (2012) CLAVE = A
- 321.-** AUTORES: A. Martin-Somer, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Unexpected Acidity Enhancement Triggered by AlH<sub>3</sub> Association to Phosphines.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem A. **116**, 6950-6954 (2012) CLAVE=A
- 322.-** AUTORES: A. Martin-Somer, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *The importance of deformation on the strength of beryllium bonds.*  
REF. REVISTA: Comp and Theoret. Chem. **998**, 74-79 (2012) CLAVE=A
- 323.-** AUTORES: Laura Albrecht, Russell J. Boyd, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Cooperativity between Hydrogen bonds and beryllium bonds in (H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>BeX<sub>2</sub> (n =1-3, X = H, F) complexes. A new perspective.*

- REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **14**, 14540-14547 (2012) CLAVE=A
- 324.-** AUTORES: M. M. Vallejos, A-M. Lamsabhi\*, N. M. Peruchena, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Microsolvation of Morpholine, a bidentate base. The importance of cooperativity*  
REF. REVISTA: J.Phys. Org. Chem. **25**, 1380-1390 (2012) CLAVE=A
- 325.-** AUTORES: M. Montero-Campillo, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Alkyl Mercury Compounds: An Assessment of DFT Methods*  
REF. REVISTA: Theoret. Chem. Acc. **132**, 1328-8 (2013) CLAVE=A
- 326.-** AUTORES: R. Verzeni, O. Mó, A. Cimas, I. Corral and M. Yáñez  
TITULO: *MS-CASPT2 study of the low-lying electronic excited states of di-thiosubstituted formic acid dimers*  
REF. REVISTA: Theoret. Chem. Acc. **132**, 1338-8 (2013) CLAVE=A
- 327.-** AUTORES: Gavin S. Heverly-Coulson, Russell J. Boyd, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Revealing unexpected mechanisms for nucleophilic attack on S-S and Se-Se bridges*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **19**, 3629-3638 (2013) CLAVE=A
- 328.-** AUTORES: A. Eizaguirre, O.Mó, M. Yáñez and J-Y. Salpin.  
TITULO: *Unimolecular reactivity of the [Urea-Sr]<sup>2+</sup> complex, a metastable dication in the gas phase: An experimental and theoretical perspective*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. B **117**, 2088-2095 (2013) CLAVE=A
- 329.-** AUTORES: M. Montero-Campillo, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *UV-Vis Spectra Of Subporphyrazines And Subphthalocyanines With Aluminum And Gallium: A Time Dependent-DFT Study*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **14**, 915-922 (2013) CLAVE=A
- 330.-** AUTORES: Oriana Brea, Manuel Yáñez, Otilia Mó, and Al Mokhtar Lamsabhi.  
TITULO: *On the stability of [(uracil)<sub>2</sub>-Cu]<sup>2+</sup> complexes in the gas phase. Different pathways for the formation of [(uracil-H)(uracil)-Cu]<sup>+</sup> monocations*  
REF. REVISTA: Org. Biomol. Chem., **11**, 3862-3870 (2013) CLAVE=A
- 331.-** AUTORES: Cristina Trujillo, Goar Sánchez-Sanz, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez,  
TITULO: *Resonance assisted hydrogen bonds in open-chain and cyclic structures of malonaldehyde enol: A theoretical study*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. **1048**, 138-151 (2013) CLAVE=A
- 332.-** AUTORES: M. Montero-Campillo, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Modulating weak intramolecular interactions through the formation of beryllium bonds: complexes between squaric acid and BeH<sub>2</sub>*  
REF. REVISTA: J. Mol. Mod. **19**, 2759-2766 (2013) CLAVE=A
- 333.-** AUTORES: Manuel Yáñez, Otilia Mó, Ibon Alkorta, José Elguero.  
TITULO: *Can conventional Bases and Unsaturated Hydrocarbons be converted into gas-phase Superacids that are stronger than most of the known Oxyacids? The role of Beryllium Bonds*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **19**, 11637-11643 (2013) CLAVE=A
- 334.-** AUTORES: M. Hurtado, M. Monte-Caballero, A-M. Lamsabhi, M. Yáñez, O. Mó and J-Y Salpin.

- TITULO: *Modelling interactions between an aminoacid and a metal dication: cysteine-Ca(II) reactions in the gas phase.*  
REF. REVISTA: ChemPlusChem **78**, 1124-1133 (2013), CLAVE=A
- 335.-** AUTORES: Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, and José Elguero.  
TITULO: *Enhancing and modulating the intrinsic acidity of imidazole and pyrazol through Beryllium bonds.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Mod. **19**, 4139-4145 (2013) CLAVE=A
- 336.-** AUTORES: Gavin S. Heverly-Coulson, Russell J. Boyd, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Dramatic substituent effects on the mechanisms of nucleophilic attacks on Se-S bridges.*  
REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **34**, 2537-2547 (2013) CLAVE=A
- 337.-** AUTORES: D. Nieto, S. Bruña, M. Montero-Campillo, J. Méndez, A.M. González-Vadillo, J. Perles, O. Mó and I. Cuadrado.  
TITULO: *Unexpected mechanochemical and silica gel-mediated formation of the highly electro-poor 1-cyanocarbonylferrocene.*  
REF. REVISTA: Chem. Comm. **49**, 9785-87 (2013) CLAVE=A
- 338.-** AUTORES: A-M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J-C. Guillemin.  
TITULO: *Conformational preferences of RCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CN (R= CH<sub>3</sub>, F, Cl) cyanides and their corresponding isocyanides.*  
REF. REVISTA: Struct. Chem. **24**, 1789-1798 (2013), CLAVE=A
- 339.-** AUTORES: A. Benidar, R. Georges, J-C. Guillemin O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Infrared Spectra of Cyanoacetaldehyde (NCCH<sub>2</sub>CHO), a Potential Prebiotic compound of Astrochemical Interest.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **14**, 2764-2771 (2013), CLAVE=A
- 340.-** AUTORES: Manuel Yáñez, Otilia Mó, Ibon Alkorta, and José Elguero.  
TITULO: *Spontaneous ion-pair formation in the gas phase induced by Beryllium bonds*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **590**, 22-26 (2013) CLAVE=A
- 341.-** AUTORES: M. Hurtado, A-M. Lamsabhi, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *Complexation of Ca<sup>2+</sup> with Selenocysteine and its effects on its intrinsic acidity*  
REF. REVISTA: Arkivoc **ii**, 207-223 (2014), CLAVE=A
- 342.-** AUTORES: Ibon Alkorta, José Elguero, Manuel Yáñez, and Otilia Mó.  
TITULO: *Cooperativity in Beryllium Bonds*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **16**, 4305-4312 (2014) CLAVE=A
- 343.-** AUTORES: A. Benidar, M. Montero-Campillo, A-M. Lamsabhi, O. Mó, J-C. Guillemin and M. Yáñez.  
TITULO: *On the Structures, lifetimes, and Infrared Spectra of Alkyl Mercury Hydrides.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **15**, 530-541 (2014), CLAVE=A
- 344.-** AUTORES: Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, and José Elguero.  
TITULO: *Spontaneous proton transfers induced by Beryllium bonds*  
REF. REVISTA: Mol. Phys. **112**, 592-600 (2014) CLAVE=A
- 345.-** AUTORES: F. Aguilar-Galindo, M. Montero-Campillo, M. Yáñez, and O. Mó  
TITULO: *On the Stability of [Pb(Proline)]<sup>2+</sup> Complexes. Reconciling Theory with Experiment.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **598**, 91-95 (2014) CLAVE=A

- 346.-** AUTORES: M. Montero-Campillo, M. Yáñez, A-M. Lamsabhi, and O. Mó  
TITULO: *Spontaneous H<sub>2</sub> Loss through the Interaction of Squaric Acid Derivatives and BeH<sub>2</sub>*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **20**, 5309-5316 (2014) CLAVE=A
- 347.-** AUTORES: Laura Albrecht, Russell J. Boyd, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Changing weak halogen bonds into strong ones through cooperativity with beryllium bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **118**, 4205-4213 (2014) CLAVE=A
- 348.-** AUTORES: K. Lemishko, M. Montero-Campillo, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The Behavior of Carboxylic Acids Upon Complexation With Beryllium Compounds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **118**, 5720-5726 (2014) CLAVE=A
- 349.-** AUTORES: A. Martin-Somer, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Are Boryl radicals from amine- and phosphine-boranes the most stable radicals?.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **15**, 2288-2294 (2014) CLAVE=A
- 350.-** AUTORES: E. Fernandez Villanueva, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *On the existence and Characteristics of  $\pi$ -Beryllium bonds.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **16**, 17531-17536 (2014) CLAVE=A
- 351.-** AUTORES: M. Hurtado, O. Mó, M. Yáñez, B. Herrera, and A-M. Lamsabhi.  
TITULO: *New insights into the gas-phase unimolecular fragmentations of [Cysteine-Ca]<sup>2+</sup> complexes.*  
REF. REVISTA: Comp. Theor. Chem. **1047**, 38-46 (2014) CLAVE=A
- 352.-** AUTORES: A. Martin-Somer, M.M. Montero-Campillo, O. Mó, M. Yáñez, I. Alkorta and J. Elguero.  
TITULO: *Some Interesting Features of Non-Covalent Interactions*  
REF. REVISTA: Croat Chem.Acta. **87**,291-306 (2014) CLAVE=A
- 353.-** AUTORES: Kathy J. Chen, Otilia Mó, Manuel Yáñez, and Inés Corral  
TITULO: *Can transition metals and group II mono- and dications discriminate between homo- and heterochiral XXX' dimers (X,X'=H,Me; Y=O,S,Se)?*  
REF. REVISTA: Croat Chem.Acta. **87**,481-493 (2014) CLAVE=A
- 354.-** AUTORES: Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, Manuel Yáñez, and Janet E. Del Bene.  
TITULO: *Using Beryllium Bonds to Change Halogen Bonds From Traditional to Chlorine-shared to Ion-pair.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **17**, 2259-2267 (2015) CLAVE=A
- 355.-** AUTORES: A. Martin-Somer, O. Mó, M. Yáñez and JC Guillemin.  
TITULO: *Acidity enhancement of unsaturated bases of the group 15 by association with borane and beryllium dihydride. Unexpected boron and beryllium Bronsted acids.*  
REF. REVISTA: Dalton Trans. **44**, 1193-1202 (2015) DOI: 10.1039/c4dt02292k CLAVE=A
- 356.-** AUTORES: M.M. Montero-Campillo, S. Bruña, I. Cuadrado, and O. Mó  
TITULO: *Intervaleance Charge Transfer Across Non Covalent Interactions On Vinyl Silyl Biferrocenyl Compounds.*  
REF. REVISTA: Comp. Theor. Chem. **1053**, 281-288 (2015)

- 357.-** AUTORES: Marta Marín-Luna, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Interplay in  $BeR_2:C_6X_6:Y(-)$  complexes ( $R=H, F$  and  $Cl, X=H$  and  $F$ , and  $Y=Cl$  and  $Br$ ).*  
REF. REVISTA: *Molecules* **20**, 9961-9976 (2015) CLAVE=A
- 358.-** AUTORES: Oriana Brea, Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, José Elguero.  
TITULO: *Creating  $\sigma$ -holes trough the formation of berillium bonds.*  
REF. REVISTA: *Chem. Eur. J.* **21**, 12676-12682 (2015) CLAVE=A
- 359.-** AUTORES: J-F. Gal, M. Yáñez, O. Mó,  
TITULO: *The aluminum mono-cation basicity and affinity scales.*  
REF. REVISTA: *Eur. J. Mass Spectr.* **21**, 517-532 (2015) CLAVE=A
- 360.-** AUTORES: Marta Marín-Luna, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Simultaneous Aromatic-Beryllium Bonds and Aromatic-Anion Interactions: Naphthalene and Pyrene as Models of Fullerenes, Carbon Single-Walled Nanotubes (SWNTs) and Graphene.*  
REF. REVISTA: *ChemPhysChem.* **16**, 2680-2686 (2015) CLAVE=A
- 361.-** AUTORES: A-M. Lamsabhi, S. Gutierrez-Oliva, O. Mó, A. Toro-Labbé and M. Yáñez  
TITULO: *Effects of the Ionization in the Tautomerism of Uracil: A Reaction Electronic Flux Perspective.*  
REF. REVISTA: *J. Comp. Chem.* **36**, 2135-2145 (2015) CLAVE=A
- 362.-** AUTORES: Oriana Brea, Manuel Yáñez, Otilia Mó, and Al Mokhtar Lamsabhi.  
TITULO: *Why is the spontaneous deprotonation of  $[(Uracil)_2Cu]^{2+}$  Complexes accompanied by an enolization of the system?*  
REF. REVISTA: *ChemPhysChem* **16**, 2375-2382 (2015) CLAVE=A
- 363.-** AUTORES: Oriana Brea, Otilia Mó, and Manuel Yáñez.  
TITULO:  *$Ga^+$  Basicity and Affinity Scales Based on High-Level *Ab Initio* Calculations.*  
REF. REVISTA: *ChemPhysChem* **16**, 3206-3213 (2015) CLAVE=A
- 364.-** AUTORES: S. Bruña, I. Martínez –Montero, A.M. González-Vadillo, C. Martín-Fernández, M.M. Montero-Campillo, O. Mó, and I. Cuadrado.  
TITULO: *Ferrocene and Silicon-Containing Oxathiacrown Macrocycles and Linear Oligo-Oxathioethers obtained via Thiol-Ene Chemistry of a Redox-Active Bifunctional Vinylsiloxane.*  
REF. REVISTA: *Macromolecules* **48**, 6955-6969 (2015) CLAVE=A
- 365.-** AUTORES: Marta Marín-Luna, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Fullerene and corannulene derivatives acting as insulators of  $Cl^-$  and  $BeH_2$ .*  
REF. REVISTA: *PhysChemChemPhys* **18**, 6059-6068 (2016) CLAVE=A
- 366.-** AUTORES: M.Merced Montero-Campillo, Otilia Mó, Manuel Yáñez, Abdessamad Benidar, Cedric Rouxel, Nicolas Kerisit, Y. Trolez and Jean Claude Guillemin  
TITULO: *Gas Phase Infrared Spectroscopy of Substituted Cyanobutadiynes. The Role Played by Bromine Atom and Methyl Group as Substituents.*  
REF. REVISTA: *ChemPhysChem* **17**, 1018-1024 (2016) CLAVE=A
- 367.-** AUTORES: Al Mokhtar Lamsabhi, Margarita M. Vallejos, Barbara Herrera, Otilia Mó, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Effect of beryllium bonds on the keto-enol tautomerism of formamide derivatives. A subtle basicity-acidity balance.*



- REF. REVISTA: Theor. Chem. Acc. **135**, 147 (9 pg.) (2016) CLAVE=A
- 368.-** AUTORES: Oriana Brea, Ibon Alkorta, Otilia Mó, Manuel Yáñez, José Elguero, Inés Corral.  
TITULO: *Exergonic and spontaneous production of radicals through beryllium bonds.*  
REF. REVISTA: Angew. Chem. Int. Ed., **55**, 8736-8739 (2016) CLAVE=A
- 369.-** AUTORES: M.Merced. Montero-Campillo, Al Mokhtar Lamsabhi, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *On the Photochemical Behavior of Beryllium Complexes With Subporphyrazines and Subphthalocyanines.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **120**, 4845-4852 (2016) DOI: 10.1021/acs.jpca.5b12374
- 370.-** AUTORES: Elena Kusevska, M.Merced. Montero-Campillo, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Boron-Boron One Electron Sigma Bonds vs.B-X-B bridge structures.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **22**, 13697-13704 (2016) CLAVE=A
- 371.-** AUTORES: Oriana Brea, Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, José Elguero.  
TITULO: *On the existence of intramolecular one-electron Be-Be bonds.*  
REF. REVISTA: Chem.Comm. **52**, 9656-9659 (2016), DOI: 10.1039/C6CC04350J CLAVE=A
- 372.-** AUTORES: S. Bruña, A. Garrido-Castro, J. Perles, M.M. Montero-Campillo, O. Mó, A.E. Kaifer and I. Cuadrado.  
TITULO: *Multi-Ferrocene-Containing Silanols as New Redox-Active Anion Receptors.*  
REF. REVISTA: Organometallics **35**, 3507-3519 (2016) CLAVE=A
- 373.-** AUTORES: Oriana Brea, Ibon Alkorta, Inés Corral, Otilia Mó, Manuel Yáñez, José Elguero.  
TITULO: *Intramolecular beryllium bonds. Further insights into resonance assistance phenomena.*  
REF. REVISTA: **Intermolecular Interactions in Crystals: Fundamentals of Crystal Engineering.** Ed J. J. Novoa. (in press) CLAVE=CL
- 374.-** AUTORES: M.Merced. Montero-Campillo, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Beryllium Subphthalocyanines Self-Assembling Properties.*  
REF. REVISTA: Can. J. Chem. **94**, 1015-1021 (2016) CLAVE=A
- 375.-** AUTORES: Oriana Brea, Ines Corral, Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, José Elguero.  
TITULO: *Beryllium-based Anion sponges close relatives of proton sponges.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **22**, 18322-18325 (2016) DOI: 10.1002/chem.201604325. Hot Paper. Portada. CLAVE=A
- 376.-** AUTORES: Rizalina Tama, Otilia Mó, Manuel Yáñez, and M. Merced Montero-Campillo  
TITULO: *Characterizing Magnesium Bonds: Main Features of a Non-Covalent Interaction.*  
REF. REVISTA: Theor. Chem. Acc. **136:36**, (9pgs) (2017) CLAVE=A
- 377.-** AUTORES: Elena Kusevska, M.Merced. Montero-Campillo, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *One-Electron Bonds in Frustrated Lewis Pair TPB Ligands: Boron Behaving as A Lewis Base.*  
REF. REVISTA: Angew. Chem. Int. Ed., (in press) CLAVE=A

**ESTANCIAS EN CENTROS EXTRANJEROS**  
**(superiores a cuatro semanas)**

---

CENTRO: Carnegie- Mellon University  
LOCALIDAD: Pittsburgh      PAIS: EEUU      AÑO: 1974-76      DURACION: 2 años  
TEMA: Estancia postdoctoral con el Prof. Pople

---

CENTRO: Sydney University  
LOCALIDAD: Sydney      PAIS: Australia      AÑO: 2003      DURACION: 3 meses  
TEMA: Visiting Professor en el grupo del Profesor Leo Radom

---

CENTRO: Université d'Evry val d'Essonne  
LOCALIDAD: Evry      PAIS: Francia      AÑO: 2004      DURACION: 1 mes  
TEMA: Visiting Professor en el grupo de la Profesora Jeanine Tortajada

---

CENTRO: Université d'Evry val d'Essonne  
LOCALIDAD: Evry      PAIS: Francia      AÑO: 2012      DURACION: 3 meses  
TEMA: Sabatico en el grupo de la Profesora Jeanine Tortajada

---

CENTRO: Dalhousie University  
LOCALIDAD: Dalhousie      PAIS: Canada      AÑO: 2012      DURACION: 3 meses  
TEMA: Visiting Professor en el grupo del Profesor Russell Boyd

---

## CONGRESOS

- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicacion Invitada  
CONGRESO: Euchem Conference on Ion Chemistry. Gaseous vs. Solvated Ions  
LUGAR DE CELEBRACION: Lido di Ostia AÑO: 1982
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicacion Invitada  
CONGRESO: Symposium on the Chemistry of Heterocyclic Compounds (VIIIth) and of Nucleic Acid Components  
LUGAR DE CELEBRACION: Praga (Checoslovaquia) AÑO: 1984
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Miembro del Comité Organizador  
CONGRESO: First Europhysics Summer School on Chemical Physics  
LUGAR DE CELEBRACION: Santander (España) AÑO: 1986
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 12<sup>eme</sup> Colloque sur la Physique des Collisions Atomiques et Electroniques.  
LUGAR DE CELEBRACION: Caen (Francia) AÑO: 1988
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Miembro del Comité Organizador  
CONGRESO: Third Europhysics Summer School on Chemical Physics  
LUGAR DE CELEBRACION: Santander (España) AÑO: 1988
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada.  
CONGRESO: Second Euchem Conference on the Gas Phase Ion Chemistry. Structure and Stereochemistry.  
LUGAR DE CELEBRACION: Frascati-Roma (Italia) AÑO: 1989
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Forty Years of Quantum Chemistry. An International Conference in Honor of Prof. J.A. Pople.  
LUGAR DE CELEBRACION: Athens, Georgia (U.S.A.) AÑO: 1989
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: XIX Congreso Internazionale dei Chimici Teorici dei Paesi di Espressione Latina.  
LUGAR DE CELEBRACION: Roma (Italia) AÑO: 1990
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de la Sesión de Clausura.  
CONGRESO: I South European Conference of the Atomic and Molecular Physics.  
LUGAR DE CELEBRACION: Gandia (España) AÑO: 1992
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: XX Congreso de Químicos Teóricos de los Países de expresión Latina.  
LUGAR DE CELEBRACION: Mérida (Venezuela) AÑO: 1992
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: The Third World Congress of Theoretical Organic Chemists (WATOC'93)  
LUGAR DE CELEBRACION: Toyohashi (Japón) AÑO: 1993
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 8th International Congress of Quantum Chemistry  
LUGAR DE CELEBRACION: Praga (Republica Checa, junio de 1994) AÑO: 1994
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: The 5th European Symposium on Organic Reactivity. ESOR-V

LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Compostela (España)	AÑO: 1995
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: Recent Theoretical and Experimental Advances in Hydrogen-Bonded Clusters LUGAR DE CELEBRACION: Elounda Creta junio de 1994)	AÑO: 1997
TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada CONGRESO: Hydrogen Transfer: Experiment and Theory LUGAR DE CELEBRACION: Berlin (Alemania)	AÑO: 1997
TIPO DE PARTICIPACION: Secretary of the Organizing Committee CONGRESO: Workshop on Computational Chemistry LUGAR DE CELEBRACION: Miraflores de la Sierra, Madrid (España)	AÑO: 1998
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: XXIV QUITEL LUGAR DE CELEBRACION: Puebla de los Angeles (Mexico)	AÑO: 1998
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: International Symposium on Gas-Phase Ion Chemistry and Physics LUGAR DE CELEBRACION: Rome (Italy)	AÑO: 1998
TIPO DE PARTICIPACION: Profesora Invitada CONGRESO: International Conference in Honor John A. Pople. LUGAR DE CELEBRACION: Amelia Island Florida (USA)	AÑO: 1999
TIPO DE PARTICIPACION: Secretary of the Organizing Committee CONGRESO: International Symposium on Physical Organic Chemistry LUGAR DE CELEBRACION: Miraflores de la Sierra, Madrid (España)	AÑO: 1999
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: 5 <sup>th</sup> World Congress of Theoretically Oriented Chemists. LUGAR DE CELEBRACION: Londres (Reino Unido)	AÑO: 1999
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: X <sup>th</sup> International Congress of Quantum Chemistry. LUGAR DE CELEBRACION: Menton (Francia)	AÑO: 2000
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: 15 <sup>th</sup> International Mass Spectrometry Conference. LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (España)	AÑO: 2000
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: Third European Conference on Computational Chemistry EUCC-3. LUGAR DE CELEBRACION: Budapest (Hungría)	AÑO: 2000
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: International Conference on: Electronic Structure: Prediction and Applications. LUGAR DE CELEBRACION: San Sebastián (España)	AÑO: 2000
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: 8 <sup>th</sup> European Symposium on Organic Reactivity.	

LUGAR DE CELEBRACION: Cavtat (Dubrovnik) (Croatia)	AÑO: 2001
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada CONGRESO: Electronic Structure and Chemical Reactivity. LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (España)	AÑO: 2001
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: 4 <sup>th</sup> European Conference on Computational Chemistry. LUGAR DE CELEBRACION: Assisi (Italia)	AÑO: 2002
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: Electronic Structure Principles and Applications (ESPA2002). LUGAR DE CELEBRACION: Sevilla (España)	AÑO: 2002
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: HALCHEM Internacional Meeting LUGAR DE CELEBRACION: Cerdeña (Italia)	AÑO: 2002
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: Gordon Research Conference: Gaseous Ions: Structures, Energetics & Reactions LUGAR DE CELEBRACION: Ventura, California (USA)	AÑO: 2003
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitadas CONGRESO: Modelling Chemical Reactivity: from gas phase to solution and enzymes. LUGAR DE CELEBRACION: Nancy (Francia)	AÑO: 2003
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: XIth Internacional Congreso of Quantum Chemistry 2003 LUGAR DE CELEBRACION: Bonn (Alemania)	AÑO: 2003
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Miembro del Comité Científico CONGRESO: 29th Congres Internacional des Chimistes Theoriciens d'Expression Latine LUGAR DE CELEBRACION: Marrakech (Marruecos)	AÑO: 2003
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Chairperson de Sesión CONGRESO: 5th European Conference on Computacional Chemistry (EUOCC5) LUGAR DE CELEBRACION: La Londe les Maures (Francia)	AÑO: 2004
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: Molecular Quantum Mechanics: The No Nonsense Path to Progress LUGAR DE CELEBRACION: Cambridge (Inglaterra)	AÑO: 2004
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada CONGRESO: XXX Congreso Internacional de Quimicos Teóricos de Expresión Latina LUGAR DE CELEBRACION: Oporto (Portugal)	AÑO: 2004
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Plenary Lecture CONGRESO: Electronic Structure, Principles and Applications (ESPA2004) LUGAR DE CELEBRACION: Valladolid (España)	AÑO: 2004
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: 7th Congreso of the World Association of Theoretical Oriented Chemists (WATOC 2005)	

LUGAR DE CELEBRACION: Ciudad del Cabo (Sudáfrica) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Symposium in Honor of J.A. Pople. 229<sup>th</sup> ACS National Meeting  
LUGAR DE CELEBRACION: San Diego, CA (USA) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 10th European Symposium on Organic Reactivity  
LUGAR DE CELEBRACION: Roma (Italia) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: International Chemical Congress of Pacific basin Societies (Pacifichem2005)  
LUGAR DE CELEBRACION: Honolulu (USA) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 89th Canadian Chemistry Conference  
LUGAR DE CELEBRACION: Halifax (Canada) AÑO: 2006

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Electronic Structure, Principles and Applications (ESPA2006)  
LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Compostela (España) AÑO: 2006

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación invitada  
CONGRESO: 6th European Conference on Computacional Chemistry (EUCCOC6)  
LUGAR DE CELEBRACION: Tale (Eslovaquia) AÑO: 2006

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación invitada  
CONGRESO: 9th European Conference on Atoms Molecules & Photons (ECAMP IX)  
LUGAR DE CELEBRACION: Hersonissos, Creta (Grecia) AÑO: 2007

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación invitada  
CONGRESO: Molecular Quantum Mechanics: Analytic Gradients and Beyond  
LUGAR DE CELEBRACION: Budapest (Hungria) AÑO: 2007

---

TIPO DE PARTICIPACION: Presidenta de Sesión  
CONGRESO: 3rd Symposium on Theoretical Biophysics (TheoBio-07)  
LUGAR DE CELEBRACION: Cetraro, Calabria (Italia) AÑO: 2007

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia invitada  
CONGRESO: XXXI Reunión Bienal de la RSEQ  
LUGAR DE CELEBRACION: Toledo (España) AÑO: 2007

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación invitada  
CONGRESO: Isolated Biomolecules and Biomolecular Interactions (IBBI08)  
LUGAR DE CELEBRACION: Valladolid (España) AÑO: 2008

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación invitada  
CONGRESO: XXV QUITEL  
LUGAR DE CELEBRACION: S. Andrés (Colombia) AÑO: 2009

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Molecular Quantum Mechanics 2010. In honor of H.F. Schaefer

LUGAR DE CELEBRACION: Berkeley, California (EEUU)	AÑO: 2010
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesion CONGRESO: ESPA-2010. Electronic Structure Principles and Applications.	
LUGAR DE CELEBRACION: Oviedo (Spain)	AÑO: 2010
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesion CONGRESO: ECAMP 2010. European Conference in Atoms, Molecules and Photons.	
LUGAR DE CELEBRACION: Salamanca (Spain)	AÑO: 2010
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: Canadian Society of Chemistry (CSC 2011) Conference	
LUGAR DE CELEBRACION: Montreal (Canada)	AÑO: 2011
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Co-presidente del Comité Organizador CONGRESO: World Association of Theoretical and Computational Chemists. (WATOC-2011)	
LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Compostela (Spain)	AÑO: 2011
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada. CONGRESO: Modeling Interactions in Biomolecules V.	
LUGAR DE CELEBRACION: Kutná Hora (Republica Checa)	AÑO: 2011
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada. CONGRESO: 4th Annual Meeting of the COST action CUSPEL.	
LUGAR DE CELEBRACION: Cluj-Napoca (Rumania)	AÑO: 2012
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicacion Invitada CONGRESO: Canadian Society of Chemistry (CSC 2012) Conference	
LUGAR DE CELEBRACION: Calgary (Canada)	AÑO: 2012
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: ESPA-2012. Electronic Structure Principles and Applications.	
LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (Spain)	AÑO: 2012
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Chairperson of session CONGRESO: Quantum Chemistry in the Solid State: Magnetic Coupling and Excited States. Symposium in honor of Ria Broer.	
LUGAR DE CELEBRACION: Groningen (The Netherlands)	AÑO: 2012
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: Modeling and Design of Molecular Materials 2012.	
LUGAR DE CELEBRACION: Wroclaw (Poland)	AÑO: 2012
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada CONGRESO: Theoretical Chemistry in Spain told by women. .	
LUGAR DE CELEBRACION: Tarragona (Spain)	AÑO: 2013
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: 7th Molecular Quantum Mechanics.	
LUGAR DE CELEBRACION: Lugano (Suiza)	AÑO: 2013
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Chairperson of session CONGRESO: XXIX-QUITEL-2013.	
LUGAR DE CELEBRACION: Granada (España)	AÑO: 2013
-----	
TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada CONGRESO: XVIII Workshop in "Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology	
LUGAR DE CELEBRACION: Paraty, Rio de Janeiro (Brasil)	AÑO: 2013

TIPO DE PARTICIPACION: Chairperson of session CONGRESO: 9º ESPA- Electronic Structure Principles and Applications LUGAR DE CELEBRACION: Badajoz (Spain)	AÑO: 2014
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: 97th Canadian Chemistry Conference 2014 LUGAR DE CELEBRACION: Vancouver (Canada)	AÑO: 2014
TIPO DE PARTICIPACION: Chairwoman de Sesión CONGRESO: Xth WATOC LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Chile (Chile)	AÑO: 2014
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: 15 <sup>th</sup> Int. Congress of Quantum Chemistry (ICQC) LUGAR DE CELEBRACION: Pekin (China)	AÑO: 2015
TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada CONGRESO: The Chemical Bonds at the 21 <sup>th</sup> Century LUGAR DE CELEBRACION: Xiamen (China)	AÑO: 2015
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: ICPEAC 2015 LUGAR DE CELEBRACION: Toledo (Spain)	AÑO: 2015
TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada CONGRESO: PACIFICHEM 2015 (The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015) LUGAR DE CELEBRACION: Honolulu, Hawai (EEUU)	AÑO: 2015
TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada CONGRESO: 26th Austin Symposium on Molecular Structure and Dynamics LUGAR DE CELEBRACION: Dallas, Texas (EEUU)	AÑO: 2016
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada CONGRESO: ESPA 2016 LUGAR DE CELEBRACION: Castellón (Spain)	AÑO: 2016
TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Plenaria Invitada CONGRESO: European Symposium in Chemical Bond (ESCB1) LUGAR DE CELEBRACION: Rouen (Francia)	AÑO: 2016



## TESIS DOCTORALES DIRIGIDAS

---

TITULO: Caracterización de Enlaces de Hidrógeno Inter e Intramoleculares. Estudio Teórico de Casos Significativos  
DOCTORANDA: Leticia González Herrero  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
AÑO: 1998

FACULTAD: Ciencias  
CALIFICACION: Apto cum Laude por Unanimidad

---

TITULO: Química en Fase Gas de los Cationes Halógeno: Estudio Teórico de las Reacciones  $F^+(^3P, ^1D)$  y  $Cl^+(^3P, ^1D)$  con  $H_2O$  y con  $H_2S$ .  
DOCTORANDA: Mercedes Manuel García  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
AÑO: 1998

FACULTAD: Ciencias  
CALIFICACION: Apto cum Laude por Unanimidad

---

TITULO: Contribution a l'étude theorique par les méthodes ab initio des mecanismes reactionnels de processus interstellaires.  
DOCTORANDO: Fatima Ijjaali  
UNIVERSIDAD: Cadi Ayyad  
AÑO: 2002

FACULTAD: Sciences  
CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude por Unanimidad

---

TITULO: Una Aproximación Teórica a la Química de los Calcógenos  
DOCTORANDO: Pablo Sanz Mercado  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
AÑO: 2003

FACULTAD: Ciencias  
CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude por Unanimidad

---

## TESIS DOCTORALES DE LAS QUE HA SIDO TUTORA

---

TITULO: Estudio de reacciones de transferencia protonica por resonancia ciclotronica de iones con transformada de Fourier  
DOCTORANDA: Marta Herreros Portolés  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
AÑO: 1996

FACULTAD: Ciencias  
CALIFICACION: Apto cum Laude por Unanimidad

---

TITULO: Estructura Molecular de Pirazoles-NH monocíclicos: Métodos mecanocuánticos y cristalográficos. Modos de empaquetamiento cristalino.  
DOCTORANDA: Lourdes Infantes San Mateo  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
AÑO: 2000

FACULTAD: Ciencias  
CALIFICACION: Apto cum Laude por Unanimidad

---

TITULO: Espectroscopia Raman de Rotación-vibración de algunas moléculas de interés:  $H_2O$ ,  $D_2O$ ,  $HDO$ ,  $(CO_2)_2$  y  $(N_2)_2$ .  
DOCTORANDA: Gustavo Avila Blanco  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
AÑO: 2004

FACULTAD: Ciencias  
CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude

---

TITULO: Estudio por RCI con TF (FT-ICR) de relaciones entre la estructura, reactividad y estabilidad termodinámica de especies iónicas y neutras en fase gaseosa.

DOCTORANDA: Esther Quintanilla Luján  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
AÑO: 2005

FACULTAD: Ciencias  
CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude

---

TITULO: Estudio teórico de sistemas de relevancia atmosférica: espectroscopia IR de cristales de ácido nítrico y sus hidratos.

DOCTORANDA: Delia Fernandez Torre  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
AÑO: 2005

FACULTAD: Ciencias  
CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude y mencion europea

---

TITULO: Estudio teórico del Proceso de Protonación de la Piridina en Clusters de Moléculas de Agua.

DOCTORANDA: M<sup>a</sup> del Carmen Sicilia Aparicio  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
AÑO: 2005

FACULTAD: Ciencias  
CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude

---

TITULO: Modelización del proceso de interacción de los analgésicos nicotínicos frente al subtipo  $\alpha 4\beta 2$  del receptor nAChR.

DOCTORANDA: M<sup>a</sup> Magdalena Mora Salazar  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
AÑO: 2008

FACULTAD: Ciencias  
CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude

---

TITULO: Estudio ab initio espectroscópico de cadenas de Carbono: C4, C5 y C6.

DOCTORANDA: Helena Massó González  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
AÑO: 2008

FACULTAD: Ciencias  
CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude y mención europea

---

TITULO: Una Aproximación Metaheurística para la Construcción Óptima de Hamiltonianos Rovibracionales Anarmónicos.

DOCTORANDA: María Eugenia Castro Sánchez  
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid  
AÑO: 2010

FACULTAD: Ciencias  
CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude

---

## GRANDES EQUIPOS QUE UTILIZA O HA UTILIZADO

EQUIPO: Univac 1108

FECHA: 1971-76 CLAVE: UA

EQUIPO: IBM 4341, 4381, 3090 VM/CMS

FECHA: desde 1976 CLAVE: UA

EQUIPO: DEC VAX 11/750, 11/780 VMS

FECHA: desde 1982 CLAVE: UA

EQUIPO: IBM RISC 6000

FECHA: desde 1990 CLAVE: UA

---

## OTROS MERITOS O ACLARACIONES QUE DESEA HACER CONSTAR

---

1. Premio Extraordinario de Licenciatura en Ciencias Químicas.

Universidad de Santiago de Compostela.

Julio de 1970.

2. Premio Extraordinario de Doctorado.

Universidad Autónoma de Madrid.

Enero de 1975.

### 3) Asociaciones a las que pertenece:

- Miembro de la Sociedad Europea de Física desde Enero de 1987.
- Miembro de la Real Sociedad Española de Física desde Enero de 1988.
- Miembro del Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular desde su fundación.
- Miembro de la Real Sociedad Española de Química desde 2000

### 4) Revistas de las que es referee:

- Journal of Molecular Structure (THEOCHEM).
- Journal of the American Chemical Society.
- Journal of Physical Chemistry B
- Journal of Physical Chemistry A
- New J. of Chem
- Journal of Physics B.
- Chemical Physics Research.
- Chemical Physics Letters.
- ChemPhysChem
- European Journal of Organic Chemistry.
- Journal of Physical Organic Chemistry

### 5) Puestos Académicos Desempeñados:

- Secretaria del Instituto Universitario de Estudios de la Mujer de la Universidad Autónoma de Madrid (I.U.E.M.) desde Enero de 1990 a Mayo de 1991.
- Directora del Instituto Universitario de Estudios de la Mujer de la Universidad Autónoma de Madrid (I.U.E.M.) 1991-95
- Vicedecana de Estudiantes. Facultad de Ciencias UAM. desde 1996.
- Responsable del Programa de Doctorado “Química Teórica y Computacional” con mención de calidad MCD2003-00675. Cursos 2000 hasta 2006.
- Responsable del Master Europeo “European Master on Theoretical Chemistry and Computational Modelling” desde el curso 2006-2007. Con Eurolabel de la ECTNA (Certificate number :EM0701 de 14/10/2007). En estos momentos este es un master ERASMUS MUNDUS 2009-2013 coordinado por el Prof. Manuel Yáñez del Departamento de Química UAM.
- Presidenta de la Sección de Madrid de la Real Sociedad Española de Química desde mayo del 2002-2008
- Directora del Departamento de Química de la UAM desde abril de 2004 hasta abril de 2008.
- Directora General de Programas y Transferencia de Conocimiento de la Secretaría de Estado de Universidades del Ministerio de Ciencia e Innovación desde el 1 de mayo de 2008 al 25 de abril de 2009.
- Coordinadora Científica del Programa Consolider-Ingenio 2010.
- Directora del Departamento de Química de la UAM desde agosto de 2014-

### 6) Evaluaciones de Investigación y Docencia

- 7 tramos de Investigación evaluados positivamente (periodo 1970-2012)
- 8 tramos de Docencia evaluados positivamente (periodo 1970-2015)

-

#### **7) Comités Científicos de los que forma parte**

- Comisión de Evaluación de las Universidades Gallegas
- Comisión de Evaluación del Profesorado Universitario de la ANECA
- Miembro de la Comisión Técnica de Evaluación del Programa Campus de Excelencia Internacional, así como del programa Innocampus.
- Presidenta del Comité de evaluación del Programa Consolider.
- Miembro del Label Committee de la ECTNA (European Chemistry Thematic Network Association).
- Vicepresidenta de la Asociación ECTNA
- Comisión de Evaluación de la Academia Finlandesa en Ciencias.

# **CURRICULUM VITAE**

**Luis M. Sesé Sánchez**

**Catedrático de Química Física**

Departamento de Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas

Facultad de Ciencias

Universidad Nacional de Educación a Distancia

Madrid

Marzo, 2017

# 1. HISTORIAL

## 1.1 TITULOS ACADEMICOS

Clase	Universidad Y Centro	Organismo y fecha de expedición	Calificación
Licenciado	U. Complutense C.C. Químicas	30-03-1979	Sobresaliente
	Premio Extraordinario	16-03-1980	
Doctor	U. Complutense C.C. Químicas	17-10-1983	Sobresaliente "cum Laude"

## 1.2 PUESTO DOCENTE ACTUAL

Categoría	Universidad	Régimen de dedicación	Fecha de nombramiento	Fecha de terminación
Catedrático	Universidad UNED	Completa	5-01-2010	-----

## 1.3 TESINA DE LICENCIATURA Y TESIS DOCTORAL

### ***Tesina:***

*Estudio Teórico de la Banda de Tensión CO del Espectro Infrarrojo del Fluoroacetato de Etilo*; Director: Manuel Fernández Núñez; Fecha: 2 de Diciembre de 1978;  
Calificación: *Sobresaliente*. Facultad de CC Químicas, Universidad Complutense.

### ***Tesis Doctoral:***

*Teoría de la Influencia del Disolvente sobre los Espectros de Vibración Moleculares*;  
Director Manuel Fernández Núñez; Fecha: 17 de Junio de 1983; Calificación:  
*Sobresaliente Cum Laude*. Facultad de CC. Químicas, Universidad Complutense.

#### 1.4 ACTIVIDAD DOCENTE DESEMPEÑADA

-Prf. Asignatura **Métodos Teóricos de la Química Física –1ª parte-** (5 Curso

Licenciatura en Química, especialidad de Química Física):

UNED 1-10-90/-----

-Prf. Asignatura **Termodinámica Química Molecular** (5 Curso Licenciatura en

Química, especialidad de Química Física):

UNED 1-10-90/30-09-13

-Prf. Curso **Métodos Matemáticos en Química Teórica** (Tercer Ciclo CC. Químicas, especialidad de Química Física + continuación en el Máster de Ciencia y Tecnología

Química – Coordinador-):

UNED 1-10-92/-----

-Prf. Curso **Termodinámica Estadística y de No Equilibrio** (Máster de Ciencia y

Tecnología Química – Coordinador-):

UNED 1-10-08/-----

-Prf. **Cálculo Numérico y Estadística Aplicada** (2º Grado en Química, -Coordinador-):

UNED 1-10-11/ ----

-Prf. **Termodinámica Química** (2º Grado en Química):

UNED 1-10-11/ ----

#### 1.5 TRAMOS DOCENTES Y DE INVESTIGACIÓN CONCEDIDOS

DOCENCIA: **6 tramos** (01.10.78 – 15.11.84 / 16.11.84 – 15.11.89 / 16.11.89 –

15.11.94 / 16.11.94 – 15.11.99 / 16.11.99 – 15.11.04 / 16.11.04 – 15.11.09)

INVESTIGACIÓN: **5 tramos** (1983 – 1988 / 1989 – 1994 / 1995 – 2000 / 2001 – 2006 / 2007 - 2012).



## 1.6 COMUNICACIONES EN CONGRESOS

1. E.Gálvez, M.Fernández, F.Sueiro y L.M.Sesé (1982)  
Mapas moleculares de compuestos de acción farmacológica, II Congreso Nacional de Química Terapéutica, Madrid 24-27 de Mayo de 1982.
2. L.Sesé y M.Fernández (1983)  
Estudio teórico a partir de métodos de simulación de la banda de tensión CO de la acetona en CS<sub>2</sub>, IX Reunión Nacional de Espectroscopía, Coimbra-Salamanca 3-7 de Octubre de 1983.
3. L.Sesé y M.Fernández (1984)  
Molecular properties of CS pure liquid through a FOPIM-like iterative procedure  
XV Congreso Internacional de Químicos teóricos de expresión Latina, Viana do Castelo, 3-6 de Septiembre de 1984.
4. P.Gómez y L.M.Sesé (1986)  
Calculation and analysis of solvent effects on the internal rotation potential of CH<sub>3</sub>-CO-CH<sub>3</sub>, Congreso Internacional: Molecules en Physique, Chemie et Biologie, París 15-21 de Junio de 1986.
5. J.Tortajada, M.Fernández y L.M.Sesé (1986)  
Effects of the environment on the UV spectrum of benzene molecule, Congreso Internacional: Molecules en Physique, Chemie et Biologie, París 15-21, de Junio de 1986.
6. L.M.Sesé y M.Fernández (1987)  
Integrales de solapamiento y memoria en procesos iterativos de perturbaciones estacionarias para estudiar líquidos puros, XVII Congreso internacional de Químicos teóricos de expresión latina. Peñíscola, España, 20-25 de Septiembre de 1987.
7. L. E. Bailey y L. M. Sesé (2006)

Some structural features in the fluid-solid transition of quantum hard-spheres.

2 Septiembre 2006, 8th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics

(IBER-2006), Aranjuez, España (29 Agosto – 4 Septiembre 2006).

### 1.7 DIRECCION DE TESIS DOCTORALES

- Ricardo Ledesma Rubio

"Estudio del sistema cuántico de esferas rígidas por simulación Monte Carlo con integración de caminos"

Fecha de lectura: 16 de Septiembre de 1997

Calificación: APTO CUM LAUDE (por unanimidad)

## **2. PROYECTOS DE INVESTIGACION FINANCIADOS**

-Colaborador de Investigación

"Aplicación de la metodología químico cuántica en espectroscopía infrarroja"

CAICYT n 4241/79.

Director: Jesús Morcillo Rubio (UCM).

-Colaborador de Investigación (32 horas)

"Dinámica de sistemas moleculares no rígidos. Aplicaciones a la Espectroscopía,

Biología y Farmacología Molecular, CAYCIT PB 87-0259; 1988/1990.

Director: Y.G.Smeyers (CSIC).

-Colaborador de Investigación (16 horas)

"Simetría y propiedades dinámicas de moléculas no rígidas. Aplicaciones a la

Espectroscopía de sistemas moleculares con dos y tres grados de libertad; CAYCIT.

PB 90-0167; 1991/1993.

Director: Y.G.Smeyers (CSIC).

-Colaborador de Investigación (16 horas)

"Hipersuperficies de energía potencial. Aplicación a sistemas moleculares de interés espectroscópico, químico-físico y biológico"; CAYCIT PB 90-0279; 1991 / 1993.

Director: A.Hernández-Laguna (CSIC).

- Ayudas a la Investigación del Vicerrectorado de Investigación de la UNED para la línea "Efectos cuánticos en sistemas de muchos cuerpos"

Convocatorias de Infraestructura de Investigación 1996 y 1997

Importe total concedido: 1.774.208 ptas.

Convocatoria de Infraestructura de Investigación 2000.

Importe concedido: 716.450 ptas.

- Investigador

“Efectos anarmónicos en las propiedades estructurales y dinámicas de sistemas cuánticos ”; CICYT / BFM2000-1318; Programa General de Promoción del Conocimiento (Física y Matemáticas); 2001 / 2003.

Investigador Responsable: Carlos Herrero Aisa (CSIC).

Importe Concedido: 4.547.200 Ptas.

- Investigador Responsable Grupo UNED.

“Modelización y Simulación de Sistemas no Homogéneos” (MOSSNOHO)

CAM – 2005 / S-0505/ESP/0299; 2006/2009 (Coordinador General: Guillermo Navascués, UAM).

Importes concedidos: Grupo UNED ..... 6.000 Euros (año 2006); 2.000 Euros (año 2007); 6.000 Euros (año 2008); 5.000 Euros (año 2009).

- Investigador Responsable Grupo UNED

“Modelización y Simulación de Sistemas Complejos” (MODELICO-P2009/ESP1691)

Coordinador General: Enrique Lomba García (CSIC, Instituto de Química Física Rocasolano).

Importe Total: 816.500 Euros.

### **3. PUBLICACIONES**

#### 3.1 ARTICULOS DE INVESTIGACION / REVISIONES (CAPITULOS) EN SERIES

1. L.M.Sesé, A.Bañón y M.Fernández (1983)  
Liquid phase effects on molecular properties, *J.Mol.Struct. (Theochem)*, **92**: 231-238
2. L.M.Sesé y M.Fernández (1983)  
Molecular Properties in liquid phase, *J.Mol.Struct. (Theochem)*, **93**: 261-264.
3. M.Fernández, L.Sesé y V.Botella (1983)  
Un nuevo potencial intermolecular para el estudio de líquidos puros y disoluciones, *Revista de la R.A.C.C. Ex.Fis.Nat. Madrid*, **57**: 643-646.
4. L.M.Sesé y M.Fernández (1984)  
Molecular properties of acetone in carbon disulphide solution (1:124), *J.Mol.Struct. (Theochem)* , **107**: 101-104.
5. L.M.Sesé y M.Fernández (1984)  
MC simulation on acetone-carbon disulphide (1:124) with a quantum mechanical intermolecular potential, *J.Mol.Liquids*, **28**: 73-85.
6. L.M.Sesé (1985)  
A molecular quantum mechanics approach to evaluate molecular properties in liquid phase using statistical mechanics, *J.Mol.Liquids*, **30**: 185-208.
7. L.M.Sesé (1985)  
Some remarks on symmetry in molecular liquids, *J.Mol.Liquids*, **30**: 209-214.

8. M.Fernández y L.Sesé (1986)  
Potencial intermolecular en estado líquido, Cuadernos de posgrado Química Teórica II, UNAM (México), **23**: 155-163.
9. P.Gómez, M.Fernández, L.Sesé y V.Botella (1986)  
Topological and symmetry features of internal rotation potential in molecules with two rotors, J.Mol.Struct, **142**: 315-318.
10. L.M.Sesé, V.Botella, P.C.Gómez y M.Fernández (1986)  
Liquid phase effects on benzene UV spectra, J.Mol.Struct, **142**: 327-330.
11. L.M.Sesé, P.C.Gómez y F.Sueiro (1986)  
An application of quantum chemical methodology to liquid phase studies: Monte Carlo simulation of nonrigid acetone dissolved in carbon disulphide, J.Mol.Liquids, **32**: 235-258.
12. L.M.Sesé, P.C.Gómez y V.Botella (1986)  
Nonrigid molecules in solution: Internal potential energy surface for acetone dissolved in carbon disulphide, J.Mol.Liquids, **32**: 259-278.
13. L.M.Sesé (1988)  
Molecular electronic states in liquid phase: Configuration Interaction states, J.Mol.Liquids, **37**: 45-57.
14. L.M.Sesé, M.Fernández y J.Morcillo (1988)  
Estudio químico cuántico del efecto del disolvente sobre las frecuencias fundamentales de vibración, An.Quím., **84**: 137-140.
15. L.M.Sesé y M.Fernández (1988)  
Overlap integrals and memory in stationary perturbation iterative processes for the study of pure liquids, J.Mol.Struct. (Theochem), **166**: 397-402.

- 16.** M.C.Duro, J.A. Martín-Pereda y L.M.Sesé (1988)  
Monte Carlo simulation on a system of hard cylinders at a very high packing fraction  
Phys. Rev. A, **37**: 284-286.
- 17.** L.M.Sesé (1988)  
Theoretical studies on liquid phase: molecular properties of pure liquids.  
Application to carbon tetrachloride; J.Mol.Liquids, **39**: 69-91.
- 18.** M.Fernández, J.Tortajada y L.M.Sesé (1988)  
A theoretical analysis of the ultraviolet spectrum (180-260 nm) of pure liquid  
benzene: Gas-liquid spectral shifts explained through a statistically perturbed  
CNDO/S framework, Z.Phys.D (Atoms, molecules and clusters), **9**: 243-251.
- 19.** L.M.Sesé (1990)  
Environmental effects on molecules immersed in liquids. Z.Phys.D (Atoms,  
molecules and clusters), **17**: 195-202.
- 20.** M.Fernández y L.M.Sesé (1991)  
Líquidos moleculares y simulación Monte Carlo, en Nuevas Tendencias en Química  
Teórica (CSIC, Madrid, Editor S.Fraga), Vol.3: pp.203-222; ISBN 84-00-07131-X
- 21.** L.M.Sesé (1991)  
Path-integral and effective potential Monte Carlo simulations of liquid nitrogen.  
Hard-sphere and Lennard-Jones potentials, Molec.Phys., **74**: 177-189.
- 22.** L.M.Sesé (1992)  
A quantum Monte Carlo study of liquid Lennard-Jones methane, path-integral  
and effective potentials, Molec.Phys., **76**: 1335-1346.
- 23.** L.M.Sesé (1992)  
Quantum topics in pure liquids at equilibrium, en Computational Chemistry:  
Structure, interactions and reactivity (Editor S.Fraga); Studies in physical and

theoretical chemistry, Vol. 77(B), Elsevier, pp.283-310; ISBN 0-444-88512-9.

**24.** L.M.Sesé (1993)

Feynman-Hibbs quantum effective potentials for Monte Carlo simulations of liquid neon. *Molec.Phys.*, **78**: 1167-1177.

**25.** L.M.Sesé (1994)

Study of the Feynman-Hibbs effective potential against the path-integral formalism for Monte Carlo simulations of quantum many-body Lennard-Jones systems, *Molec.Phys.*, **81**: 1297-1312.

**26.** L.M.Sesé and R.Ledesma (1995)

Path-integral Monte Carlo energy and structure of the hard-sphere system using efficient propagators, *J.Chem.Phys.*, **102**: 3776-3786.

**27.** L.M.Sesé (1995)

Feynman-Hibbs potentials and path-integrals for quantum Lennard-Jones systems: theory and Monte Carlo simulations, *Molec. Phys.*, **85**: 931-947.

**28.** L.M.Sesé (1996)

Determination of the quantum static structure factor of liquid neon within the Feynman-Hibbs picture, *Molec. Phys.* **89**: 1783-1802.

**29.** L.M.Sesé and R.Ledesma (1997)

Computation of the static structure factor of the path-integral quantum hard-sphere fluid, *J. Chem. Phys.*, **106**: 1134-1147.

**30.** L.M.Sesé (1997)

Quantum computation of the static structure factor of deuterium gas, *Chem.Phys.Letters*, **266**: 130-134.

**31.** L.M.Sesé (1997)

Quantum effects on the static structure factor of Lennard-Jones fluids,

- Molec.Phys. **92**: 693-703.
- 32.** L.M.Sesé (1998)  
Thermodynamic and structural properties of the path-integral quantum hard sphere fluid. J.Chem.Phys. **108**: 9086-9097.
- 33.** L.M.Sesé (1999)  
An application of the self-consistent variational effective potential against the path-integral to compute equilibrium properties of quantum simple fluids, Mol.Phys. **97**: 881-896.
- 34.** B.Serrano, J. Baselga, J.Bravo, F. Mikes, L. Sesé, I. Esteban and I.F. Piérola (2000)  
Chemical imaging of phase separated polymer blends by fluorescence microscopy, J. Fluorescence **10**: 135-139.
- 35.** L. M. Sesé (2001)  
Path-integral Monte Carlo study of the structural and mechanical properties of quantum fcc and bcc hard-sphere solids, J. Chem. Phys. **114**: 1732-1744
- 36.** L.M. Sesé (2001)  
On the calculation of the static structure factor of path-integral quantum simple fluids far from exchange, Mol. Phys. **99**: 585-606.
- 37.** L. E. Bailey y L. M. Sesé (2001)  
The asymptotic decay of pair correlations in the path-integral quantum hard-sphere fluid, J. Chem. Phys. **115**: 6557-6568.
- 38.** L. M. Sesé (2002)  
Structural and response functions at equilibrium in path-integral quantum simple fluids, Mol. Phys. **100**: 927-940.



- 39.** L. M. Sesé (2002)  
Properties of the path-integral quantum hard-sphere fluid in **k**-space.  
J. Chem. Phys. **116**: 8492-8503.
- 40.** L. M. Sesé (2003)  
The compressibility theorem for quantum simple fluids at equilibrium.  
Molec. Phys. **101**: 1455-1468.
- 41.** B. Serrano, J. Baselga, I. Esteban, L. Sesé e I. F. Piérola (2003)  
Morphology of phase separated blends of poly-(cyclohexylmethacrylate) with poly-(vinylacetate).  
J. Appl. Polymer Sci. **89**: 1284-1290.
- 42.** L. M. Sesé y L. E. Bailey (2003)  
A simulation study of the quantum hard-sphere Yukawa fluid.  
J. Chem. Phys. **119**, 10256-10267.
- 43.** L. M. Sesé (2004)  
Computation of the equation of state of the quantum hard-sphere fluid utilizing several path-integral strategies.  
J. Chem. Phys. **121**, 3702-3709.
- 44.** L. E. Bailey y L. M. Sesé (2004)  
The decay of pair correlations in quantum hard-sphere fluids  
J. Chem. Phys. **121**, 10076-10087.
- 45.** L. M. Sesé (2005)  
Triplet correlations in the quantum hard-sphere fluid  
J. Chem. Phys. **123**, 104507 – 1 / 12.
- 46.** L. M. Sesé (2007)  
Computational study of the melting-freezing transition in the quantum hard-sphere

- system for intermediate densities (I): Thermodynamic results  
J. Chem. Phys. **126**, 164508 – 1 / 13.
- 47.** L. M. Sesé y L. E . Bailey (2007)  
Computational study of the melting-freezing transition in the quantum hard-sphere system for intermediate densities (II): Structural features  
J. Chem. Phys. **126**, 164509 – 1 /11; Erratum **127**, 049901.
- 48.** L. M. Sesé (2008)  
Computational study of the structures of gaseous helium-3 at low temperature.  
J. Phys. Chem. B, **112**, 10241-10254.
- 49.** L. M. Sesé (2009)  
A study of the pair and triplet structures of the quantum hard-sphere Yukawa fluid  
J. Chem. Phys. **130**, 074504 - 1/13.
- 50.** C. McBride, C. Vega, E. G. Noya, R. Ramírez y L. M. Sesé (2009)  
Quantum contributions in the ice phases: the path to a new empirical model for water – TIP4PQ/2005  
J. Chem. Phys. **131**, 024506 - 1/13.
- 51.** E. G. Noya, C. Vega, L. M. Sesé y R. Ramírez (2009)  
Quantum effects on the maximum in density of water as described by the TIP4PQ/2005 model.  
J. Chem. Phys. **131**, 124518 – 1/5.
- 52.** C. Vega, M. M. Conde, C. McBride, J. L. F. Abascal, E. G. Noya, R. Ramírez y L. M. Sesé (2010)  
Heat capacity of water: A signature of nuclear quantum effects  
J. Chem. Phys. **132**, 046101 – 1/2
- 53.** M. M. Conde, C. Vega, C. McBride, E. G. Noya, R. Ramírez y L. M. Sesé (2010)

Can gas hydrate structures be described using classical simulations?

J. Chem. Phys. **132**, 114503 – 1/11

**54.** B. S. González, E. G. Noya, C. Vega y L. M. Sesé (2010)

Nuclear quantum effects in water clusters: The role of the molecular flexibility

J. Phys. Chem. B. **114**, 2484 – 2492

**55.** E. G. Noya, L. M. Sesé, R. Ramírez, M. M. Conde, C. Vega, C. McBride (2011)

Path-integral Monte Carlo simulations of rigid rotors and their application to water

Mol. Phys. **109**, 149-168, first Published on: 18. Nov. 2010

**56.** L. M. Sesé (2012)

On the accurate direct computation of isothermal compressibilities for normal

quantum simple fluids: Application to quantum hard spheres, J. Chem. Phys. **136**,

244504-1/15.

**57.** L. M. Sesé (2013)

Path integral Monte Carlo study of quantum hard-sphere solids, J. Chem. Phys.

**139**, 044502-1/13.

**58.** L. M. Sesé (2013)

Erratum: “Path integral Monte Carlo study of quantum hard-sphere solids, J. Chem.

Phys. **139**, 044502 (2013)”, **139**, 189901 (2013).

**59.** L. M. Sesé (2016)

Path-integral and Ornstein-Zernike study of quantum fluid structures on the crystallization line, J. Chem. Phys. **144**, 094505-1/16

**60.** L. M. Sesé (2016)

Path integrals and effective potentials in the study of quantum monatomic fluids at equilibrium. Adv. Chem. Phys. **160**, 49 – 158.

**61.** L. M. Sesé (2017)

Path-integral and Ornstein-Zernike computations of quantum fluid structures under strong fluctuations, *AIP Advances*, **7**, 025204-1/19.

### 3.2 LIBROS / MATERIAL PARA CURSOS VIRTUALES

1. L.M.Sesé (1990, 1994)

*Métodos Teóricos de la Química Física (Vol.1)*; Universidad Nacional de Educación a Distancia, Madrid; 1ª Edición, Septiembre 1990; 1 Reimpresión (revisada), Julio 1994.

ISBN: 978 – 84 – 362 – 2544 – 0.

2. L.M.Sesé y M.Criado (1990)

*Termodinámica Química Molecular*, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Madrid, 1 Edición, Diciembre 1990.

ISBN: 978 – 84 – 362 – 2577 – 8 (Obra completa, 2 Vols.).

3. A.Hernanz y L.M.Sesé (1990)

*Relaciones y Tablas Matemáticas*, Métodos Teóricos de la Química Física, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Madrid, 1 Edición, Septiembre 1990. Depósito legal: M-36682-1990.

4. L. M. Sesé, L. E. Bailey y M. Criado-Sancho (2008)

Material para el curso virtual del Postgrado Ciencia y Tecnología Química (UNED)

*Métodos de Cálculo en Química Teórica.*

5. L. M. Sesé, M. Criado-Sancho y L. E. Bailey (2008)

Material para el curso virtual del Postgrado Ciencia y Tecnología Química (UNED)

*Termodinámica Estadística y de No Equilibrio.*

6. L. M. Sesé (2011)

*Cálculo Numérico y Estadística Aplicada*, Universidad Nacional de Educación a Distancia (colección Grado), Madrid, 1ª Edición, Agosto 2011.

ISBN: 978 – 84 – 362 – 6168 – 4

7. L. M. Sesé (2013)

*Cálculo Numérico y Estadística Aplicada*, Universidad Nacional de Educación a Distancia (colección Grado), Madrid, Edición Digital, Mayo 2013.

ISBN electrónico: 978 – 84 – 362 – 6654-2

3.3 OTRAS PUBLICACIONES (colaboraciones en textos, tesis, revistas de divulgación, guías didácticas, etc.)

1. L.M.Sesé (1983)

Fuerzas intermoleculares

En Addenda de Química Física, UNED, Madrid, 1985, 1988; pp.159-191.

2. L.M.Sesé (1985)

Teoría de la influencia del disolvente sobre los espectros de vibración moleculares

Tesis Doctoral, presentada el 17-6-83 y editada por la Universidad Complutense de Madrid.

3.L.M. Sesé (1999)

Efemérides 99: El descubrimiento del actinio y su particular prueba del (noventa y nueve, 100cias@uned, **2**, 78-80.

4. J.E. Alvarellos y L.M. Sesé (1999)

Los Premios Nobel de Química 1998; 100cias@uned, **2**, 69-73.

5. L.M. Sesé (2000)

La ley de las proporciones definidas de Proust, 100cias@uned, **3**, 108-114.

6. L. M. Sesé and L. E. Bailey (2001)

Fases de la materia, átomos y deslocalización cuántica, A Distancia (UNED), **19** (1), 41-50.

7. L. M. Sesé (2002, 2003)

Guía Didáctica para el video “*Quince minutos en la vida del electrón*”, UNED, Madrid, 1ª Edición 2002, 1ª Reimpresión (revisada) 2003.

8. L.M. Sesé (2002)

Noticias de Química 2002: Química y Computación, 100cias@uned, **5**, 101-102.

9. L. M. Sesé (2002)

Recensión del Texto “Curso Práctico de Termodinámica”, por M. Criado-Sancho, Colección Varia, UNED, Madrid, 100cias@uned, **5**, 171-172.

10. L. M. Sesé (2003)

Novedades científicas en Química en el año 2003, 100cias@uned, **6**, 70 –71.

11. L. M. Sesé (2003)

Efemérides en Química, partes 1ª y 2ª: “Elementos químicos” y “Algunos hechos científicos destacables sucedidos en ‘años 3’ desde el siglo XVII”, 100cias@uned, **6**, 81 –84.

12. L. M. Sesé (2003)

Recensión del libro “Evolución histórica de los principios de la Química”, por M.C. Izquierdo, F. Peral, M. A. de la Plaza y D. Troitiño. Colección Aula Abierta, UNED, Madrid (2003), 100cias@uned, **6**, 130-131

13. A. Williard y L. M. Sesé (2011)

Efemérides: Bicentenario del Yodo (1811-2011), 100cias@uned **4** (Nueva época), pp. 104-108.

#### 3.4 EMISIONES RADIOFÓNICAS (UNED)

- RNE, Radio 3 FM

Espacios de 30 mtos. de duración, Disponibles en la web <http://www.canal.uned.es>

- 1) “Espacio de la Facultad de Ciencias“ (I. Fernández y L.M. Sesé), 12 Enero 1998.
- 2) “El agua desde una perspectiva químico-física” (C. Sánchez, F. Peral y L.M. Sesé), 4 Mayo 2002.
- 3) “El agua desde una perspectiva químico-física (II)” (L. M. Sesé), 22 Febrero 2003.
- 4) “El agua desde una perspectiva químico-física (III)” (L. M. Sesé), 3 Abril 2004.
- 5) “Fenómenos extraños, la Mecánica Cuántica” (L. M. Sesé), 3 Mayo 2005.
- 6) “Parque Cuántico IP” (L. M. Sesé), 22 Noviembre 2005.
- 7) “Parque Cuántico IIP” (L. M. Sesé), 9 Mayo 2006.
- 8) “Parque Cuántico IV”,(L. M. Sesé), 9 Enero 2007.
- 9) “Parque Cuántico V: ¿muchos parques cuánticos?” (L. M. Sesé),1 Mayo 2007.
- 10) “Parque Cuántico VI: El montaje de los actores” (L. M. Sesé), 6 Mayo 2008.
- 11) “Moléculas en el Espacio Exterior I” (L. M. Sesé), 14 Abril 2009.
- 12) ”Moléculas en el Espacio Exterior II” (L. M. Sesé),
- 13 ) ”Moléculas en el Espacio Exterior IIP” (L. M. Sesé), 12 Abril 2011
- 14) “Moléculas en el Espacio Exterior IV” (L. M. Sesé), 14 Abril 2012.
- 15) ” Niels Bohr y el centenario (1913 -2013) del primer modelo modelo cuántico de la estructura de los átomos”, 17 Diciembre 2013.
- 16) “Max Born (1882-1970) o el valor del estudio” (L. M. Sesé). 21 Abril 2015.
- 17) “Alphas, Rutherford, Gamow” (L. M. Sesé), 19 Abril 2016.

### 3.5 VIDEOS EDUCATIVOS Y PROYECTOS MULTIMEDIA

#### **A) *Quince minutos en la vida del electrón***

(Acompaña al video la correspondiente guía didáctica mencionada en 3.3)

Guión: Luis M. Sesé

Realización: José A. Tarazaga



Producción: Vicerrectorado de Medios y Tecnología, UNED, Madrid, 1ª Edición 2002, 1ª Reimpresión (revisada) 2003.

Depósito Legal: M – 20997 – 2002; ISBN: 978 – 84 – 362 – 4706 – 0.

**B) *Quince minutos en la vida del electrón: Una mirada en detalle (2009)***

*Proyecto multimedia* consistente de: el video A), una nueva Guía Didáctica más extensa, la serie de cinco entrevistas (formato TV) con científicos “*A Hombros de Hombres*” en la que se comentan las vidas y hechos de científicos relevantes en la historia del descubrimiento del electrón y de sus propiedades, y el serial radiofónico “*Parque Cuántico*” (los 6 episodios mencionados en 1.9.6).

Puede encontrarse en las direcciones URL:

<http://www.canal.uned.es/> e introduciendo en el buscador el término: electron

Depósito Legal: M – 26352 – 2009; ISBN: 978 – 84 – 362 – 5635 – 2.

#### **4. CONFERENCIAS INVITADAS**

1- L.M.Sesé (1983)

Un nuevo potencial intermolecular para el estudio de líquidos puros y disoluciones.

Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales de Madrid, 9 de Febrero de 1983

2- L.M. Sesé (1991)

Simulaciones cuánticas por el método de Monte Carlo del nitrógeno líquido.

Departamento de Física Fundamental, UNED, 22 Mayo 1991

3- L.M. Sesé (1999)

Separación de fases de mezclas de polímeros en dominios ordenados en 2D.

Caracterización del orden.

Departamento de Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas, UNED, 11 Mayo 1999

4- L.M. Sesé (2002)

Presentación por invitación de la Real Sociedad Española de Física del Proyecto de

Divulgación Científica “*Quince minutos en la vida del electrón*”, Física en Acción

2002, La Coruña, España, 28 Septiembre 2002

#### CONGRESOS INTERNACIONALES:

5- L. M. Sesé (1987)

Conferencia Plenaria: 45 m.

Estudios en fase líquida: el problema de los efectos del medio sobre las propiedades

Moleculares, XVII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión

Latina, Peñíscola, España. Fecha: 25 de Septiembre de 1987.

6- L. M. Sesé (2006)

Comunicación Oral: 25 m.

Quantum static structural functions in condensed matter, a fortunate complexity.

8th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER-2006).

Aranjuez, España (29 Agosto – 4 Septiembre 2006). Fecha: 3 Septiembre 2006.

7- L. M. Sesé (2012)

Lección: 1h. 30 m.

Path-integral Monte Carlo and static structures in condensed matter, PIMD Spring

School (CECAM), Toulouse, Francia (4 – 8 Junio 2012). Fecha: 8 de Junio de

2012.

Publicación: <http://congres.insa-toulouse.fr/PIMD/lectures.htm>, Julio 2012.

## Curriculum Vitae of Ignacio Sola

Name / Date of birth: Prof. Dr. Ignacio Sola /  
Position: Professor of Chemistry  
Address: Departamento de Química Física  
Facultad de Ciencias Químicas  
Universidad Complutense de Madrid  
Ciudad Universitaria s/n  
28040 Madrid (Spain)  
Tel. / Fax: +34-91 3944714 / +34-91 3944135  
Email: [isola@quim.ucm.es](mailto:isola@quim.ucm.es)



### Awards

- Valetudinarian student (award for the best academic curriculum, Universidad Complutense de Madrid, 1994)
- FPU Fellowship (Ministry of Education in Spain), 1995-1999
- Award for the best PhD in Chemistry (UCM, 2000)
- Ministry of Science Post-doctoral Fellowship, 2001-2003

### Scientific contributions

- 90 publications in international journals and book chapters
- H-index: 23
- Number of citations: 1420 (Google scholar October 2016)

### Education

BS in Chemistry and MS in Physical Chemistry, Universidad Complutense de Madrid, Spain, Dec. 1994  
Ph. D. in Chemistry, Universidad Complutense de Madrid, Spain, Jan. 2000  
Habilitation in Chemical Physics, Spain, Feb. 2007 (highest mark)

### Academic history

1999-01	Universidad Complutense de Madrid, Assistant Professor
2001-03	Princeton University, Visiting research fellow
2003-07	Universidad Complutense de Madrid, Associate Professor without tenure
2007-present	Universidad Complutense de Madrid, Associate Professor with tenure

## Visiting researcher (longer than 1 month)

University of Toulouse, France, 09-12/1995  
Weizmann Institute of Science, Israel, 09-12/1996; 10-12/1997; 02-03/98  
University of Kaiserslautern, Germany, 07/1998  
QTP-University of Florida in Gainesville, US, 08/1999  
Princeton University, US, 10/2001-10/2003; 07-08/2004; 07-08/2005; 08/2007  
Korean Institute of Advanced Studies (KAIST), Daejeon, South Korea, 08/2002  
University of Ann-Arbor, US, 04/2003  
Harvard University, US, 09/2003  
Kyunghee University, Suwon, South Korea, 07/2007  
Seoul National University, Seoul, South Korea 07-08/2008; 05-06/2010; 08-09/2010;  
03-05/2011; 03-04/2012; 07-09/2012; 03-04/2013; 09-10/2013; 05-08/2014; 03-09/2015

## Other merits

Organizing Committee of the Summer course in Femtochemistry and Femtobiology (El Escorial, Madrid 2000), under the ESF (European Science Foundation).

Organizing Committee of the Femto10 international conference (Madrid, 2011).

Around 25 invited talks or oral contributions at international conferences, workshops or university seminars. More than 50 participations at international conferences or workshops.

Adjoint professor of Chemistry at Seoul National University and Brain Pool Scholar (2015)

Participated in 11 national (Spanish) or American (2) Research Projects, 2 as Principal Researcher, and in 5 European Networks.

Advisor of 3 Ph.D and presently advising 2 Ph.D students

## Research interests

Quantum Dynamics, Interaction of molecules with laser pulses, Theoretical Femtochemistry, Attophysics, Theories of Chemical Reactivity, Quantum Chemistry, Quantum Information Science, Foundations of Quantum Mechanics

## Present and past collaborators

Jesús Santamaría (UCM), Alberto Beswick (Toulouse), David Tannor (Weizmann), Klaas Bergmann (Kaiserslautern), Vladimir Malinovsky (Stevens Institute of Technology), Boyoung Chang (SNU), Leticia González (Vienna), Herschel Rabitz (Princeton University), Volker Engel (Würzburg), Manfred Lein (Hannover), Fernando Martín (UAM).

## Highlights of Research

- **Quantum control methodologies:** Studies of the effect of functionals and noise in the controllers (J. Phys. Chem. A 102, 4301; Phys. Rev. A 60, 3081; J. Chem. Phys. 120, 9009); development of Connectivity Theory (Phys. Rev. A 70, 052507) and Hamiltonian Encoding (Phys. Rev. A 67, 043409); Study of optimal representations (Phys. Rev. A 77, 043415); Original proposal of the geometrical optimization scheme (J. Phys. Chem. Lett 6, 1724; J. Chem. Theory Comput. 11, 4005; J. Phys. Chem. A 119, 9091).
- **Selective state preparation by coherent light-interaction:** Development of hyper-Raman extensions of STIRAP (Phys. Rev. A 59, 4494; Phys. Rev. A 64, 033420; Phys. Rev. A 68, 013412); purification of racemates (J. Chem. Phys. 115, 2519).

- **Strong field control:** Generalization of APLIP (Phys. Rev. Lett. 85, 4241; J. Chem. Phys. 113, 4901; J. Chem. Phys. 114, 8820); ladder climbing (Chem. Phys. Lett. 341, 373); adiabatic manipulation of the bond (Phys. Rev. A 68, 031402; J. Chem. Phys. 119, 10653; Phys. Rev. A 82, 063414; J. Chem. Phys. 134, 104301); vibrational squeezing (J. Chem. Phys. 122, 204316; J. Chem. Phys. 123, 244101); control of spin coupling (J. Chem. Phys. 125, 124315; Phys Rev A 74, 043418); Stark shift control of photodissociation (J. Chem. Phys. 130, 124320; J. Chem. Phys. 131, 204314, Nature Chem. 6, 785); control of conical intersections (J. Chem. Phys. 131, 104302). Our work was presented as a perspective with cover page in Phys. Chem. Chem. Phys. 17, 13183.
- **Quantum information:** phase-control of entanglement in ion traps (Phys. Rev. Lett. 93, 190502; Phys. Rev. Lett. 96, 050502) and optical isomers (J. Chem. Phys. 120, 10955). Geometrical phase effects on quantum gates (Phys. Rev. A 89, 023301).
- **Semi-classical methods:** development of the SHARC method (J. Chem. Theory Comput. 7, 1253; Faraday Discuss. 153, 261; J. Phys. Chem. Letters 3, 3090).
- **Attophysics:** Control of vibronic wave packets in ions strings (J. Phys. Chem. A 116, 11427); preparation and control of large dipoles in molecular cations (ChemPhysChem 14, 1405, J. Chem. Phys. 139, 084306).

## Recent selected publications

1. P. Sampedro, B. Y. Chang, I. R. Solá, 2016, Nonresonant electronic transitions induced by vibrational motion in light-induced potentials, **Phys. Chem. Chem. Phys.** 18, 25265.  
We propose a novel scheme for population transfer by adiabatic passage involving a single pulse (or odd number of pulses).
2. B. Y. Chang, S. Shin, I. R. Solá, 2015, *State selective excitation of quantum systems via geometrical optimization*, **J. Chem. Theory Comput.** 11, 4005-4010.  
We propose a novel theoretical method by optimizing transition probabilities via a variational method, substituting time-evolution operators by rotations in subsets of the Hilbert space.
3. B. Y. Chang, S. Shin, I. R. Solá, 2015, *Ultrafast population inversion without the strong field catch: The parallel transfer*, **J. Phys. Chem. Lett.** 6, 1724-1728.  
We find a novel control scheme based on quantum parallel transfer in order to achieve ultrafast electronic absorption using the vibrational coherence in the ground electronic state.
4. I.R. Solá, J González-Vázquez, R de Nalda, L Bañares 2015, *Strong field laser control of photochemistry*, **Phys. Chem. Chem. Phys.** 17, 13183-13200.  
Invited review article and journal cover in which we analyze the key experiments in the quantum control of photochemical processes by intense laser pulses, and their interpretation in terms of light-induced potentials.
5. M. E. Corrales, J. González-Vázquez, G. Balerdi, I. R. Solá, R. de Nalda, L. Bañares, 2014, *Control of ultrafast molecular photodissociation by laser induced potentials*, **Nature Chem.**, 6, 785-790.  
We show for the first time control on the yield and kinetic energy distribution of the fragments in the photodissociation reaction of a polyatomic molecule by means of laser-induced manipulation of the potential energy surface.

6. B. Y. Chang, S. Shin, A. Palacios, F. Martín, I. R. Solá, 2013, *Ultrafast coherent control of giant oscillating molecular dipoles in the presence of static electric fields*, **J. Chem. Phys.** 14, 1405-1/5.

We propose a novel way to generate giant oscillating molecular dipoles that control the chemical properties of diatomic molecular cations at will.

7. M. Richter, P. Marquetand, J. Gonzalez-Vazquez, I. R. Sola, L. Gonzalez, 2012, *Femtosecond intersystem crossing in the DNA nucleobase cytosine*, **J. Phys. Chem. Lett.** 21, 3090-3095.

We apply the SHARC scheme first introduced by us to understand the competing processes of internal conversion and intersystem crossing in the photostability (energy relaxation) of cytosine.

8. M. Richter, P. Marquetand, J. Gonzalez-Vazquez, I. R. Sola, L. Gonzalez, 2011, *Ab-initio molecular dynamics with surface hopping in the adiabatic representation including arbitrary couplings*, **J. Chem. Theory Comput.** 7, 1253-1258.

We propose and apply a novel Surface-hopping method to treat the dynamics of molecules in excited states under strong fields with arbitrary couplings.



# **Plan Nacional de I+D**

## **Currículum Vitae**

Nombre: MERCEDES TARAVILLO CORRALO

Fecha: Marzo de 2017



APELLIDOS: Taravillo Corralo

NOMBRE: Mercedes

D.N.I.:

FECHA DE NACIMIENTO: - -

SEXO: M

Nº FUNCIONARIO:

### SITUACIÓN PROFESIONAL ACTUAL

ORGANISMO:

Universidad Complutense de Madrid

FACULTAD, ESCUELA o INSTITUTO:

Facultad de Ciencias Químicas

DEPT./SECC./UNIDAD ESTR.:

Dpto. de Química Física I

DIRECCION POSTAL:

Dpto. Química Física I. Fac. CC. Químicas. Univ. Complutense 28040 Madrid

TELEFONO (indicar prefijo, número y extensión):

91-394 41 39

FAX:

91-3944135

CORREO ELECTRÓNICO:

mtaravil@quim.ucm.es

ESPECIALIZACIÓN (Código UNESCO): 2307

CATEGORIA PROFESIONAL Y FECHA DE INICIO:

Profesora Titular de Universidad, 5 de Noviembre de 2007

Situación administrativa

PLANTILLA

CONTRATADO

BECARIO

INTERINO

DEDICACION: A TIEMPO COMPLETO

A TIEMPO PARCIAL

### Líneas de investigación

Alta presión, propiedades termodinámicas, ecuación de estado, transiciones de fase, reactividad bajo presión. Estudio de compuestos derivados del carbono (grafito, grafeno, nanotubos de carbono) bajo condiciones extremas, caracterización mediante espectroscopia Raman.

### FORMACIÓN ACADÉMICA

<i>Titulación Superior</i>	<i>CENTRO</i>	<i>FECHA</i>
Licenciado en Ciencias Químicas	Universidad Complutense de Madrid Facultad de Ciencias Químicas	Junio 1993

<i>DOCTORADO</i>		
Ciencias Químicas	Universidad Complutense de Madrid Facultad de Ciencias Químicas	Julio 1999

DIRECTOR(ES) DE TESIS: Dr. Valentín García Baonza y Dr. Javier Núñez Delgado

## ACTIVIDADES ANTERIORES DE CARÁCTER CIENTÍFICO O PROFESIONAL

Puesto	Institución	Fechas
Becario Predoctoral M.E.C.	Dpto. de Química Física I Fac. CC. Químicas (UCM)	Desde el 1-1-94 hasta el 31-12-97
Prof. Ayudante de E.U. de primer periodo	Dpto. de Química Física I Fac. CC. Químicas (UCM)	Desde el 21-1-99 hasta el 20-1-2001
Prof. Ayudante de E.U. de segundo periodo	Dpto. de Química Física I Fac. CC. Químicas (UCM)	Desde el 21-1-2001 hasta el 31-12-2001
Investigador Contratado	Lawrence Livermore National Laboratory, University of California, USA	Desde el 1-10-2001 hasta el 30-9-2003
Prof. Asociado Tipo 2	Dpto. de Química Física I Fac. CC. Químicas (UCM)	Desde el 1-1-2002 hasta el 30-9-2002
Prof. Asociado Tipo 3	Dpto. de Química Física I Fac. CC. Químicas (UCM)	Desde el 1-10-2002 hasta el 30-11-2004
Profesor Contratado Doctor	Dpto. de Química Física I Fac. CC. Químicas (UCM)	Desde el 1-12-2004 hasta el 4-11-2007

### IDIOMAS DE INTERES CIENTIFICO (R = regular, B = bien, C = correctamente)

IDIOMA	HABLA	LEE	ESCRIBE
Inglés	C	C	C

**PARTICIPACIÓN EN PROYECTOS DE I+D FINANCIADOS EN CONVOCATORIAS PÚBLICAS  
(NACIONALES Y/O INTERNACIONALES)**

---

Título del proyecto: *Potencial intermolecular y propiedades físicas de líquidos simples*  
Entidad financiadora: **Ministerio de Educación y Ciencia, DGICYT PB89-0126**  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid  
Duración, desde: **Enero de 1990** hasta: **Diciembre de 1992** Cuantía de la subvención: **54091 €**  
Investigador responsable: **Prof. Javier Núñez Delgado**  
Número de investigadores participantes: **5**

---

Título del proyecto: *Equilibrio y dinámica en líquidos simples*  
Entidad financiadora: **Ministerio de Educación y Ciencia, DGICYT PB92-0553**  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid  
Duración, desde: **Enero de 1993** hasta: **Diciembre de 1995** Cuantía de la subvención: **51086 €**  
Investigador responsable: **Prof. Javier Núñez Delgado**  
Número de investigadores participantes: **6**

---

Título del proyecto: *Ecuaciones de Estado de Líquidos a Alta Presión*  
Entidad financiadora: **Ministerio de Educación y Ciencia, HP93-014**  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid e Instituto Técnico Superior de Lisboa (Portugal)  
Duración, desde: **Enero de 1994** hasta: **Diciembre de 1994** Cuantía de la subvención: **6000 €**  
Investigador responsable: **Prof. Javier Núñez Delgado y Dr. Jorge Calado**  
Número de investigadores participantes: **6**

---

Título del proyecto: *Termodinámica de Sólidos y Líquidos a Alta Presión*  
Entidad financiadora: **Ministerio de Educación y Ciencia, DGICYT PB95-0412**  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid  
Duración, desde: **Septiembre de 1996** hasta: **Sept. de 1999** Cuantía de la subvención: **96162 €**  
Investigador responsable: **Prof. Javier Núñez Delgado**  
Número de investigadores participantes: **6**

---

Título del proyecto: *Efecto de la Alta Presión en la Reactividad de Sistemas Moleculares*  
Entidad financiadora: **Ministerio de Educación y Ciencia, DGICYT PB98-0832**  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid  
Duración, desde: **Diciembre de 1999** hasta: **Diciembre 2002** Cuantía de la subvención: **72121 €**  
Investigador responsable: **Prof. Javier Núñez Delgado**  
Número de investigadores participantes: **6**

---

Título del proyecto: *Determinación experimental de la ecuación de estado a alta presión por métodos directos*  
Entidad financiadora: **Ministerio de Ciencia y Tecnología, BFM2002-01992**  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid  
Duración, desde: **1 de Octubre de 2002** hasta: **31 de Diciembre 2005** Cuantía de la subvención: **69000 €**  
Investigador responsable: **Prof. Mercedes Cáceres Alonso**  
Número de investigadores participantes: **4**

---

## PARTICIPACIÓN EN PROYECTOS (CONT.)

---

Título del proyecto: *Tecnologías de alta presión aplicadas al diseño de nuevos materiales*  
Entidad financiadora: Comunidad Autónoma de Madrid, GR/MAT/0358/2004  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid y Universidad de Oviedo  
Duración, desde: 1 de Enero de 2005 hasta: 31 de Diciembre 2005 Cuantía de la subvención: 25300 €  
Investigador responsable: Prof. Valentín García Baonza  
Número de investigadores participantes: 6

---

Título del proyecto: *Altas presiones: determinación de parámetros espectroscópicos y termodinámicos*  
Entidad financiadora: Universidad Complutense de Madrid y CAM, CM- UCM-910481  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid y Universidad de Oviedo  
Duración, desde: 1 de Enero de 2006 hasta: 30 de Diciembre 2006 Cuantía de la subvención: 12700 €  
Investigador responsable: Prof. Valentín García Baonza  
Número de investigadores participantes: 6

---

Título del proyecto: *Estudio in situ de la reactividad de sólidos moleculares a altas presiones y su aplicación en nuevas rutas de síntesis en ciencia de materiales*  
Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia MAT2006-13548-C02-01  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid y Universidad de Oviedo  
Duración, desde: 1 de Octubre de 2006 hasta: 30 de Septiembre 2009 Cuantía de la subvención: 133100 €  
Investigador responsable: Prof. Valentín García Baonza  
Número de investigadores participantes: 8

---

Título del proyecto: *Prototipo para realizar experimentos de alta presión en un espectrofotómetro de luminiscencia convencional*  
Entidad financiadora: Universidad Complutense de Madrid y CAM, CM- UCM-910481  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Instituto Química-Física Rocasolano y Universidad de Oviedo  
Duración, desde: 1 de Enero de 2007 hasta: 31 de Diciembre 2007 Cuantía de la subvención: 11350 €  
Investigador responsable: Prof. Valentín García Baonza  
Número de investigadores participantes: 9

---

Título del proyecto: *Materia a alta Presión (MALTA)-Programa Consolider-Ingenio 2010*  
Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación-Programa Consolider-Ingenio 2010, CSD2007-00045  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Universidad Autónoma de Barcelona, Universidad Jaume I de Castellón, Universidad de La Laguna, Universidad Politécnica de Valencia, Universidad de Valencia, Centro de Astrobiología INTA-CSIC, Universidad de Oviedo, Universidad de Cantabria, Instituto del Frío-CSIC  
Duración, desde: 1 de Octubre de 2007 hasta: 30 de Mayo 2014 Cuantía de la subvención: 5166000 €  
Investigador responsable: Prof. Valentín García Baonza  
Número de investigadores participantes: 65

---

Título del proyecto: *Producción de juntas metálicas para experimentos con celdas de yunque*  
Entidad financiadora: Universidad Complutense de Madrid y CAM, CCG07-UCM/MAT-2403  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Universidad de Oviedo  
Duración, desde: 1 de Enero de 2008 hasta: 31 de Diciembre 2008 Cuantía de la subvención: 6909 €  
Investigador responsable: Prof. Valentín García Baonza  
Número de investigadores participantes: 8

---

## PARTICIPACIÓN EN PROYECTOS (CONT.)

---

Título del proyecto: *Altas presiones: Determinación de parámetros espectroscópicos y termodinámicos. Grupo 910481*

Entidad financiadora: Convocatoria de Financiación de creación y consolidación de grupos de investigación BSCH-UCM, Gr58/08-A

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Universidad de Oviedo

Duración, desde: 1 de Enero de 2009 hasta: 31 de Diciembre 2010 Cuantía de la subvención: 12490 €

Investigador responsable: Prof. Valentín García Baonza

Número de investigadores participantes: 11

---

Título del proyecto: *Compresibilidad en materiales*

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia CTQ2009-14596-CO2-01

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid y Universidad de Oviedo

Duración, desde: 1 de Enero de 2010 hasta: 31 de Diciembre 2012 Cuantía de la subvención: 180290 €

Investigador responsable: Prof. Valentín García Baonza

Número de investigadores participantes: 10

---

Título del proyecto: *Química a Alta Presión*

Entidad financiadora: Comunidad de Madrid, S2009/PPQ-1551

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid - CSIC

Duración, desde: 1 de Enero de 2010 hasta: 31 de Diciembre 2013 Cuantía de la subvención: 847550 €

Investigador responsable: Prof. Valentín García Baonza

Número de investigadores participantes: 30

---

Título del proyecto: *Altas presiones: Determinación de parámetros espectroscópicos y termodinámicos. Grupo 910481*

Entidad financiadora: Convocatoria de Financiación de creación y consolidación de grupos de investigación BSCH-UCM, Gr35/108-A

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Universidad de Oviedo

Duración, desde: 1 de Enero de 2011 hasta: 31 de Diciembre 2011 Cuantía de la subvención: 5676 €

Investigador responsable: Prof. Valentín García Baonza

Número de investigadores participantes: 11

---

Título del proyecto: *Estructura y Enlace de Sólidos en Condiciones Extremas de Estrés y Temperatura*

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad CTQ2012-38599-C02-02

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Universidad de Oviedo

Duración, desde: 1 de Enero de 2013 hasta: 31 de Diciembre 2015 Cuantía de la subvención: 145080 €

Investigador responsable: Prof. Valentín García Baonza

Número de investigadores participantes: 11

---

## PARTICIPACIÓN EN PROYECTOS (CONT.)

---

Título del proyecto: *Tecnologías de alta presión aplicadas al diseño de nuevos materiales Materia a alta Presión. MALTA-Consolider TEAM*  
Entidad financiadora: **Ministerio de Economía y Competividad MAT2015-71070-REDC**  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Universidad Autónoma de Barcelona, Universidad Jaume I de Castellón, Universidad de La Laguna, Universidad Politécnica de Valencia, Universidad de Valencia, Centro de Astrobiología INTA-CSIC, Universidad de Oviedo, Universidad de Cantabria, Instituto del Frío-CSIC  
Duración, desde: **1 Diciembre de 2015** hasta: **30 de Noviembre 2017** Cuantía de la subvención: **51500 €**  
Investigador responsable: **Prof. Valentín García Baonza**  
Número de investigadores participantes: **65**

---

Título del proyecto: *Red Española para realizar la calibración cruzada de las técnicas espectroscópicas de Supercam dentro de la Misión Mars 2020 de NASA*  
Entidad financiadora: **Ministerio de Economía y Competividad ESP2015-71965-REDT**  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Universidad de Valladolid, Universidad del País Vasco, Universidad de Málaga  
Duración, desde: **1 Diciembre de 2015** hasta: **30 de Noviembre 2017** Cuantía de la subvención: **30000 €**  
Investigador responsable: **Prof. Fernando Rull Pérez**  
Número de investigadores participantes: **24**

---

Título del proyecto: *Mecanoquímica en Condiciones Controladas de Presión: Aplicaciones en Materiales Avanzados y Nanotecnología*  
Entidad financiadora: **Ministerio de Economía y Competividad CTQ2015-67755-C2-1-R**  
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Universidad de Oviedo  
Duración, desde: **1 de Enero de 2016** hasta: **31 de Diciembre 2018** Cuantía de la subvención: **158510 €**  
Investigadores responsables: **Prof. Valentín García Baonza y Prof. Mercedes Taravillo Corralo**  
Número de investigadores participantes: **11**

---

**PUBLICACIONES O DOCUMENTOS CIENTÍFICO-TÉCNICOS**

CLAVE: **L** = libro completo, **CL.** = capítulo de libro, **A** = artículo, **R** = revista, **E** = editor  
**S** = Documento Científico-Técnico restringido

- 
- AUTORES (p. o. de firma): **M. Taravillo**, S. Castro, V. García Baonza, M. Cáceres, J. Núñez  
TITULO: *Thermophysical Properties of Liquid m-Xylene at High Pressures*  
REF. REVISTA/LIBRO: *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* **90**, 1217-1221 (1994) Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): **M. Taravillo**, S. Castro, V. García Baonza, M. Cáceres, J. Núñez  
TITULO: *Equation of State of Liquid o-Xylene at Low Temperatures and High Pressures*  
REF. REVISTA/LIBRO: *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* **90**, 3527-3532 (1994) Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): S. Castro, **M. Taravillo**, V. García Baonza, M. Cáceres, J. Núñez  
TITULO: *Thermodynamic Behaviour of Liquid p-Xylene Near Freezing*  
REF. REVISTA/LIBRO: *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* **90**, 3645-3649 (1994) Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): V. García Baonza, M. Cáceres, **M. Taravillo**, J. Núñez  
TITULO: *Liquids at High Pressure: Equations of State*  
REF. REVISTA/LIBRO: *Current Topics in Solution Chemistry*, Ed. Council of Scientific Information, Trivandrum, India, 1, 47-68 (1994). Clave: **CL**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): **M. Taravillo**, V. García Baonza, M. Cáceres, J. Núñez  
TITULO: *Equation of State for Representing the Thermodynamic Properties of Liquids at High Pressure*  
REF. REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem.* **99**, 8856-8862 (1995). Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): V. G. Baonza, **M. Taravillo**, M. Cáceres, J. Núñez  
TITULO: *Universal Features of the Equation of State of Solids from a Pseudospinodal Hypothesis*  
REF. REVISTA/LIBRO: *Phys. Rev. B.* **53**, 5252-5258 (1996). Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): **M. Taravillo**, V. G. Baonza, J. Núñez, M. Cáceres  
TITULO: *Simple equation of state for solids under compression*  
REF. REVISTA/LIBRO: *Phys. Rev. B* **54**, 7034-7045 (1996). Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): **M. Taravillo**, V. G. Baonza, J. Núñez, M. Cáceres  
TITULO: *Application of a new equation of State for Solids*  
REF. REVISTA/LIBRO: *High Temp.-High Press.* **30**, 97-103 (1998). Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): J. M. Arsuaga, F. Fernández-Martín, **M. Taravillo**, M. Cáceres  
TITULO: *Aqueous Solutions of Tris (1,2-diaminoethane)cobalt(III) chloride and Tris(1,3-diaminopropane)cobalt(III)chloride at T = 278.15 K. Enthalpy of Dilution*  
REF. REVISTA /LIBRO: *J. Chem. Thermodynamics* **33**(10), 1277-1284 (2001). Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): J. M. Arsuaga, **M. Taravillo**, M. Cáceres  
TITULO: *Enthalpies of Dilution of Cobalt-Amine-Type Salts in Aqueous Solutions at 25°C*  
REF. REVISTA /LIBRO: *J. Sol. Chemistry* **30**(12), 1091-1100 (2001). Clave: **A**
-

- 
- AUTORES (p. o. de firma): J. E. F. Rubio, V. G. Baonza, **M. Taravillo**, J. Núñez, M. Cáceres  
TITULO: *A Dynamic Light Scattering Study of the Hypersonic Relaxation in Liquid Toluene*  
REF. REVISTA /LIBRO: *J. Chem. Phys.* **115**(10), 4681-4688 (2001) Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): **M. Taravillo**, V. G. Baonza, J. E. F. Rubio, J. Núñez, M. Cáceres  
TITULO: *The Temperature Dependence of the Equation of State at High Pressures Revisited: A Universal Model for Solids*  
REF. REVISTA /LIBRO: *J. Phys. Chem. Solids.* **63**(9), 1705-1715 (2002). Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): A. Arencibia, V. G. Baonza, F. J. Pérez Tejedor, **M. Taravillo**  
TITULO: *Pressure as a tool to investigate vibrational Fermi resonance in molecular liquids: study of liquid methanol up to 20 kbar by Raman microscopy*  
REF. REVISTA /LIBRO: *High pressure effects in chemistry, biology and materials science. Defect and Diffusion Forum*, **208-209**, 125-128 (2002). Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): A. Arencibia, **M. Taravillo**, F.J. Perez, J. Núñez, V. G. Baonza  
TITULO: *Effect of pressure on hydrogen bonding in liquid methanol*  
REF. REVISTA /LIBRO: *Phys. Rev. Lett.* **89**(19), Art. No. 195504 (2002). Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): V.G. Baonza, **M. Taravillo**, A. Arencibia, M. Cáceres, J. Núñez  
TITULO: *Diamond as pressure sensor in high-pressure Raman spectroscopy using sapphire and other gem anvil cells*  
REF. REVISTA /LIBRO: *J. Raman Spectroscopy* **34**(4), 264-270 (2003). Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): **M. Taravillo**, V.G. Baonza, M. Cáceres, J. Núñez  
TITULO: *Thermodynamic regularities in compressed liquids: I. The thermal expansion coefficient*  
REF. REVISTA /LIBRO: *J. Phys.: Condens. Matter* **15**(19), 2979-2989 (2003). Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): J. E. F. Rubio, V. G. Baonza, **M. Taravillo**, J. Núñez, M. Cáceres  
TITULO: *Dynamic Light Scattering in Liquid and supercooled diphenylmethane*  
REF. REVISTA /LIBRO: *J. Chem. Phys.* **120**(3), 1426-1435 (2004). Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): J. E. F. Rubio, J. M. Arsuaga, **M. Taravillo**, V. G. Baonza, M. Cáceres  
TITULO: *Refractive index of benzene and methyl derivatives: temperature and wavelength dependencies*  
REF. REVISTA /LIBRO: *Experiment. Thermal Fluid Science.* **28**, 887-891 (2004). Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): J. M. Arsuaga, **M. Taravillo**, M. Cáceres, y J. Núñez  
TITULO: *Desarrollo de un Calorímetro para la determinación de la entalpía de dilución en disoluciones acuosas de electrolitos*  
REF. REVISTA /LIBRO: *Información Tecnológica* **15**(1), 81-86 (2004). Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): J. M. Arsuaga, J. E. F. Rubio, **M. Taravillo**, M. Cáceres  
TITULO: *Equipo para la Determinación Experimental del Espectro de Luz Difundida por un Líquido*  
REF. REVISTA /LIBRO: *Información Tecnológica* **15**(1), 75-80 (2004). Clave: **A**
-



- 
- AUTORES (p. o. de firma): V. G. Baonza, O. R. Montoro, **M. Taravillo**, M. Cáceres, J. Núñez  
TITULO: *Phase transitions and hindered rotation in dimethylacetylene at high pressures probed by Raman spectroscopy*  
REF. REVISTA /LIBRO: *J. Chem. Phys.* **121**(22), 11156-11162 (2004). **Clave: A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): J. E. F. Rubio, J. M. Arsuaga, **M. Taravillo**, M. Cáceres  
TITULO: *Refractive index temperature and wavelength dependencies of normal saturated fatty acids in liquid state*  
REF. REVISTA /LIBRO: *Experiment. Thermal Fluid Science.* **29**, 681-684 (2005). **Clave: A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): A. Arencibia, **M. Taravillo**, M. Cáceres, J. Núñez, V. G. Baonza  
TITULO: *Pressure tuning of Fermi resonance in liquid methanol: implications on the analysis of high pressure vibrational spectroscopy experiments*  
REF. REVISTA /LIBRO: *Journal of Chemical Physics* **123**, 214502-1-9 (2005) **Clave: A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): J. E. F. Rubio, **M. Taravillo**, V. G. Baonza, J. Núñez, M. Cáceres  
TITULO: *Light Scattering study of vibrational relaxation in Liquid xylenes*  
REF. REVISTA /LIBRO: *Journal of Chemical Physics* **124**, 014503-1-10 (2006) **Clave: A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): V. G. Baonza, **M. Taravillo**, A. Cazorla, S. Casado, M. Cáceres  
TITULO: *n-pentanol at high pressures: Rotational isomerism in the liquid phase and the liquid-solid phase transition*  
REF. REVISTA /LIBRO: *Journal of Chemical Physics* **124**, 044508-1-8 (2006) **Clave: A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): V. G. Baonza, **M. Taravillo**, M. Cáceres, J. Núñez  
TITULO: *Extension of the Szigeti equations: average longitudinal-transverse frequencies and effective charges*  
REF. REVISTA /LIBRO: *Physical Review B*, **73**, 214117-1-6 (2006) **Clave: A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): Elena del Corro, M. Cáceres, **M. Taravillo**, J. Núñez, V. G. Baonza  
TITULO: *Raman Spectroscopy of aqueous methanol solutions under pressure*  
REF. REVISTA /LIBRO: *High Pressure Research* **26**(4), 407-410 (2006) **Clave: A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): **M. Taravillo**, M. Cáceres, J. Núñez, V.G. Baonza,  
TITULO: *Thermodynamic regularities in compressed liquids: II. The reduced bulk modulus*  
REF. REVISTA /LIBRO: *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 10213-10222 (2006) **Clave: A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): **M. Taravillo**, F. J. Pérez, J. Núñez, M. Cáceres, V.G. Baonza,  
TITULO: *Thermodynamic properties of Compressed liquid methanol in the vicinity of the freezing line*  
REF. REVISTA /LIBRO: *J. Chem. Eng. Data* **52**, 481-486 (2007) **Clave: A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): V.G. Baonza, **M. Taravillo**  
TITULO: *Materia Condensada*, Capítulo 5, pgs 379-414 (2007)  
REF. REVISTA /LIBRO: *Problemas de Química Física*, Coords. J. Bertrán Rusca, J. Núñez Delgado, Editorial Delta, ISBN: 84-96477-48-7 **Clave: CL**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): Elena del Corro, J. González, **M. Taravillo**, E. Flahaut, V. G. Baonza  
TITULO: *Raman Spectra of Double-Wall Carbon Nanotubes under Extreme Uniaxial Stress*  
REF. REVISTA /LIBRO: *Nano Letters* **8**(8), 2215-2218 (2008) **Clave: A**
-

- 
- AUTORES (p. o. de firma): E. del Corro, J. González, **M. Taravillo**, W. Escoffier, V. G. Baonza  
TITULO: *Graphite under non-hydrostatic conditions*  
REF. REVISTA /LIBRO: *High Pressure Research* (2008) **28**(4), 583-586 **Clave: A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): S. Casado, H. E. Lorenzana, M. Cáceres, **M. Taravillo**, V. G. Baonza  
TITULO: *Direct measurement of the liquid 4:1 Methanol:Ethanol Equation of State up to 5 GPa*  
REF. REVISTA /LIBRO: *High Pressure Research* (2008) **28**(4), 637-640 **Clave: A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): H. E. Lorenzana, J. F. Belak, K. S. Bradley, E. M. Bringa, K. S. Budil, J. U. Cazamias, B. El-Dasher, J. A. Hawreliak, J. Hessler, K. Kadau, D. H. Kalantar, J. M. McNaney, D. Milathianaki, K. Rosolankova, D. C. Swift, **M. Taravillo**, T. W. Van Buuren, J. S. Wark, T. Diaz de la Rubia  
TITULO: *Shocked Materials at the Intersection of Experiment and Simulation*  
REF. REVISTA /LIBRO: *Scientific Modeling and Simulation* (2008) **15**, 159-186 **Clave: A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): **M. Taravillo**, E. del Corro, J. Contreras-García, A. Martín Pendás, M. Flórez, J. M. Recio, V. G. Baonza  
TITULO: *Universal compressibility behaviour of ions in ionic crystals*  
REF. REVISTA /LIBRO: *High Pressure Research* (2009) **29**, 97-102 **Clave: A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): E. del Corro, **M. Taravillo**, J. González, V. G. Baonza  
TITULO: *Raman Characterization of Carbon Materials under non-hydrostatic conditions*  
REF. REVISTA /LIBRO: *Carbon* **49**, 973-979 (2011) **Clave: A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): M. E. Arroyo de Dompablo, A. Morales-García, **M. Taravillo**  
TITULO: *DFT+U calculations of crystal lattice, electronic structure, and phase stability under pressure of TiO<sub>2</sub> polymorphs*  
REF. REVISTA /LIBRO: *Journal of Chemical Physics* **135**, 054503-1-9 (2011) **Clave: A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): E. Hidalgo-Baltasar, **M. Taravillo**, V. G. Baonza, P. D. Sanz, B. Guignon  
TITULO: *Speed of sound in Liquid Water from (253.15 to 348.15) K and Pressures from (0.1 to 700) MPa*  
REF. REVISTA /LIBRO: *Journal of Chemical Engineering Data* **56**, 4800-4807 (2011) **Clave: A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): E. del Corro, **M. Taravillo**, V. G. Baonza  
TITULO: *Nonlinear strain effects in double-resonance Raman bands of graphite, graphene, and related materials*  
REF. REVISTA /LIBRO: *Physical Review B* **85**, 033407-1-5 (2012) **Clave: A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): V. Muñoz-Iglesias, L. Jimenez Bonales, D. Santamaría-Pérez, **M. Taravillo**, V. G. Baonza, O. Prieto-Ballesteros  
TITULO: *Characterization of salting-out processes during CO<sub>2</sub>-clathrate formation using Raman Spectroscopy. Planetological application*  
REF. REVISTA /LIBRO: *Spectroscopy Letters* **45**, 407-412 (2012) **Clave: A**
-

- 
- AUTORES (p. o. de firma): E. del Corro, A. Otero de la Roza, **M. Taravillo**, V. G. Baonza  
TITULO: *Raman modes and Grüneisen parameters of graphite under compressive biaxial stress*  
REF. REVISTA /LIBRO: *Carbon* **50**, 4600-4606 (2012) Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): E. del Corro, J. G. Izquierdo, J. González, **M. Taravillo**, V. G. Baonza  
TITULO: *3D Raman mapping of uniaxially loaded 6H-SiC crystals*  
REF. REVISTA /LIBRO: *Journal of Raman Spectroscopy* **44**(5), 758-762 (2013) Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): E. del Corro, **M. Taravillo**, V. G. Baonza  
TITULO: *Stress-dependent correlations for Resonant Raman bands in graphite with defects* DOI: 10.1002/jrs.4475  
REF. REVISTA /LIBRO: *Journal of Raman Spectroscopy* **45**(6), 476-480 (2014) Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): S. Rodriguez Gonzalez, B. Nieto-Ortega, R. C. Gonzalez-Cano, V. Lloveras, J. J. Novoa, F. Mota, J. Vidal-Gancedo, C. Rovira, J. Veciana, E. del Corro, **M. Taravillo**, V. G. Baonza, J. T. López Navarrete, J. Casado  
TITULO: *Diradicals acting through diamagnetic phenylene vinylene bridges: Raman Spectroscopy as a probe to characterize spin delocalization* DOI: 10.1063/1.4871895  
REF. REVISTA /LIBRO: *Journal of Chemical Physics* **140**(16), 164903 (2014) Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): M. Peña-Alvarez, P. Mayorga Burrezo, M. Kertesz, T. Iwamoto, S. Yamago, J. Xia, R. Jasti, J. T. López Navarrete, **M. Taravillo**, V. G. Baonza, J. Casado  
TITULO: *Properties of Sizeable [n]CycloParaPhenylenes As Single-Wall Carbon Nanotubes Molecular Models By Raman Spectroscopy: Structural and Electron-Transfer Responses Modulated by Mechanical Stress* DOI: 10.1002/anie.201400719  
REF. REVISTA /LIBRO: *Angewandte Chemie-International Edition* **53**(27), 7033-7037 (2014). Índice de Impacto en 2012: 13.734. Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): E. Hidalgo-Baltasar, **M. Taravillo**, P. D. Sanz, V. G. Baonza, B. Guignon  
TITULO: *Role of water structure on the high pressure micellization and phase transformations of sodium dodecanoate aqueous solutions* DOI: 10.1021/la501659x  
REF. REVISTA /LIBRO: *Langmuir* **30**(25), 7343-7352 (2014) Clave: **A**
- 
- AUTORES (p. o. de firma): O. R. Montoro, **M. Taravillo**, M. San Andrés, J. M. de la Roja, A. F. Barrero, P. Arteaga, V. G. Baonza  
TITULO: *Spectroscopic Study of the Formation of Analogues of fossil Resins* DOI: 10.1002/jrs.4588  
REF. REVISTA /LIBRO: *Journal of Raman Spectroscopy* **45**, 1230-1235, (2014) Clave: **A**
-

- 
- AUTORES** (p. o. de firma): M. Peña-Alvarez, P. Mayorga Burrezo, T. Iwamoto, L. Qiu, M. Kertesz, **M. Taravillo**, V. G. Baonza, J. T. López Navarrete, S. Yamago, J. Casado
- TITULO:** *Chameleon-like behaviour of cyclo[n]paraphenylenes in complexes with C<sub>70</sub>: on their impressive electronic and structural adaptability as probed by Raman spectroscopy* DOI: 10.1039/C4FD00103F
- REF. REVISTA /LIBRO:** *Faraday Discuss.* 173, 157-171 (2014) **Clave: A**
- 
- AUTORES** (p. o. de firma): M. Peña-Alvarez, E. del Corro, V. G. Baonza, **M. Taravillo**
- TITULO:** *Probing the Stress Effect on the Electronic Structure of Graphite by Resonant Raman Spectroscopy* DOI: 10.1021/jp505730v
- REF. REVISTA /LIBRO:** *Journal of Physical Chemistry C* **118**, 25132-25140 (2014) **Clave: A**
- 
- AUTORES** (p. o. de firma): D. Abbasi-Perez, J. M. Menendez, J. M. Recio, A. Otero de la Roza, E. del Corro, **M. Taravillo**, V. G. Baonza, M. Marqués
- TITULO:** *Modeling Graphite under stress: Equations of state, vibrational modes, and interlayer friction* DOI: 10.1103/PhysRevB.90.054105
- REF. REVISTA /LIBRO:** *Physical Review B* **90**(5), 054105 (2014) **Clave: A**
- 
- AUTORES** (p. o. de firma): I. Povedano, B. Guignon, O. R. Montoro, P. D. Sanz, **M. Taravillo**, V. G. Baonza,
- TITULO:** *Effects of high pressure on unsaturated fatty acids*
- REF. REVISTA /LIBRO:** *High Pressure Research* **34**, 428-433 (2014) **Clave: A**
- 
- AUTORES** (p. o. de firma): E. del Corro, E. Castillo-Martínez, **M. Taravillo**, V. G. Baonza
- TITULO:** *Tunneling phenomena in aligned multi-walled carbon nanotube sheets: conductivity and Raman correlations*
- REF. REVISTA /LIBRO:** *Materials Research Express* **1**, 045603 (2014) **Clave: A**
- 
- AUTORES** (p. o. de firma): M. Peña-Alvarez, L. Qiu, **M. Taravillo**, V. G. Baonza, M. Carmen Ruiz Delgado, S. Yamago, R. Jasti, J. T. López Navarrete, J. Casado M. Kertesz
- TITULO:** *From linear to cyclic Oligoparaphenylenes: electronic and molecular changes traced in the vibrational Raman spectra and reformulation of the bond length alternation pattern*
- REF. REVISTA /LIBRO:** *Physical Chemistry Chemical Physics* **18**, 11683-11692 (2016). **Clave: A**
- 
- AUTORES** (p. o. de firma): M. Peña-Alvarez, M. Carmen Ruiz Delgado, **M. Taravillo**, V. G. Baonza, J. T. López Navarrete, P. Evans, R. Jasti, S. Yamago, M. Kertesz, J. Casado
- TITULO:** *The Raman fingerprint of cyclic conjugation: the case of the stabilization of cations and dications in cycloparaphenylenes*
- REF. REVISTA /LIBRO:** *Chemical Science* **7**, 3494-3499 (2016). **Clave: A**
- 
- AUTORES** (p. o. de firma): M. Peña-Alvarez, E. del Corro, F. Langa, V. G. Baonza, **M. Taravillo**
- TITULO:** *Morphological Changes in Carbon Nanohorns under Stress: a combined Raman Spectroscopy and TEM Study*
- REF. REVISTA /LIBRO:** *RSC Advances* **6**, 49543-49550 (2016) **Clave: A**
-

---

**AUTORES** (p. o. de firma): B. Guignon, E. Hidalgo-Baltasar, P. D. Sanz, V. G. Baonza, **M. Taravillo**

**TITULO:** *Evidence of low-density water to high-density water structural transformation in milk during high-pressure processing*

**REF. REVISTA /LIBRO:** *Innovative Food Science and Emerging Technologies* **38**, 238-242 (2016) **Clave: A**

---

Índice h: 13

Obtenido del ISI web of Knowledge en Marzo de 2017

**PARTICIPACION EN CONTRATOS DE I+D DE ESPECIAL  
RELEVANCIA CON EMPRESAS Y/O ADMINISTRACIONES  
(nacionales y/o internacionales)**

---

**TITULO DEL CONTRATO:** Post Doctoral Research Staff Member in the Physics and Advanced Technologies  
Directorate/H Division

**EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIADORA:** Lawrence Livermore National Laboratory, University of  
California (Department of Energy of USA)

**DURACIÓN DESDE:** 1 de Octubre de 2001      **HASTA:** 30 de Septiembre de 2003

**INVESTIGADOR RESPONSABLE:** Dr. Hector E. Lorenzana

---

**ESTANCIAS EN CENTROS EXTRANJEROS**  
**(estancias continuadas superiores a un mes)**

Clave D=doctorado, P=postdoctoral. Y= invitado, C=contratado, O=otras (especificar)

---

*CENTRO:* Centro de Química Estructural, Instituto Superior Técnico

*LOCALIDAD:* Lisboa      *PAIS:*Portugal      *AÑO:* 1996      *DURACIÓN:* 6 semanas

*TEMA:* Medida de la tensión superficial de alcoholes mediante el método de la gota pendiente      *CLAVE:* D

---

*CENTRO:* H Division, Physics and Advanced Technologies Directorate, Lawrence Livermore National Laboratory, University of California

*LOCALIDAD:* Livermore, California      *PAIS:*Estados Unidos      *AÑO:* 2001, 2002, 2003      *DURACIÓN:* 2 años

*TEMA:* Caracterización y síntesis de nuevos materiales utilizando técnicas de alta presión      *CLAVE:* P/C

---

*CENTRO:* Chemistry, Materials, and Life Sciences Directorate, Materials Science and Technology Division, Lawrence Livermore National Laboratory, University of California

*LOCALIDAD:* Livermore, California      *PAIS:*Estados Unidos      *AÑO:* 2006      *DURACIÓN:* 4 semanas

*TEMA:* X-ray diffraction Experiments at ultrafast temporal resolutions      *CLAVE:* Y

---

## CONTRIBUCIONES A CONGRESOS

- 
- AUTORES:** S. Casado, A. Arencibia, **M. Taravillo**, J. Núñez, V. García Baonza  
**TITULO:** *Clustering under pressure in water and other associated liquids*  
**TIPO DE PARTICIPACION:** Comunicación (póster)  
**CONGRESO:** Joint 19<sup>th</sup> AIRAPT-41<sup>st</sup> European High Pressure Research Group Meeting. International Conference on High Pressure Science and Technology  
**PUBLICACION:** Book of Poster contributions  
**LUGAR DE CELEBRACION** Bourdeaux (Francia)  
**AÑO:** Julio 2003
- 
- AUTORES:** A. Arencibia, **M. Taravillo**, J. Núñez, M. Cáceres, V. García Baonza  
**TITULO:** *Perturbation Model for Fermi Resonance at high pressure*  
**TIPO DE PARTICIPACION:** Comunicación (póster)  
**CONGRESO:** Joint 19<sup>th</sup> AIRAPT-41<sup>st</sup> European High Pressure Research Group Meeting. International Conference on High Pressure Science and Technology  
**PUBLICACION:** Book of Poster contributions  
**LUGAR DE CELEBRACION** Bourdeaux (Francia)  
**AÑO:** Julio 2003
- 
- AUTORES:** **M. Taravillo**, M. Cáceres, J. Núñez, V. García Baonza  
**TITULO:** *Thermodynamics Regularities in Compressed Liquids*  
**TIPO DE PARTICIPACION:** Comunicación (póster)  
**CONGRESO:** Joint 20<sup>th</sup> AIRAPT-43<sup>th</sup> European High Pressure Research Group Meeting. International Conference on High Pressure Science and Technology  
**PUBLICACION:** Book of abstracts  
**LUGAR DE CELEBRACION** Karlsruhe (Alemania)  
**AÑO:** Junio-Julio 2005
- 
- AUTORES:** S. Casado, **M. Taravillo**, M. Cáceres, J. Núñez, V. García Baonza  
**TITULO:** *Direct measurement of the equation of state of liquid water under pressure*  
**TIPO DE PARTICIPACION:** Comunicación (póster)  
**CONGRESO:** Joint 20<sup>th</sup> AIRAPT-43<sup>th</sup> European High Pressure Research Group Meeting. International Conference on High Pressure Science and Technology  
**PUBLICACION:** Book of abstracts  
**LUGAR DE CELEBRACION** Karlsruhe (Alemania)  
**AÑO:** Junio-Julio 2005
- 
- AUTORES:** C. Mediavilla, J. Tortajada, **M. Taravillo**, M. Cáceres, J. Núñez, V. García Baonza  
**TITULO:** *Possible reaction paths in acetylene derivatives under pressure*  
**TIPO DE PARTICIPACION:** Comunicación (póster)  
**CONGRESO:** Joint 20<sup>th</sup> AIRAPT-43<sup>th</sup> European High Pressure Research Group Meeting. International Conference on High Pressure Science and Technology  
**PUBLICACION:** Book of abstracts  
**LUGAR DE CELEBRACION** Karlsruhe (Alemania)  
**AÑO:** Junio-Julio 2005
-



## CONTRIBUCIONES A CONGRESOS (continuación)

---

**AUTORES:** V. G. Baonza, S. Casado, A. Sotto, E. Del Corro, **M. Taravillo**, J. Núñez, M. Cáceres  
**TITULO:** *Raman Spectroscopy in gem anvil cells: pressure-induced structural changes in water deduced from vibrational spectra*  
**TIPO DE PARTICIPACION:** Comunicación oral  
**CONGRESO:** 7<sup>th</sup> International Conference on “Raman spectroscopy applied to Earth and Planetary Sciences” GEORAMAN’06  
**PUBLICACION:** Book of abstracts  
**LUGAR DE CELEBRACION** Almuñécar (España)  
**AÑO:** Junio 2006

---

**AUTORES:** C. Mediavilla, J. Tortajada, **M. Taravillo**, E. del Corro, M. Cáceres, J. Núñez, V. García Baonza  
**TITULO:** *Theoretical study of reactivity under high pressure: a simple model*  
**TIPO DE PARTICIPACION:** Comunicación (póster)  
**CONGRESO:** ESPA 2006 (Electronic Structure: Principles and Applications)  
**PUBLICACION:** Book of abstracts  
**LUGAR DE CELEBRACION** Santiago de Compostela (Spain)  
**AÑO:** Julio 18-21, 2006

---

**AUTORES:** E. del Corro, M. Cáceres, **M. Taravillo**, J. Núñez, V. García Baonza  
**TITULO:** *Raman Spectroscopy of aqueous methanol solutions under pressure*  
**TIPO DE PARTICIPACION:** Comunicación (póster)  
**CONGRESO:** 44<sup>th</sup> EHPRG International Conference  
**PUBLICACION:** Book of abstracts  
**LUGAR DE CELEBRACION** Prague (Czech Republic)  
**AÑO:** Septiembre 2006

---

**AUTORES:** **M. Taravillo**, O. Rodríguez, E. del Corro, M. Cáceres, V. García Baonza  
**TITULO:** *Raman Spectroscopic Studies of the pressure-induced transitions in cyclohexanone*  
**TIPO DE PARTICIPACION:** Comunicación (póster)  
**CONGRESO:** Joint 21<sup>st</sup> AIRAPT and 45<sup>th</sup> European High Pressure Research Group Meeting, International Conference on High Pressure Science and Technology  
**PUBLICACION:** Book of abstracts  
**LUGAR DE CELEBRACION** Catania (Italy)  
**AÑO:** Septiembre 2007

---

**AUTORES:** E. del Corro, **M. Taravillo**, M. Cáceres, J. Núñez, V. García Baonza  
**TITULO:** *Effect of high pressure on hydrogen bonding in cyclohexanone*  
**TIPO DE PARTICIPACION:** Comunicación (póster)  
**CONGRESO:** Joint 21<sup>st</sup> AIRAPT and 45<sup>th</sup> European High Pressure Research Group Meeting, International Conference on High Pressure Science and Technology  
**PUBLICACION:** Book of abstracts  
**LUGAR DE CELEBRACION** Catania (Italy)  
**AÑO:** Septiembre 2007

---

## CONTRIBUCIONES A CONGRESOS (continuación)

---

**AUTORES:** E. del Corro, J. González, **M. Taravillo**, V. García Baonza  
**TITULO:** *Graphite under non-hydrostatic conditions*  
**TIPO DE PARTICIPACION:** Comunicación oral  
**CONGRESO:** 46<sup>th</sup> EHPRG International Conference  
**PUBLICACION:** Book of abstracts  
**LUGAR DE CELEBRACION** Valencia (Spain)  
**AÑO:** Septiembre 2008

---

**AUTORES:** **M. Taravillo**, E. del Corro, J. Contreras-García, M. Flórez, J. M. Recio, V. García Baonza  
**TITULO:** *Universal compressibility behaviour of ions in ionic crystals*  
**TIPO DE PARTICIPACION:** Comunicación (póster)  
**CONGRESO:** 46<sup>th</sup> EHPRG International Conference  
**PUBLICACION:** Book of abstracts  
**LUGAR DE CELEBRACION** Valencia (Spain)  
**AÑO:** Septiembre 2008

---

**AUTORES:** C. Mediavilla, **M. Taravillo**, V. G. Baonza, J. Tortajada  
**TITULO:** *Automerization in compressed unsaturated molecular systems*  
**TIPO DE PARTICIPACION:** Comunicación (póster)  
**CONGRESO:** 46<sup>th</sup> EHPRG International Conference  
**PUBLICACION:** Book of abstracts  
**LUGAR DE CELEBRACION** Valencia (Spain)  
**AÑO:** Septiembre 2008

---

**AUTORES:** J. M. Recio, M. Flórez, **M. Taravillo**, V. G. Baonza  
**TITULO:** *Frequency and bulk modulus changes at the B1-B2 high pressure phase transition*  
**TIPO DE PARTICIPACION:** Comunicación (póster)  
**CONGRESO:** 46<sup>th</sup> EHPRG International Conference  
**PUBLICACION:** Book of abstracts  
**LUGAR DE CELEBRACION** Valencia (Spain)  
**AÑO:** Septiembre 2008

---

**AUTORES:** S. Casado, H. E. Lorenzana, M. Cáceres, **M. Taravillo**, V. G. Baonza  
**TITULO:** *Direct measurements of the liquid 4:1 Methanol:Ethanol Equation of State up to 50 kbar*  
**TIPO DE PARTICIPACION:** Comunicación (póster)  
**CONGRESO:** 46<sup>th</sup> EHPRG International Conference  
**PUBLICACION:** Book of abstracts  
**LUGAR DE CELEBRACION** Valencia (Spain)  
**AÑO:** Septiembre 2008

---

## CONTRIBUCIONES A CONGRESOS (continuación)

---

<b>AUTORES:</b>	R. Ponce-Ortiz, J. Casado, J. T. López-Navarrete, Y. Wang, A. Facchetti, T. J. Marks, E. del Corro, <b>M. Taravillo</b> , V. G. Baonza
<b>TITULO:</b>	<i>The effect of pressure on twisted p-electron systems electro-optic chromophores</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación (póster)
<b>CONGRESO:</b>	46 <sup>th</sup> EHPRG International Conference
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Valencia (Spain)
<b>AÑO:</b>	Septiembre 2008

---

<b>AUTORES:</b>	E. del Corro, J. González, <b>M. Taravillo</b> , V. G. Baonza
<b>TITULO:</b>	<i>Interpretation of Raman Spectra of Carbon Nanotubes under Uniaxial Extreme Conditions</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación (oral)
<b>CONGRESO:</b>	22 <sup>nd</sup> AIRAPT International Conference on High Pressure Science and Technology
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Tokio (Japan)
<b>AÑO:</b>	Julio 2009

---

<b>AUTORES:</b>	E. del Corro, <b>M. Taravillo</b> , P. Pertierra, M. A. Salvadó, J. M. Recio, V. G. Baonza
<b>TITULO:</b>	<i>Experimental and Theoretical Analysis of Moissanite Anvil Cells for Uniaxial Stress Experiments on Carbon-based Materials</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación (póster)
<b>CONGRESO:</b>	47 <sup>th</sup> EHPRG International Conference
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Paris (France)
<b>AÑO:</b>	Septiembre 2009

---

<b>AUTORES:</b>	A. Morales-García, <b>M. Taravillo</b> , M. E. Arroyo y de Dompablo
<b>TITULO:</b>	A DFT + U investigation on the high pressure forms of TiO <sub>2</sub> and TiOF
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación (póster)
<b>CONGRESO:</b>	ESPA 2010, 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA)
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Oviedo (España)
<b>AÑO:</b>	29 Junio-2 Julio 2010

---

<b>AUTORES:</b>	C. Mediavilla, <b>M. Taravillo</b> , V. G. Baonza, J. Tortajada
<b>TITULO:</b>	The Role of Pressure and Non-Vertical Transitions on the Optical Spectroscopy of Tetramethylcyclobutadiene: a computational Study
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación (póster)
<b>CONGRESO:</b>	ESPA 2010, 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA)
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Oviedo (España)
<b>AÑO:</b>	29 Junio-2 Julio 2010

---

## CONTRIBUCIONES A CONGRESOS (continuación)

---

<b>AUTORES:</b>	E. Belandria, J. M. Broto, E. Flahaut, F. Rodríguez, R. Valiente, E. del Corro, <b>M. Taravillo</b> , V. G. Baonza, J. González
<b>TITULO:</b>	Pressure Dependence of Raman modes in double wall carbon nanotubes filled with amorphous selenium
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación (póster)
<b>CONGRESO:</b>	NanoSpain 2011, 8th Edition of NanoSpain Conference
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Bilbao (España)
<b>AÑO:</b>	11-14 Abril 2011

---

<b>AUTORES:</b>	E. Hidalgo, <b>M. Taravillo</b> , V. G. Baonza, P. D. Sanz, B. Guignon
<b>TITULO:</b>	Ultrasonic evidence for low density water to high density water transition
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación (póster)
<b>CONGRESO:</b>	8 <sup>th</sup> Liquid Matter Conference
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Viena (Austria)
<b>AÑO:</b>	6-10 Septiembre 2011

---

<b>AUTORES:</b>	N. Mendoza, M. Cáceres, <b>M. Taravillo</b> , V. G. Baonza
<b>TITULO:</b>	Local Internal Pressures in Aqueous and Alcohol Solutions
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación (póster)
<b>CONGRESO:</b>	8 <sup>th</sup> Liquid Matter Conference
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Viena (Austria)
<b>AÑO:</b>	6-10 Septiembre 2011

---

<b>AUTORES:</b>	M. V. Muñoz-Iglesias, L. J. Bonales, <b>M. Taravillo</b> , V. G. Baonza, O. Prieto-Ballesteros
<b>TITULO:</b>	Monitoring by Raman Spectroscopy of CO <sub>2</sub> clathrate formation from Electrolyte Solutions. The performance to Icy Satellites
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación (póster)
<b>CONGRESO:</b>	European Planetary Science Congress, EPSC-DPS Joint Meeting 2011
<b>PUBLICACION:</b>	EPSC abstracts, Vol. 6, EPSC-DPS2011-914,2011
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Nantes (Francia)
<b>AÑO:</b>	2-7 Octubre 2011

---

<b>AUTORES:</b>	<u>E. del Corro</u> , E. Castillo-Martínez, <b>M. Taravillo</b> , R. H. Baughman, V. G. Baonza
<b>TITULO:</b>	<i>Compression enhanced conductivity in carbon nanotubes</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación oral
<b>CONGRESO:</b>	NanoSpain 2012, 9th Edition of NanoSpain Conference
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Santander (España)
<b>AÑO:</b>	27 Febrero - 1 Marzo 2012

---

## CONTRIBUCIONES A CONGRESOS (continuación)

---

<b>AUTORES:</b>	M. Peña-Álvarez, V. G. Solares, E. del Corro, V. G. Baonza, <b>M. Taravillo</b>
<b>TITULO:</b>	<i>Raman Spectra of Single Walled Carbon Nanotubes between 300 and 800 K</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación (póster)
<b>CONGRESO:</b>	NanoSpain 2012, 9th Edition of NanoSpain Conference
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Santander (España)
<b>AÑO:</b>	27 Febrero - 1 Marzo 2012

---

<b>AUTORES:</b>	O. Rodríguez-Montoro, <b>M. Taravillo</b> , V. G. Baonza, A. F. Barrero, P. Arteaga-Burón
<b>TITULO:</b>	<i>Study of the formation of amber-like and other fossil resins by spectroscopic methods</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación (póster)
<b>CONGRESO:</b>	GeoRaman 10
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Nancy (Francia)
<b>AÑO:</b>	11-13 June 2012

---

<b>AUTORES:</b>	E. del Corro, <b>M. Taravillo</b> , V. G. Baonza
<b>TITULO:</b>	<i>Compressive and Tensile Biaxial Strain in Graphite based materials: non-linear behavior of double Resonance Raman Bands</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación oral
<b>CONGRESO:</b>	XVth International Conference on High Pressure in Semiconductor Physics-HPSP15
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Montpellier (Francia)
<b>AÑO:</b>	25-27 July 2012

---

<b>AUTORES:</b>	E. del Corro, D. Abbasi-Pérez, A. Otero-de la Roza, M. Marqués, <b>M. Taravillo</b> , V. G. Baonza, J. M. Recio
<b>TITULO:</b>	<i>Interlayer Friction of Graphite Sheets</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación (póster)
<b>CONGRESO:</b>	International Conference on Diamond and Carbon Materials
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Granada (Spain)
<b>AÑO:</b>	3-6 September 2012

---

<b>AUTORES:</b>	E. del Corro, <b>M. Taravillo</b> , M. Peña-Álvarez, V. G. Baonza
<b>TITULO:</b>	<i>Stress Distribution in a Sapphire-Moissanite anvil cell</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación (póster)
<b>CONGRESO:</b>	50 <sup>th</sup> EHPRG International Conference
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Thessaloniki (Grecia)
<b>AÑO:</b>	16-21 September 2012

---

## CONTRIBUCIONES A CONGRESOS (continuación)

<b>AUTORES:</b>	M. Peña-Álvarez, E. del Corro, V. G. Baonza, <b>M. Taravillo</b>
<b>TÍTULO:</b>	<i>Double Resonance Raman Bands Response to Stress in Graphite at different excitation energies</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación oral
<b>CONGRESO:</b>	50 <sup>th</sup> EHPRG International Conference
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Thessaloniki (Grecia)
<b>AÑO:</b>	16-21 September 2012
<b>AUTORES:</b>	B. Guignon, P. D. Sanz, <b>M. Taravillo</b> , V. G. Baonza
<b>TÍTULO:</b>	<i>Conformation Change of Food Lipids Processed at High Hydrostatic Pressure</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Poster
<b>CONGRESO:</b>	2012 EFFoST Annual Meeting (European Federation of Food Science and Technology)
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Le Corum, Montpellier (Francia)
<b>AÑO:</b>	20-23 November 2012
<b>AUTORES:</b>	M. Peña-Álvarez, E. del Corro, <b>M. Taravillo</b> , J. T. López Navarrete, S. Yamago, V. G. Baonza, J. Casado
<b>TÍTULO:</b>	<i>Raman Spectroscopy of Cyclic Paraphenylenes</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación oral
<b>CONGRESO:</b>	ESMolNa 2012, Fifth European School on Molecular Nanoscience
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Cuenca (España)
<b>AÑO:</b>	28 October-2 November 2012
<b>AUTORES:</b>	M. Peña-Álvarez, E. del Corro, <b>M. Taravillo</b> , J. T. López Navarrete, S. Yamago, V. G. Baonza, J. Casado
<b>TÍTULO:</b>	<i>Pressure Induced Encapsulation of C<sub>60</sub> in [10]Cycloparaphenylene</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación oral
<b>CONGRESO:</b>	XIV ENMM 2013, XIV National School of Molecular Materials
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Almagro, Ciudad Real (España)
<b>AÑO:</b>	3-7 February 2013
<b>AUTORES:</b>	B. Guignon, E. Mena Cabezas, E. Costard, P. D. Sanz, E. Hidalgo, <b>M. Taravillo</b> , V. G. Baonza
<b>TÍTULO:</b>	<i>Apparent Volumetric properties of caseins at high pressure</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Poster
<b>CONGRESO:</b>	EuroFoodChem XVII
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts ISBN: 978-605-63935-0-1.
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Estambul (Turquía)
<b>AÑO:</b>	May 2013
<b>AUTORES:</b>	I. Povedano, <b>M. Taravillo</b> , B. Guignon, V. G. Baonza
<b>TÍTULO:</b>	<i>Ácidos Grasos Procesados a Alta Presión: Ácidos Linoleico y Elaídico</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación oral y póster
<b>CONGRESO:</b>	VI Escuela de Altas Presiones (Universidad de Oviedo)
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Oviedo (España)
<b>AÑO:</b>	20-24 Mayo 2013

## CONTRIBUCIONES A CONGRESOS (continuación)

---

<b>AUTORES:</b>	M. Peña-Alvárez, P. Mayorga, <b>M. Taravillo</b> , E. del Corro, M. Kertesz, S. Yamago, J. T. López-Navarrete, J. Casado, V. G. Baonza
<b>TITULO:</b>	<i>Response to Stress in Molecular Loops probed by Raman Spectroscopy</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación oral
<b>CONGRESO:</b>	Joint 18 <sup>th</sup> APS Topical Group on Shock Compression of Condensed Matter and 24 <sup>th</sup> AIRAPT, International Conference on High Pressure Science and Technology
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Seattle, Washington (USA)
<b>AÑO:</b>	7-12 Julio 2013

---

<b>AUTORES:</b>	A. Lobato-Fernández, <b>M. Taravillo</b> , V. G. Baonza
<b>TITULO:</b>	<i>Unified force-constant model for applications in condensed matter and surface science</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Poster
<b>CONGRESO:</b>	3 <sup>rd</sup> Early Stage Researchers Workshop in Nanoscience
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Instituto IMDEA Nanociencia, Madrid
<b>AÑO:</b>	27-28 Junio de 2013

---

<b>AUTORES:</b>	A. Lobato-Fernández, <b>M. Taravillo</b> , V. G. Baonza
<b>TITULO:</b>	<i>From Molecular diatomics to bulk properties at high pressure: A pair potential approach</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Poster
<b>CONGRESO:</b>	51 <sup>th</sup> EHPRG International Conference
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Londres (Reino Unido)
<b>AÑO:</b>	1-6 September 2013

---

<b>AUTORES:</b>	D. Abbasi, E. del Corro, A. Otero de la Roza, M. Marqués, J. M. Menéndez, <b>M. Taravillo</b> , V. G. Baonza, J. M. Recio
<b>TITULO:</b>	<i>Modeling graphite under stress: Equations of state, vibrational modes and inter layer friction</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Poster
<b>CONGRESO:</b>	51 <sup>th</sup> EHPRG International Conference
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Londres (Reino Unido)
<b>AÑO:</b>	1-6 September 2013

---

<b>AUTORES:</b>	A. Andrada, J. Sánchez-Benítez, <b>M. Taravillo</b> , V. G. Baonza
<b>TITULO:</b>	<i>Relation between electronic and mechanical properties in graphite under non-hydrostatic conditions</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Poster
<b>CONGRESO:</b>	51 <sup>th</sup> EHPRG International Conference
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Londres (Reino Unido)
<b>AÑO:</b>	1-6 September 2013

---

## CONTRIBUCIONES A CONGRESOS (continuación)

<b>AUTORES:</b>	O. Rodríguez-Montoro, <b>M. Taravillo</b> , M. San Andrés, J. M. de la Roja, A. F. Barrero, P. Arteaga, V. G. Baonza
<b>TÍTULO:</b>	<i>Raman Spectroscopic Study of the formation of fossil resins analogs</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación (póster)
<b>CONGRESO:</b>	7th International Congress on the Application of Raman Spectroscopy in Art and Archaeology
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Ljubiana (Eslovenia)
<b>AÑO:</b>	September 2013
<b>AUTORES:</b>	M. San Andrés, V. G. Baonza, O. Rodríguez-Montoro, A. Bouzas, R. Chercoles, <b>M. Taravillo</b> , J. M. de la Roja
<b>TÍTULO:</b>	<i>Synthetic Polymers and Cultural Heritage. An Analytical Approach by Raman Spectroscopy</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación (póster)
<b>CONGRESO:</b>	7th International Congress on the Application of Raman Spectroscopy in Art and Archaeology
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Ljubiana (Eslovenia)
<b>AÑO:</b>	September 2013
<b>AUTORES:</b>	A. Lobato-Fernández, <b>M. Taravillo</b> , V. G. Baonza
<b>TÍTULO:</b>	<i>From Molecular diatomics to bulk properties at high pressure: A pair potential approach</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Poster
<b>CONGRESO:</b>	51 <sup>th</sup> EHPRG International Conference
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Londres (Reino Unido)
<b>AÑO:</b>	1-6 September 2013
<b>AUTORES:</b>	O. Rodríguez-Montoro, J. S. Cozar, <b>M. Taravillo</b> , V. G. Baonza
<b>TÍTULO:</b>	<i>Aplicación de la espectroscopía Raman y FTIR al estudio de los procesos físico-químicos que han intervenido en la formación de las resinas fósiles y su caracterización. Ácido comúnicó</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación (póster)
<b>CONGRESO:</b>	International Gemological Congress, IGE 2014, 16 <sup>th</sup> FEEG Symposium
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Madrid
<b>AÑO:</b>	17-19 January 2014
<b>AUTORES:</b>	E. Hidalgo, <b>M. Taravillo</b> , P. D. Sanz, V. G. Baonza, B. Guignon
<b>TÍTULO:</b>	<i>Micelles under Pressure: some Geometrical Considerations</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación oral
<b>CONGRESO:</b>	52nd European High Pressure Research Group International Meeting
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Lyon (Francia))
<b>AÑO:</b>	7-12 Septiembre 2014



## CONTRIBUCIONES A CONGRESOS (continuación)

---

<b>AUTORES:</b>	M. Peña-Álvarez, E. Del Corro, M. Yudasaka, S. Iijima, F. Langa, V. G. Baonza, <b>M. Taravillo</b>
<b>TITULO:</b>	<i>Nanohorns under Stress: Raman response and morphological changes</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación póster
<b>CONGRESO:</b>	52nd European High Pressure Research Group International Meeting
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Lyon (Francia))
<b>AÑO:</b>	7-12 Septiembre 2014

---

<b>AUTORES:</b>	O. R. Montoro, <b>M. Taravillo</b> , I. Povedano, J. Tortajada, V. G. Baonza
<b>TITULO:</b>	<i>Pressure as driving force in the formation of Fossil Resins: Pressure Induced Changes in trans-Communic Acid studied by Raman Spectroscopy</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación Póster
<b>CONGRESO:</b>	Joint 25 <sup>th</sup> AIRAPT & 53 <sup>rd</sup> EHPRG, International Conference on High Pressure Science and Technology
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Madrid (Spain)
<b>AÑO:</b>	31 Agosto-4 Septiembre 2015

---

<b>AUTORES:</b>	M. Peña-Alvarez, L. Qiu, P. Mayorga, M. Kertesz, R. Jasti, J. T. López Navarrete, V. G. Baonza, J. Casado, <b>M. Taravillo</b>
<b>TITULO:</b>	<i>How does the highly strained [5]Cycloparaphenylene respond to compression</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación Oral
<b>CONGRESO:</b>	Joint 25 <sup>th</sup> AIRAPT & 53 <sup>rd</sup> EHPRG, International Conference on High Pressure Science and Technology
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Madrid (Spain)
<b>AÑO:</b>	31 Agosto-4 Septiembre 2015

---

<b>AUTORES:</b>	A. Lobato, <b>M. Taravillo</b> , V. G. Baonza
<b>TITULO:</b>	<i>A Definition of Pressure for Chemical Bonds</i>
<b>TIPO DE PARTICIPACION:</b>	Comunicación Poster
<b>CONGRESO:</b>	Joint 25 <sup>th</sup> AIRAPT & 53 <sup>rd</sup> EHPRG, International Conference on High Pressure Science and Technology
<b>PUBLICACION:</b>	Book of abstracts
<b>LUGAR DE CELEBRACION</b>	Madrid (Spain)
<b>AÑO:</b>	31 Agosto-4 Septiembre 2015

---

## TESIS DOCTORALES DIRIGIDAS

---

Título: Respuesta Mecánica del Grafito bajo Condiciones Extremas

Doctorando: Elena del Corro García

Universidad: Universidad Complutense de Madrid

Facultad / Escuela: Facultad de Ciencias Químicas

Fecha: 13 Junio de 2011

---

Título: Estudio Espectroscópico de la Formación de Análogos de Resinas Fósiles

Doctorando: Óscar Rodríguez Montoro

Universidad: Universidad Complutense de Madrid

Facultad / Escuela: Facultad de Ciencias Químicas

Fecha: 9 Mayo de 2013

---

Título: Papel del agua en la formación de agregados supramoleculares bajo presión

Doctorando: Eduardo Hidalgo Baltasar

Universidad: Universidad Complutense de Madrid

Facultad / Escuela: Facultad de Ciencias Químicas

Fecha: 19 Julio de 2013

---

Título: Las excepcionales propiedades de los [n]CPPs: ¿por qué importa tanto el tamaño y la estructura molecular?

Doctorando: Miriam Peña Álvarez

Universidad: Universidad Complutense de Madrid

Facultad / Escuela: Facultad de Ciencias Químicas

Fecha: 15 de Abril de 2016

---

## Experiencia en organización de actividades de I+D

Organización de congresos, seminarios, jornadas, etc., científicos-tecnológicos

---

*Título: II Escuela Española de Altas Presiones*  
*Tipo de Actividad: Secretaria científica y ponente con dos seminarios*  
*Ámbito: Nacional. Dirigida a estudiantes de doctorado*  
*Fecha: 28 de Junio al 2 de Julio de 2004*  
*Financiada por la Universidad Complutense de Madrid y Repsol-YPF*

---

*Título: 46th EHPRG (European High Pressure Research Group) International Conference*  
*Tipo de Actividad: Organización del microsímposio titulado "Molecular Crystals under pressure: experiments and theory". Chairman*  
*Ámbito: Internacional*  
*Fecha: 7-12 de Septiembre de 2008*

---

*Título: Workshop on Modelling and Simulation of High Pressure Processes*  
*Tipo de Actividad: Comité científico <http://www.mat.ucm.es/imi/HighPressures/>*  
*Ámbito: Nacional, Facultad de Ciencias Matemáticas (Madrid)*  
*Fecha: 22 de Noviembre de 2010*  
*Financiada por: MALTA-Consolider y QUIMAPRES*

---

*Título: 1<sup>er</sup> Simposio Español de Altas Presiones*  
*Tipo de Actividad: Comité Científico y ponente con un seminario*  
*Ámbito: Nacional, Miraflores de la Sierra (Madrid)*  
*Fecha: 23-27 Enero de 2011,*  
*Financiada por MALTA-Consolider y QUIMAPRES*

---

*Título: Joint 25<sup>th</sup> AIRAPT & 53<sup>rd</sup> EHPRG, International Conference on High Pressure Science and Technology*  
*Tipo de Actividad: Secretaria del comité local organizador del congreso*  
*Ámbito: Internacional*  
*Fecha: 31 de Agosto-4 de Septiembre de 2015*

---

## OTROS MÉRITOS O ALEGACIONES QUE DESEE HACER CONSTAR

---

### Premios

- El día 19 de mayo de 1995 la *Comisión Permanente de la Junta de Gobierno de la U.C.M.* acordó concederle el **Premio Extraordinario de Licenciatura** correspondiente al Curso académico 93/94.

### Becas

- Beca predoctoral de formación de personal investigador del M.E.C. Duración: 1 de Enero de 1994 hasta 31 de Diciembre de 1997.
- Beca Postdoctoral (Programa de becas Postdoctorales en España y en el extranjero del MECD). Duración: 1 de Octubre de 2001 hasta el 30 de Septiembre de 2003. Centro: Lawrence Livermore National Laboratory, University of California, USA.

### Gestión universitaria

-Secretaria Docente del Departamento de Química Física I de la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense de Madrid desde el 16 de Noviembre de 2010 hasta el 4 de Noviembre de 2014.

-Coordinadora del Máster Universitario de Ciencia y Tecnología Químicas impartido en la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense de Madrid, nombrada en Julio de 2016.

### Habilitación Nacional

Mercedes Taravillo Corralo está habilitada para concurrir a concursos de acceso a cuerpos docentes universitarios:

Cuerpo Docente: Profesores Titulares de Universidad

Área de Conocimiento: Química Física

Fecha resolución: 7 de Marzo de 2007

BOE: 17 de Marzo de 2007

### Evaluación de la Agencia Nacional de la Evaluación de la Calidad y Acreditación

Evaluación positiva de su actividad docente e investigadora a los efectos de que pueda ser contratado como Profesor Contratado Doctor, con referencia PCD 2004-4294, el 27 de Septiembre de 2004.

### Reconocimiento trienios

Cuatro trienios reconocidos desde Enero 2011

### Reconocimiento quinquenios

Tres quinquenios docentes reconocidos

### Reconocimiento sexenios

Tres tramos de investigación reconocidos (1994-1999, 2000-2005, 2006-2011) por la CNEAI

### Cursos Impartidos

---

**Título:** Propiedades Termofísicas de Gases, Líquidos y Sólidos: Determinación, Tratamiento y Aplicaciones

**Duración:** 105 horas

**Fecha:** 19 de Septiembre al 25 de Octubre de 1996

**Organizador:** Fundación General de la Universidad Complutense de Madrid, Fondo Social Europeo, C.A.M.

**Lugar de Celebración:** Fundación General de la Universidad Complutense de Madrid

---

---

**Título:** La Espectroscopía Raman en Gemología y áreas afines

**Curso:** Espectroscopía Raman: Ciencia del Futuro para el Presente

**Duración:** 30 horas

**Fecha:** 11-15 de Julio de 2011

**Organizador:** Cursos de Verano 2011 de la UCM, Fundación General de la Universidad Complutense de Madrid

**Lugar de Celebración:** El Escorial, Universidad Complutense de Madrid

---

## Cursos Organizados

**Título del Curso:** Las Técnicas Espectroscópicas en la Exploración Robótica del Sistema Solar

**Responsable de:** Secretaria del curso de verano

**Duración:** 30 horas

**Fecha:** 27 Junio-1 de Julio de 2016

**Organizador:** Cursos de Verano 2016 de la UCM, Fundación General de la Universidad Complutense de Madrid

**Lugar de Celebración:** El Escorial, Universidad Complutense de Madrid

## Seminarios Impartidos

- "Propiedades Termofísicas de Líquidos y Sólidos". M. Taravillo. Ciclo de Seminarios de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Vigo (Campus de Orense). Enero de 2010.

- "Presión en la Nanoescala. Aplicación a nanotubos de carbono, fullerenos y grafeno". M. Taravillo. VI Escuela de Altas Presiones, Cursos de Extensión Universitaria de la Universidad de Oviedo, Oviedo, 20-24 Mayo 2013.

## Trabajos de Investigación Dirigidos

### Tesis Doctorales en Curso

Título	Doctorando	Directores	Universidad	Inicio	Defensa Prevista
Aplicaciones de Modelos de Constante de Fuerza Universales	Álvaro Lobato Fernández	Valentín García Baña y Mercedes Taravillo Corralo	Complutense de Madrid	2013	2018

### Trabajos de Investigación para el Trabajo de Fin de Máster

Título	Doctorando	Directores	Máster	Defensa
Compresibilidad de Materiales	Miriam Peña Álvarez	Mercedes Taravillo Corralo y Elena del Corro García	Máster en Ciencia y Tecnología Químicas, UCM	30 de Junio de 2011
From Molecules to Bulk: An Interaction Potential Approach	Álvaro Lobato Fernández	Valentín García Baña y Mercedes Taravillo Corralo	Máster en Ciencia y Tecnología Químicas, UCM	Julio de 2013
Espectroscopía Raman en sistemas acuosos de interés en procesos geoquímicos	Alba San José Méndez	Valentín García Baña y Mercedes Taravillo	Máster en Ciencia y Tecnología Químicas, UCM	Julio de 2014
Estudio de Nanocuernos de Carbono mediante Espectroscopía Raman y Efectos de su Funcionalización	Isabel Povedano Fuentes	Mercedes Taravillo y Valentín García Baña	Máster en Nanociencia y Nanotecnología Molecular UCLM	Junio de 2015

### Trabajos de Investigación para el Diploma de Estudios Avanzados (DEA)

Título	Doctorando	Directores	Universidad	Fecha	Calificación
<i>Caracterización Raman de nanotubos de carbono de doble pared bajo presión uniaxial</i>	Elena del Corro García	Mercedes Taravillo Valentín García Baña	Complutense de Madrid	06/2007	Apto
<i>Determinación de la Concentración Micelar Crítica a altas presiones</i>	Eduardo Hidalgo Baltasar	Mercedes Taravillo Berengere Guignon	Complutense de Madrid	06/2010	Apto

### Trabajos de Investigación del programa de Doctorado de Química Avanzada

Título	Doctorando	Directores	Universidad	Fecha	Calificación
<i>Estudio del Grafito bajo presión uniaxial</i>	Óscar Rodríguez Montoro	Mercedes Taravillo Valentín García Baña	Complutense de Madrid	07/2010	Apto
<i>Estudio Computacional de los Polimorfos de Alta Presión del TiO<sub>2</sub> y del TiOF</i>	Ángel Morales García	Elena Arroyo y de Dompablo Mercedes Taravillo	Complutense de Madrid	07/2010	Apto

### Tesinas de Licenciatura

Título	Licenciado	Director/es	Universidad	Fecha	Calificación
<i>Termodinámica de Líquidos Asociados en las Inmediaciones de la Curva de Solidificación</i>	Fco. Javier Pérez Tejedor	Valentín García Baonza Mercedes Taravillo	Complutense de Madrid	12/97	Notable
<i>Estudio del Diagrama de Fases de la Ciclohexanona a Alta Presión Mediante Espectroscopía Raman</i>	Olga Rodríguez Jiménez	Valentín García Baonza Mercedes Taravillo	Complutense de Madrid	12/99	Sobresaliente

### Proyectos de Licenciatura

Título	Licenciado	Director/es	Universidad	Fecha	Calificación
<i>Propiedades ópticas de gases, líquidos y sólidos a altas presiones</i>	Cristina Riva Castellanos	Mercedes Taravillo	Complutense de Madrid	06/2004	Sobresaliente
<i>Propiedades Ópticas de Sólidos a Alta Temperatura</i>	Víctor Ruíz Solares	Valentín García Baonza y Mercedes Taravillo	Complutense de Madrid	Julio 2011	Matrícula de Honor
<i>Espectroscopía Raman de compuestos de interés en restauración</i>	Alberto Cubo Contreras	Mercedes Cáceres y Mercedes Taravillo	Complutense de Madrid	Julio 2011	Sobresaliente
<i>Espectroscopía Raman en sistemas de interés Tecnológico</i>	Adrián Bouzas Muñoz	Valentín García Baonza y Mercedes Taravillo	Complutense de Madrid	Julio 2013	Sobresaliente
<i>Espectroscopía Raman en sistemas acuosos de interés en procesos geoquímicos</i>	Alba San José Méndez	Valentín García Baonza y Mercedes Taravillo	Complutense de Madrid	Septiembre 2013	Sobresaliente

### Trabajos Fin de Grado

Título	Graduado	Director/es	Universidad	Fecha	Calificación
<i>Ácidos grasos procesados a alta presión: Ácido Linoleico y Eláidico</i>	Isabel Povedano Fuentes	Mercedes Taravillo y Valentín García Baonza	Complutense de Madrid	Julio 2013	Sobresaliente
<i>Espectroscopía Raman de Calcogenuros de Metales de Transición</i>	Irene Barba Nieto	Mercedes Taravillo y Javier Sánchez Benítez	Complutense de Madrid	Septiembre 2017	Notable



**Comisión Interministerial de Ciencia y  
Tecnología**

---

## **Curriculum vitae**

Nombre: Manuel Yáñez Montero

Fecha: 23/03/2010

Research ID : A-7100-2012

***Plan Nacional de I+D+I***

Apellidos: Yáñez Montero  
DNI:

Fecha de nacimiento : / /

Nombre: Manuel  
Sexo: V

---

### Situación profesional actual

Organismo: Universidad Autónoma de Madrid

Facultad, Escuela o Instituto: Ciencias

Depto./Secc./Unidad estr.: Química

Dirección postal: Departamento de Química, C-9. Universidad Autónoma de Madrid. Cantoblanco. 28049-Madrid

Teléfono (indicar prefijo, número y extensión): 91-397-4953

Fax: 91-396-5238

Correo electrónico: manuel.yanez@uam.es

Especialización (Códigos UNESCO): 2307-2210

Catedrático de Universidad

Fecha de inicio: 1983

Situación administrativa

Plantilla

Contratado

Interino

Becario

Otras situaciones especificar:

Dedicación

A tiempo completo

A tiempo parcial

---

### Líneas de investigación

Breve descripción, por medio de palabras claves, de la especialización y líneas de investigación actuales.

Nuevos Materiales Moleculares.Reactividad Intrínseca . Química Iónica en fase gas. Enlaces de Hidrógeno.

---

### Formación Académica

Titulación Superior	Centro	Fecha
Licenciado en Ciencias Químicas	Univ. Santiago de Compostela	1970
Grado de Licenciado en C. Químicas	Univ. Santiago de Compostela	1971

Doctorado	Centro	Fecha
Ciencias Químicas	Universidad Autónoma de Madrid	1973



**Actividades anteriores de carácter científico profesional**

---

Puesto	Institución	Fechas
Becaria de FPI	Universidad Autónoma de Madrid	1971-73
Postdoctoral Res. Asociated	Carnegie-Mellon University	1974-76
Prof. Adjunto Interino	Universidad Autónoma de Madrid	1976-77
Prof. Adjunto Numerario	Universidad Autónoma de Madrid	1978-80
Prof. Agregado de Universidad	Universidad Autónoma de Madrid	1980-83

---

**Idiomas (R = regular, B = bien, C = correctamente)**

Idioma	Habla	Lee	Escribe
Inglés	C	C	C
Francés	C	C	B
Gallego	C	C	B
Portugués	B	C	B

**.- Coordinador General** del “**European Master on Theoretical Chemistry and Computational Modelling**” proyecto Europeo que involucra a 47 Universidades Europeas de 8 países distintos. Este master ha recibido el EUROLABEL de la European Chemistry Thematic Network (C.N. EM0701). En estos momentos este es un master **ERASMUS MUNDUS 2009-2013**. Por lo tanto la UAM es la Institución coordinadora del mismo.

Coordinador de la ITN European Joint Doctorate on Theoretical Chemistry and Computational Modelling. TCCM European Commission. Research Executive Agency. **MSCA-ITN-EJD**. SEP-210137947

Con fecha 29 de abril de 2015 el Profesor Yáñez ha sido nombrado **Académico Correspondiente Nacional de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales**.

## **Conferencias Invitadas** (sin ser en Congresos)

Laboratoire des Collisions Atomiques (Burdeos, Francia)...	Octubre 1986
Universidade de Lisboa (Portugal).....	Noviembre 1995
Universidad de Oviedo.....	Abril 1996
Universidad de Santiago de Compostela.....	Octubre 1996
Université Pierre et Marie Curie (Paris, Francia).....	Noviembre 1996. Mayo 2004 Mayo 2009 Marzo 2012 Abril 2016
Université Paris-Saclay (Paris, Francia)	Abril 2016
Universidad de Valladolid.....	Mayo 1997 Mayo 2002 Julio 2010 Abril 2013
Université Cadi-Ayyad (Marrakech, Marruecos).....	Abril 1997
Instituto Rocasolano, CSIC (Madrid).....	Mayo 1997
Université Sophia Antipolis (Niza, Francia).....	Septiembre 1997
Universidad del País Vasco (San Sebastián).....	Marzo 1998
Université de Rennes (Francia).....	Mayo 1998 Abril 2002 Mayo 2006 Mayo 2009 Junio 2010

	Marzo 2012
Frei Universität (Berlin, Alemania).....	Mayo 1999 Marzo 2004
Universidad Rovira i Virgili (Tarragona).....	Junio 2000
Universidad Complutense de Madrid.....	Marzo 2003
University of Sydney (Australia).....	Mayo 2003
Université d'Evry val d'Essonne (Francia).....	Mayo 2004 Junio 2006 Mayo 2009 Marzo 2012 Abril 2016
Technischen Universität (Berlin, Alemania).....	Marzo 2004
Université de Nancy (Francia).....	Abril 2004 Mayo 2009
Université d'Estrasburgh (Francia).....	Mayo 2004
Université de Montpellier (Francia).....	Septiembre 2005
Purdue University (Indianápolis, USA).....	Octubre 2005
Pontifia Universidad Catolica de Chile (Chile).....	Enero 2007 Enero 2008 Enero 2010 Abril 2013
Università di Palermo (Italia).....	Abril 2007
Université Cäen (Francia).....	Junio 2010
Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Madrid..	Noviembre 2011.
Université de Lorraine at Nancy (Francia).....	Abril 2012
University of Dalhousie, Halifax (Canada).....	Mayo 2012
Université Paul Sabatier, Toulouse (Francia).....	Septiembre 2012

**PARTICIPACION EN PROYECTOS DE INVESTIGACION FINANCIADOS EN LOS  
ULTIMOS 10 AÑOS -**

---

TITULO DEL PROYECTO: Mecanismo de Acción de Fármacos.  
ENTIDAD FINANCIADORA: C. A. M. Equipamiento para la Investigación.  
DURACION DESDE: 1992 HASTA: 1994  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: Cationización de Compuestos Bifuncionales. Modelización de Modificaciones Estructurales de las Bases del ADN y de Aminoácidos.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGYCIT Acción Integrada Hispano-Francesa no. 102 B.  
DURACION DESDE: 1994 HASTA: 1995  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: O. Mó

---

TITULO DEL PROYECTO: Estudio teórico-experimental de procesos de fragmentación iónica del ácido acidoacético y del 2-bromo-butano e isoclorobutano.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGYCIT Acción Integrada Hispano-Potuguesa no. 31 B.  
DURACION DESDE: 1994 HASTA: 1995  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: Clusters y Reactividad Iónica en Fase Gas.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGYCIT PB93-0289-C02  
DURACION DESDE: 1994 HASTA:  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL ACCION: Gestión de Red Internet del Departamento de Química.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGYCIT APC95-0048  
DURACION DESDE: 1995 HASTA: 1996  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: Activación en fase Gaseosa de Amino Acidos por cationes metálicos. Estudio Teórico y Experimental.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGYCIT Acción Integrada Hispano-Francesa no. 57 B  
DURACION DESDE: 1996 HASTA: 1997  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL ACCION: Reactividad Intrínseca de Lactamas y Lactonas Saturadas e Insaturadas  
ENTIDAD FINANCIADORA: CAM -Plan Regional de Investigación, Acciones Especiales Po. no. AE00192/95  
DURACION DESDE: 1996 HASTA: 1997  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: Aspectos Teóricos y Experimentales de la Química Física Actual.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGYCIT Ayudas para Programas de Doctorado de Calidad  
DURACION DESDE: 1996 HASTA: 1997  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: Computational Study of the Role of Halogen Ions in Ozone Depletion  
ENTIDAD FINANCIADORA: Instituto de Estudios Avanzados de la NATO  
DURACION DESDE: 1996 HASTA: 1998  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: I. Cooper

---

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad iónica intrínseca, sistemas de interés en química de la atmósfera y clusters  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGES (Dirección General de Enseñanza Superior). PB96-0067  
DURACION DESDE: 1997 HASTA: 2000  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: Protección de la red informática del departamento de Química  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGES (Dirección General de Enseñanza Superior). APC1997-0152  
DURACION DESDE: 1997 HASTA: 1998  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: Complexation of metal cations by hydroxycarboxylic acids: experimental and theoretical study  
ENTIDAD FINANCIADORA: Instituto de Estudios Avanzados de la NATO  
DURACION DESDE: 1998 HASTA: 1999  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: J. Tortajada.

---

TITULO DEL PROYECTO: Determinación experimental de la acidez y basicidad en fase gaseosa de sistemas insaturados heteroatómicos por espectrometría de masas de resonancia ciclotrónica de iones (ICR) y modelización mediante cálculos ab initio.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGES Acción Integrada Hispano-Francesa HF1998-0016  
DURACION DESDE: 1999 HASTA: 2000  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: Química Iónica en Fase Gas  
ENTIDAD FINANCIADORA: Agencia Española de Cooperación Internacional. Programa de Cooperación Interuniversitaria España-Marruecos.  
DURACION DESDE: 1998 HASTA: 1999  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Workshop on Computational Chemistry.  
ENTIDAD FINANCIADORA: M.E.C. DGES (CO97-0061)  
DURACION DESDE: 1998 HASTA: 1998  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Workshop on Computational Chemistry.  
ENTIDAD FINANCIADORA: Comunidad de Madrid. Dirección General de Investigación.  
DURACION DESDE: 1998 HASTA: 1998  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: International Symposium of Physical Organic Chemistry.  
ENTIDAD FINANCIADORA: MEC DGES (CO99-0040).  
DURACION DESDE: 1999 HASTA: 1999  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Determinación experimental de la acidez y basicidad en fase gaseosa de sistemas insaturados heteroatómicos por espectrometría de masas de resonancia ciclotrónica de iones (ICR) y modelización mediante cálculos ab initio.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGES Acción Integrada Hispano-Francesa HF2000-0040

DURACION DESDE: 2000 HASTA: 2002  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: Profesores Visitantes Iberdrola.  
ENTIDAD FINANCIADORA: Fundación Iberdrola.  
DURACION DESDE: 1999 HASTA: 2002  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez .

---

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad de Acidos hidroxycarboxilicos con cationes metálicos. Estudio Teórico y experimental de la formación, solvatación y reactividad de las especies organometálicas formadas.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- Acción Integrada Hispano-Frances HF 1999-0015.  
DURACION DESDE: 2000 HASTA: 2002  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: O. Mó.

---

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad iónica y clusters. Aplicaciones bioquímicas y medioambientales.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MCYT BQU2000-0245  
DURACION DESDE: 2000 HASTA: 2003  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Complejación en fase gaseosa de ácidos ribonucleicos y desoxirribonucleicos con cationes  $Pb^{2+}$  en presencia de  $Mg^{2+}$ . Estudio teórico y experimental  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGI-McyT Acción Integrada Hispano-Frances HF 2001-0042.  
DURACION DESDE: 2002 HASTA: 2004  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Red de excelencia en Química Teórica y Computacional.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MCYT BQU2001-5037-E  
DURACION DESDE: 2002 HASTA: 2003  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Intrinsic Reactivity of New Molecular Materials.  
ENTIDAD FINANCIADORA: Cost Action D26 /0014/03  
DURACION DESDE: 2003 HASTA: 2007  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad intrínseca de Nuevos Materiales Moleculares.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MCYT BQU2003-00894  
DURACION DESDE: 2003 HASTA: 2006  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Estructura y Dinámica en Procesos de Reactividad Química.  
ENTIDAD FINANCIADORA: Proyectos de Investigación UAM-Grupo Santander Para la Cooperación con América Latina.  
DURACION DESDE: 1-1-2006 HASTA: 31-12-2007  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Florentino Borondo Rodríguez

---

TITULO DEL PROYECTO: Materiales Foto- y Electroactivos para Celulas Solares Orgánicas e Híbridas. (MADRISOLAR)  
ENTIDAD FINANCIADORA: Dirección General de Universidades e Investigación. Consejería de Educación. CAM.

P-PPQ-000225-0505.

DURACION DESDE: 2006 HASTA: 2010

INVESTIGADOR PRINCIPAL: N. Martín.

---

TITULO DEL PROYECTO: Modelización de Materiales Moleculares y Nanoestructuras.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MEC CTQ2006-08558

DURACION DESDE: 2006 HASTA: 2009

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: International Seminar in Theoretical Chemistry and Computational Modelling.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MEC CTQ2006-28324-E

DURACION DESDE: 2007 HASTA:

INVESTIGADOR PRINCIPAL: O. Mó.

---

TITULO DEL PROYECTO: CONSOLIDER on Molecular Nanoscience.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MEC CSD 2007-00010

DURACION DESDE: 2007 HASTA: 2011

COORDINADOR: E. Coronado.

---

TITULO DEL PROYECTO: Clusters as building blocks in nanotechnology.

ENTIDAD FINANCIADORA: Acción Integrada Hispano-Francesa HF2007-0067

DURACION DESDE: 2007 HASTA: 2009

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Alcamí

---

-TITULO DEL PROYECTO: Chemistry with Ultrashort Pulses and Free-Electron Lasers: Looking for Control Strategies Through <sup>3</sup>Exact<sup>2</sup> Computations. COST action CM0702.

ENTIDAD FINANCIADORA: European Science Foundation

DURACION DESDE: 2008 HASTA: 2012

INVESTIGADOR PRINCIPAL: F. Martín

---

TITULO DEL PROYECTO: Dinámica de moléculas y clusters en fase gas y superficies.

ENTIDAD FINANCIADORA: Centro Estudios de America Latina de la UAM (CEAL-UAM) y Banco de Santander

DURACION DESDE: 2009 HASTA: 2010

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Alcamí

---

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad en fase gas. Nuevos materiales moleculares y discriminación quiral.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGPTC- MICINN CTQ2009-13129-C02-01

DURACION DESDE: 2009 HASTA: 2012

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Materiales Foto- y Electroactivos para Celulas Solares Orgánicas e Híbridas. (MADRISOLAR2)

ENTIDAD FINANCIADORA: Dirección General de Universidades e Investigación. Consejería de Educación. CAM. S2009PPQ-1533.

DURACION DESDE: 2010 HASTA: 2014

INVESTIGADOR PRINCIPAL: N. Martín.

---

TITULO DEL PROYECTO: WATOC-2011. Nith triennial Congress of the World Association of the Theoretical and Computational Chemist.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGPTC- MICINN CTQ2010-09769-E  
DURACION DESDE: 2010 HASTA: 2011  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Interacciones no-covalentes y Quiralidad en Nuevos Materiales  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGICT CTQ2012-35513-C02-01  
DURACION DESDE: 2013 HASTA: 2016  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: ERASMUS MUNDUS “European Joint Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling (TCCM)”  
ENTIDAD FINANCIADORA: European Commission. EACEA. Ref. EMMC FPA 2010-0147  
DURACION DESDE: 2010 HASTA: 2019  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

---

TITULO DEL PROYECTO: XUV/X-ray Light and Fast ions for ultrafast chemistry. XLIC  
ENTIDAD FINANCIADORA: European Science Foundation. COST Action CM 1204  
DURACION DESDE: 2012 HASTA: 2016  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Alcamí

---

TITULO DEL PROYECTO: Theoretical Chemistry and Computational Modelling. TCCM  
ENTIDAD FINANCIADORA: European Commission. Research Executive Agency. **MSCA-ITN-EJD**. SEP-210137947  
DURACION DESDE: 2015 HASTA: 2019  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

---

TITULO DEL PROYECTO: Materiales Avanzados de Carbono para Fotovoltaica Molecular (FOTOCARBON)  
ENTIDAD FINANCIADORA: Dirección General de Universidades e Investigación. Consejería de Educación. CAM. S2013/MIT-2841.  
DURACION DESDE: 2014 HASTA: 2018  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: N. Martín.

---

TITULO DEL PROYECTO: Modificación de la Reactividad y Diseño de Nuevos Materiales mediante Enlaces de Berilio y otras Interacciones No-Covalentes.  
ENTIDAD FINANCIADORA: DGICT CTQ2015-63997-C2-1-P  
DURACION DESDE: 2016 HASTA: 2019  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.



## PUBLICACIONES

---

1. AUTORES: M. Yáñez y J.I. Fernández Alonso.  
TITULO: *Contribución al estudio teórico de la reactividad química por el método de Klopman.*  
REF. REVISTA: *Afinidad* **38**, 1123 (1971). CLAVE=A
2. AUTORES: M. Yáñez, A. Macías and J.I. Fernández-Alonso.  
TITULO: *Study of the influence of the attacking-ion on the reactivity of conjugated systems.*  
REF. REVISTA: *Chem. Phys. Lett.*, **17**, 63 (1972). CLAVE=A
3. AUTORES: M. Yáñez and J.I. Fernández Alonso.  
TITULO: *Study of the influence of attacking-ions and dipoles on the reactivity of conjugated systems.*  
REF. REVISTA: *Chemical and Biochemical Reactivity*, **VI**, 431 (1974). CLAVE=A
4. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J.I. Fernández Alonso.  
TITULO: *Theoretical study of charge-transfer complexes.*  
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem.*, **79**, 137 (1975). CLAVE=A
5. AUTORES: M. Yáñez, O. Mó and J.I. Fernández Alonso.  
TITULO: *A theoretical study of the electrophilic substitution on aminophenols and aminobenzenethiols.*  
REF. REVISTA: *Tetrahedron*, **31**, 245 (1977). CLAVE=A
6. AUTORES: J. Catalán, A. Macías, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Calculations on the inversion of anhydrous and hydrated aziridine.*  
REF. REVISTA: *Mol. Phys.*, **34**, 1429 (1977). CLAVE=A
7. AUTORES: O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Influence of polarization functions on molecular electrostatic potentials.*  
REF. REVISTA: *Theoret. Chim. Acta*, **47**, 263 (1978). CLAVE=A
8. AUTORES: J. Catalán, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Theoretical study of the structure of azetidene.*  
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.* **43**, 251 (1978). CLAVE=A
9. AUTORES: J. Catalán and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study of proton addition to oxirane, aziridine and 2-azirene.*  
REF. REVISTA: *J. Am. Chem. Soc.*, **100**, 1398 (1978). CLAVE=A
10. AUTORES: M. Yáñez, R.F. Stewart and J.A. Pople.  
TITULO: *The projection of molecular charge density into spherical atoms. I. Density basis functions for first row atoms.*  
REF. REVISTA: *Acta Cryst.* **A34**, 641 (1978). CLAVE=A
11. AUTORES: M. Yáñez and R.F. Stewart.  
TITULO: *The projection of molecular charge density into spherical atoms. II. An Application to X-Ray Diffraction Data.*  
REF. REVISTA: *Acta Cryst.* **A34**, 648 (1978). CLAVE=A

12. AUTORES: V. López, A. Macías, R.D. Piacentini, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Molecular treatment of elastic and double charge-exchange He<sup>2+</sup>-He collisions.*  
REF. REVISTA: J. Phys. B, Atom. Molec. Phys., **11**, 2889 (1978). CLAVE=A
13. AUTORES: J. Catalán, M. Yáñez and J.I. Fernández Alonso.  
TITULO: *A theoretical study of hydrogen bonding in malonaldehyde.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc., **100**, 6917 (1978). CLAVE=A
14. AUTORES: J. Catalán and M. Yáñez.  
TITULO: *Correlation between ring-proton affinities and C<sub>1s</sub> binding energies. Application to Monosubstituted benzenes.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett., **60**, 499 (1979). CLAVE=A
15. AUTORES: J. Catalán and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation and Proton Affinities of monosubstituted benzenes. A theoretical study.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Soc. Perkin Trans. II, 741 (1979). CLAVE=A
16. AUTORES: J. Catalán and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation and proton affinity of anisole. A theoretical study.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc., **101**, 3490 (1979). CLAVE=A
17. AUTORES: J. Catalán and M. Yáñez.  
TITULO: *Prediction of proton affinities and preferred protonation sites in benzene derivatives, from 1s Orbital energies.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Soc. Perkin Trans. II, 1627 (1979) CLAVE=A
18. AUTORES: O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Structure and charge distribution of some alkynoyl cations. A theoretical study.*  
REF. REVISTA: Theoret. Chim. Acta, **53**, 337, (1979). CLAVE=A
19. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *Proton affinities and preferred protonation sites in 3- and 4- substituted pyridines. Prediction from 1s orbital energies.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **101**, 6520 (1979). CLAVE=A
20. AUTORES: M. Dorado, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study of the structure and charge distribution of some alkynylcarbenium ions.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc., **102**, 947 (1980) CLAVE=A
21. AUTORES: J. Catalán and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study of the protonation of benzamide.*  
REF. REVISTA: Tetrahedron, **36**, 665 (1980). CLAVE=A
22. AUTORES: J. Catalán, F. Escudero, J. Laso, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *The effect of substituents on the structure of dioxirane.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct., **69**, 217 (1980). CLAVE=A
23. AUTORES: A. Macías, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Molecular treatment of the He<sup>+</sup> + H collisions.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev., **A23**, 2941 (1981). CLAVE=A

24. AUTORES: F. Escudero and M. Yáñez.  
 TITULO: *Atoms in molecules. Density basis functions for second row atoms.*  
 REF. REVISTA: Mol. Phys., **45**, 617 (1982). CLAVE=A
25. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
 TITULO: *Prediction of proton affinities and protonation sites using a multivariate linear correlation.*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Soc. Perkin Trans. II, 1409 (1982). CLAVE=A
26. AUTORES: J. Catalán, P. Pérez and M. Yáñez.  
 TITULO: *A theoretical study of the protonation of methylindole derivatives.*  
 REF. REVISTA: Tetrahedron, **38**, 3693 (1982). CLAVE=A
27. AUTORES: A. Macías, A. Riera and M. Yáñez.  
 TITULO: *Molecular states of HeH<sup>+</sup>. Energies and dynamical couplings.*  
 REF. REVISTA: Phys. Rev., **A27**, 206 (1983). CLAVE=A
28. AUTORES: A. Macías, A. Riera and M. Yáñez.  
 TITULO: *Excitation and charge transfer in He<sup>+</sup> - H collisions. A study of the origin dependence of calculated cross sections.*  
 REF. REVISTA: Phys. Rev., **A27**, 213 (1983). CLAVE=A
29. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
 TITULO: *A theoretical study of the structure, charge distribution and gas-phase basicity of 1H-indazole and its N-methyl derivatives.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct., **94**, 143 (1983). CLAVE=A
30. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
 TITULO: *A theoretical study of the structure, charge distribution and gas-phase basicity of azaindoles.*  
 REF. REVISTA: Tetrahedron, **39**, 2851 (1983). CLAVE=A
31. AUTORES: F. Escudero, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *A theoretical study of the charge distribution of aminopyridines, aminopyrimidines and some Diazine N-oxides.*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Soc. Perkin Trans. II, 1735 (1983). CLAVE=A
32. AUTORES: J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
 TITULO: *Ring functions, as polarization functions, for ab initio calculations of small rings. Dioxirane.*  
 REF. REVISTA: Theoret. Chim. Acta, **64**, 57 (1983). CLAVE=A
33. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
 TITULO: *Theoretical study on the stable conformers of 1,3-diazetidina.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM, **106**, 251 (1984). CLAVE=A
34. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
 TITULO: *Conformation of four-membered rings. Comparison between azetidina and 1,3-diazetidina.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM, **107**, 269 (1984). CLAVE=A
35. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.  
 TITULO: *Influence of the tautomeric forms of azaindoles on their basicity in solution.*

- REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM, **107**, 263 (1984). CLAVE=A
36. AUTORES: J. Catalán, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Very strong bases. A theoretical determination of their gas-phase proton-affinities.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **107**, 257 (1984). CLAVE=A
37. AUTORES: J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *On the use of bond functions, as polarization functions, in ab initio calculations.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **107**, 59 (1984). CLAVE=A
38. AUTORES: A. Macías, R. Mendizábal, F. Pelayo, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *A stabilization treatment of an infinitely excited quasimolecule. LiHe<sup>3+</sup>.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **107**, 245 (1984). CLAVE=A
39. AUTORES: J. Catalán and M. Yáñez.  
TITULO: *Alfa vs. beta protonation of pyrrole and indole.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc., **106**, 421 (1984). CLAVE=A
40. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez, M. Yáñez and F. Amat-Guerri.  
TITULO: *Comparative study of the structure and properties of 1-methyl-7-azaindole and 7-methyl-7H-pyrrolo(2,3-b) pyridine, in their ground states.*  
REF. REVISTA: Nouv. J. Chim., **8**, 87 (1984). CLAVE=A
41. AUTORES: J. Catalán, J.L.G. de Paz, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *The problem of the relationship between proton affinity (intrinsic basicity) and the charge on the basic centre.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **108**, 161 (1984). CLAVE=A
42. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, J.L.G. de Paz, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation of azanaphthalenes, azaindoles and purine bases. The "lone-pair charge" approach.*  
REF. REVISTA: Nucleic Acid Symposium Series, **14**, 105 (1984). CLAVE=A
43. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, J.L.G. de Paz, P. Pérez and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study on the tautomer preference for 4(5)-substituted imidazoles.*  
REF. REVISTA: Nucleic Acid Symposium Series, **14**, 161 (1984). CLAVE=A
44. AUTORES: J. Catalán, J.L.G. de Paz, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *The Azoles. A theoretical study.*  
REF. REVISTA: Chemica Scripta, **24**, 84 (1984). CLAVE=A
45. AUTORES: J. Catalán, J.L.G. de Paz, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *The relationship between substituent-induced energy and charge effects in proton transfer equilibria involving heteroaromatic nitrogen systems. The "lone-pair charge" approach.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc., **106**, 6552 (1984). CLAVE=A
46. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, J.L.G. de Paz, P. Pérez, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *Basicity of azoles. Part 6. Calculated intrinsic basicities for methyl-substituted pyrazoles and imidazoles. Comparison to aqueous solution data: N-methylation effect.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem., **49**, 4379 (1984). CLAVE=A

47. AUTORES: F. Escudero, O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Structure and charge distribution of 4-substituted benzenediazonium ions.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **120**, 377 (1985). CLAVE=A
48. AUTORES: O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Calculation of radial couplings in the model potential and pseudopotential approaches. The NaH quasimolecule.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev., **A31**, 3977 (1985). CLAVE=A
49. AUTORES: L.F. Errea, L. Méndez, A. Riera, M. Yáñez, J. Hanssen, C. Harel and A. Salin.  
TITULO: *The  $LiH^{2+}$  quasimolecule. A comparison between the configuration interaction and the OEDM approaches.*  
REF. REVISTA: J. Physique, **46**, 709 (1985). CLAVE=A
50. AUTORES: L.F. Errea, L. Méndez, A. Riera, M. Yáñez, J. Hanssen, C. Harel and A. Salin.  
TITULO: *Charge exchange in  $Li^{2+}(1s) + H(1s)$  collisions. A molecular approach including two-electron translation factors.*  
REF. REVISTA: J. Physique, **46**, 719 (1985). CLAVE=A
51. AUTORES: F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Calcul de sections de choc entre particules lourdes avec des fonctions d'onde moléculaires obtenues par la méthode de Feshbach.*  
"11<sup>eme</sup> Colloque Col. At. et Elect. Vol. 2 (Conferences)", pag. 68.  
Ed. U.E.R. Sciences Exactes et Naturelles (Metz) (1986). CLAVE=CL
52. AUTORES: A. Macías, R. Mendizábal, F. Pelayo, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Application of the stabilization method to the molecular states of  $LiHe^{3+}$ . Energies and radial couplings.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev., **A33**, 242 (1986). CLAVE=A
53. AUTORES: F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Molecular (Feshbach) treatment of charge exchange  $Li^{3+} + He$  collisions. I. Energies and couplings.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys., **84**, 5412 (1986). CLAVE=A
54. AUTORES: L.F. Errea, F. Martín, L. Méndez, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Molecular (Feshbach) treatment of charge exchange  $Li^{3+} + He$  collisions. II. Cross sections.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys., **84**, 5422 (1986). CLAVE=A
55. AUTORES: J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Polarization effects in small rings containing sulfur. A theoretical study of the structure of thiete.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM, **138**, 311 (1986). CLAVE=A
56. AUTORES: A. del Pozo, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Galilean invariance in the exponential model of atomic collisions.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. **A34**, 3723 (1986). CLAVE=A
57. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz, and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation energies and tautomerism of azoles. Basis set effects.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **90**, 5597 (1986). CLAVE=A

58. AUTORES: F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Single and double charge exchange transfer in  $Be^{4+} + He$  collisions. A molecular (Feshbach) approach.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. A **34**, 4675 (1986) CLAVE=A
59. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz, and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation of azines. An ab initio molecular orbital study.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **150**, 135 (1987). CLAVE=A
60. AUTORES: F. Borondo, F. Martín and M. Yáñez.  
TITULO: *Molecular treatment of the ion-pair formation reaction in  $H(1s) + H(1s)$  collisions.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. A, **35**, 60 (1987). CLAVE=A
61. AUTORES: R. Mendizábal, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Energies and radial couplings for the  $^1S$  and  $^3S$  states of  $NaHe^+$  quasimolecule.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **150**, 345 (1987). CLAVE=A
62. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *Binding of  $NH_4^+$  to azoles in the gas phase. A theoretical study of the  $N...H^+...N$  Ionic hydrogen bond.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem., **52**, 1713 (1987). CLAVE=A
63. AUTORES: F. Borondo, F. Martín and M. Yáñez.  
TITULO: *Adiabatic energies and radial couplings of the  $^3S_u^+$  states of  $H_2$ .*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **86**, 4982 (1987). CLAVE=A
64. AUTORES: F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Feshbach-type calculation of autoionizing states of the  $BeHe^{4+}$  quasimolecule.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys., **86**, 6927 (1987). CLAVE=A
65. AUTORES: M. Attinà, F. Cacace and M. Yáñez.  
TITULO: *Electrophilic aromatic nitration in the gas phase.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **109**, 5092 (1987). CLAVE=A
66. AUTORES: F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Feshbach resonant energies and widths in a pseudopotential approach.*  
REF. REVISTA: Europhys. Lett. **4**, 799 (1987). CLAVE=A
67. AUTORES: F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Feshbach and pseudopotential theories. A useful analogy.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **87**, 6635 (1987). CLAVE=A
68. AUTORES: F. Borondo, F. Martín and M. Yáñez.  
TITULO: *A molecular mechanism for hydrogen-hydrogen excitation collisions.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. A, **36**, 3630 (1987). CLAVE=A
69. AUTORES: A. Macías, F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Simple discretization method for autoionization widths. I. Theory.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. A **36**, 4179 (1987). CLAVE=A

70. AUTORES: A. Macías, F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Simple discretization method for autoionization widths. II. Atoms.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. A **36**, 4187 (1987). CLAVE=A
71. AUTORES: A. Macías, F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Simple discretization method for autoionization widths. III. Molecules.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. A **36**, 4203 (1987). CLAVE=A
72. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation of three membered ring heterocycles. An ab initio molecular orbital study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **91**, 6484 (1987). CLAVE=A
73. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Counterpoise estimates of the BSSE in the evaluation of protonation energies.*  
REF. REVISTA: Theoret. Chim. Acta **73**, 307 (1988). CLAVE=A
74. AUTORES: M. Alcamí, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Study of polarization effects in three-membered ring heterocycles.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **165**, 99 (1988). CLAVE=A
75. AUTORES: A. Macías, F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *A practical solution to the "Unknown normalization" problem.*  
REF. REVISTA: Int. J. Quant. Chem. **XXXIII**, 279 (1988). CLAVE=A
76. AUTORES: J. Catalán, J.L.G. de Paz, M. Yáñez, F. Amat-Guerri, R. Houriet, E. Rolli, R. Zehringer, P. Oelhafen, R.W. Taft, F. Anvia and J.H. Qian.  
TITULO: *Study of the gas-phase basicity of 1-methyl-azaindole, 7-methyl-7H-pyrrolo(2,3-b) pyridine and related compounds.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **110**, 2699 (1988). CLAVE=A
77. AUTORES: F. Martín, A. Riera, M. Yáñez and H. Bachau.  
TITULO: *Comparison of the conventional and pseudopotential Feshbach methods:  $N^{5+}(3l,3l')$   $^1S^e$  and  $^1,3P^o$  resonances.*  
REF. REVISTA: J. Phys. B **21**, 2261 (1988). CLAVE=A
78. AUTORES: F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Energies and widths of ( $1s^23l3l'$ ) resonant states of  $C^{2+}$ ,  $N^{5+}$ ,  $O^{4+}$  and  $N^{6+}$ .*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. A **38**, 1094 (1988). CLAVE=A
79. AUTORES: F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Continuum vs. discretized wavefunctions. The importance of being well normalized.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **149**, 85 (1988). CLAVE=A
80. AUTORES: A. Macías, F. Martín y M. Yáñez.  
TITULO: *El continuo electrónico. Estados resonantes.*  
Capítulo del Libro: "Nuevas Tendencias de la Química Teórica",  
Vol II, pag. 19, Ed. S. Fraga, C.S.I.C (Madrid), 1989. CLAVE=CL

81. AUTORES: M. Yáñez.  
TITULO: *Clusters en fase gaseosa*.  
Capítulo del Libro: "Modelos teóricos e informáticos en la Química actual".  
Ed. A. Riera. Editorial Centro de Estudios Ramón Areces, Madrid (1989).CLAVE=L
82. TITULO: *Ion Chemistry*.  
Editor: M. Yáñez.  
Editorial de la Universidad Autónoma de Madrid. Madrid. (1989). CLAVE=L
83. AUTORES: A. Macías, F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Atomic and molecular autoionizing states. A theoretical approach*.  
REF. REVISTA: J. Physique **50**, C1-37 (1989). CLAVE=A
84. AUTORES: A. Macías, O. Mó, A. Riera, M. Yáñez, H. Bachau, P. Galán and F. Martín.  
TITULO: *Extension of the conventional and pseudopotential Feshbach methods to the study of "two active electrons + core" resonance states. Application to  $C^{2+}$  ( $1s^2 3131'$ ) and  $Ne^{6+}$  ( $1s^2 3131'$ ) systems*.  
REF. REVISTA: J. Physique **50**, C1-99 (1989). CLAVE=A
85. AUTORES: M. Boudjema, P. Moretto-Capelle, A. Bordenave-Montesquieu, P. Benoit-Cattin, A. Gleizes, H. Bachau, P. Galan, F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Double capture into  $1s^2 3131'$  configurations in collisions between He-like ions ( $Z= 7, 8$  and  $10$ ) And helium target at  $10 qKeV, 10^\circ$* .  
REF. REVISTA: J. Phys. B **22**, L121 (1989). CLAVE=A
86. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A molecular orbital study of azole- $Li^+$  complexes*.  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **93**, 3929 (1989). CLAVE=A
87. AUTORES: F. Fernández-Lázaro, J. Mendoza, O. Mó, S. Rodríguez-Morgade, T. Torres, M. Yáñez, and J. Elguero.  
TITULO: *Phtalocyanine analogues. Part I. Synthesis, spectroscopy and theoretical study of 9,20-Dihydro-5,24:12,17-Diimino-7,10:19,22-dinitrilobenz (f,p)[1,2,4,9,11,12,14,19] octaazacycloeicosine and MNDO calculations on its related Hückel heteroannulene*.  
REF. REVISTA: J. Chem. Soc. Perkin 2, 797 (1989). CLAVE=A
88. AUTORES: M. Alcamí, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Nitrogen inversion barriers in three-membered rings. An ab initio molecular orbital study*.  
REF. REVISTA: J. Comput. Chem. **10**, 468 (1989). CLAVE=A
89. AUTORES: F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Core effects in atomic resonances. A comparison between  $1,3P^o$  ( $3131'$ ) states of He-like and Be-like systems*.  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **91**, 376 (1989). CLAVE=A
90. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *A MO analysis of the aromaticity of some nitrogen heterocyclic compounds*.  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **201**, 17 (1989). CLAVE=A
91. AUTORES: A. Macías, F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *A new method to calculate lifetimes of atomic and molecular autoionizing states*.



- REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **202**, 235 (1989). CLAVE=A
92. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz, M. Yáñez, I. Alkorta, J. Elguero, P. Goya and I. Rozas.  
TITULO: *A molecular orbital study of the conformation (inversion and rotational barriers) and electronic properties of sulfamide.*  
REF. REVISTA: Can. J. Chem. **67**, 2227 (1989). CLAVE=A
93. AUTORES: F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *A study of core effects in quasimolecular structure.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **205**, 43 (1990). CLAVE=A
94. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *Enhanced  $Li^+$  binding energies of some azines: a molecular orbital study.*  
REF. REVISTA: Theoret. Chim. Acta **77**, 1,(1990). CLAVE=A
95. AUTORES: J. Elguero, P. Goya, A. Martínez, I. Rozas, O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.  
TITULO: *On the problem of the aromaticity of 1,2,6-Thiadiazine 1,1-Dioxides.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **3**, 470 (1990). CLAVE=A
96. AUTORES: J. Catalán, J.L.G. de Paz, M. Yáñez, R.M. Claramunt, C. López, J. Elguero, F. Anvia, J.H. Quian, M. Taagepera and R.W. Taft.  
TITULO: *An intrinsic basicity scale based on azoles: Theoretical and experimental study of methyldiazoles basicity.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **112**, 1303 (1990). CLAVE=A
97. AUTORES: H. Bachau, P. Galán, F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Resonance parameters and properties of berylliumlike doubly excited states:  $4fZ\zeta 10$ .*  
REF. REVISTA: At. Data and Nuc. Data Tables **44**, 305, (1990). CLAVE=A
98. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, F. Anvia and R.W. Taft.  
TITULO: *An experimental and theoretical study of  $Li^+$  affinities of methyldiazoles.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **94**, 4796, (1990). CLAVE=A
99. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, J.L.M. Abboud and J. Elguero.  
TITULO: *Bond Activation by protonation in the gas phase.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **172**, 471 (1990). CLAVE=A
100. AUTORES: H. Bachau, P. Galán, F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
TITULO: *Comment on "Calculations of energies of intra-shell doubly excited states of beryllium-like ions"*  
REF. REVISTA: J. Phys. B. **23**, L83, (1990). CLAVE=A
101. AUTORES: M. Alcamí, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A topological analysis of the bond activation in  $N_2H_4X^+$  and  $H_2O_2X^+$  ( $X=H, Li, Na, Al$ ) complexes.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Res. **1**, 119, (1990). CLAVE=A
102. TITULO: *Trends In Atomic and Molecular Physics.*  
Editor: M. Yáñez  
Editorial de la Universidad Autónoma de Madrid. (1991) CLAVE=L
103. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez and J.L.M. Abboud.

- TITULO: *Ab initio MO study of the halogen cation basicities of some organic bases.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **4**, 177, (1991). CLAVE=A
104. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Ab initio molecular orbital treatment of hydroxylamine- $X^+$ -water and hydroxylamine- $X^+$ -ammonia ( $X=H, Li$ ) clusters.*  
 REF. REVISTA: Chem. Phys. **151**, 21, (1991). CLAVE=A
105. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *An ab initio molecular orbital study of the structure, energetics and bond activations of  $Al^+$  complexes.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **234**, 357 (1991). CLAVE=A
106. AUTORES: H. Bachau, F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
 TITULO: *Resonance parameters and properties of heliumlike doubly excited states:  $2\ \ell\ Z\ \ell\ 10$ .*  
 REF. REVISTA: Atomic Data and Nuclear Data Tables. **48**, 167, (1991).CLAVE=A
107. AUTORES: F. Martín, H. Bachau, P. Galán, A. Riera and M. Yáñez.  
 TITULO: *Electron correlation properties of doubly excited states. Berylliumlike vs. heliumlike systems.*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **94**, 5011 (1991). CLAVE=A
108. AUTORES: A. Macías, F. Martín, A. Riera and M. Yáñez.  
 TITULO: *Atomic Doubly Excited States.*  
 Capítulo del Libro: "Computational Chemistry: Structure, Interactions and Reactivity.  
 Editor: S. Fraga, Ed. Elsevier, Amsterdam, 1992. CLAVE=CL
109. AUTORES: O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *A theoretical approach to ion-molecule interactions in the gas-phase.*  
 Capítulo del Libro: "Trends in Physical Chemistry". Vol. 3, 81 (1992) CLAVE=CL
110. AUTORES: J.L.M. Abboud, M. Yáñez, J. Elguero, D. Liotard, M. Esseffar, M. El-Mouhtadi and R.W. Taft.  
 TITULO: *A comparative study of lithium cation affinities of alcohols and ethers and proton affinities of Lithium alkoxides.*  
 REF. REVISTA: New J. Chem. **16**, 739 (1992). CLAVE=A
111. AUTORES: M. Esseffar, M. El-Mouhtadi, V. López and M. Yáñez.  
 TITULO: *A topological analysis of bond activations in alcohols and fluoroalkanes by protonation in the gas phase.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **255**, 393 (1992). CLAVE=A
112. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Enhanced  $Al^+$  binding energies of some azoles. A theoretical study of azole- $X^+$  ( $X=Na, K, Al$ ) complexes.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **96**, 3022 (1992). CLAVE=A
113. AUTORES: J.L.M. Abboud, T. Cañada, H. Homán, R. Notario, C. Cativiela, M.D. Díaz de Villegas, M.C. Bordejé, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Gas phase basicities of b-Lactams and azetidines. Cyclation effects. An experimental and Theoretical study.*  
 REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc., **114**, 4728, (1992). CLAVE=A

114. AUTORES: A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *A G1 ab initio MO study of the distonic ions  $H_2C-O-Si^+$  and their isomers.*  
 REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett., **197**, 581, (1992). CLAVE=A
115. AUTORES: J. Tortajada, A. Total, J.P. Morizur, M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Experimental and theoretical study of  $C_2H_4OAl^+$  complexes in the gas phase.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem., **96**, 8309, (1992). CLAVE=A
116. AUTORES: A.L. Llamas-Saiz, C. Foces-Foces, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
 TITULO: *Nature of the hydrogen bond: crystallographic vs. theoretical description of the  $O-H...N(sp^2)$  hydrogen bond.*  
 REF. REVISTA: Acta Cryst. **B48**, 700, (1992). CLAVE=A
117. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
 TITULO: *Cooperative (nonpairwise) effects in water trimers: an ab initio molecular orbital study.*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Phys., **97**, 6628 (1992). CLAVE=A
118. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, A. Total, J. Tortajada and J.P. Morizur.  
 TITULO: *Structures and stabilities of  $[C_2H_5NAl]^+$  molecular ions. An ab initio molecular orbital study.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **97**, 5553 (1993) CLAVE=A
119. AUTORES: M.C. Bordejé, O. Mó, M. Yáñez, M. Herreros and J.L.M. Abboud.  
 TITULO: *Cyclization effects on the gas-phase basicities of esters and ethers. An experimental and MO study.*  
 REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **115**, 7389 (1993). CLAVE=A
120. AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *G2 ab initio Calculations on the Thermochemistry of  $[P,N,H_n]$  ( $n=0,2$ ) and  $[P,N,H_n]^+$  ( $n=0,3$ ) species and on the potential energy surfaces of  $[P,N,H_3]^+$  singlet and triplet state cations.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **97**, 6607 (1993). CLAVE=A
121. AUTORES: A. Luna and M. Yáñez.  
 TITULO: *Thermochemistry of the Reaction of  $Si^+$  ( $^2P$ ) with methanol. A G2 Molecular Orbital Study.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **97**, 10659 (1993). CLAVE=A
122. AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *High level ab initio calculations on the structures and relative stabilities of  $[O,P,H]$  systems and Their cations.*  
 REF. REVISTA: Chem. Phys. Let. **209**, 557 (1993). CLAVE=A
123. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz, M. Yáñez, M. Esseffar, W. Bouab, E. Ballesteros, M. Herreros, H. Homan, C. Lopez-Mardomingo, R. Notario and J.L.M. Abboud.  
 TITULO: *Thiocarbonyl vs. Carbonyl Compounds: A Comparison of Intrinsic Reactivities.*  
 REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **115**, 12468 (1993) CLAVE=A
124. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Stabilization of nitrogen containing three-membered rings by  $H^+$  and  $Li^+$  association in the gas-phase.*  
 REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **115**, 11074 (1993) CLAVE=A

125. AUTORES: M. Yáñez.  
TITULO: *Visión actual de algunos problemas de contaminación.*  
Capítulo del Libro: "Aspectos Relevantes de la Química Actual". pg.11. Ediciones de la UAM (1993).  
CLAVE=CL
126. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, I. Rozas and J. Elguero  
TITULO: *Structure, Vibrational Frequencies and Thermodynamic Properties of Hydrogen Peroxide Dimers. An Ab Initio Molecular Orbital Study.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **100**, 2871 (1994)  
CLAVE=A
127. AUTORES: A. Tipping, M. V. Roux, M. P. Jiménez, J. Elguero, M. Esseffar, M. Yáñez, E. Ballesteros and J.-L.M. Abboud  
TITULO: *Structure, Basicity and Thermodynamical Properties of 3,5-bis-trifluoromethyl-1,2,4-triazole with regards to 1,2,4-triazole: An Experimental and Theoretical Study.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **59**, 1039 (1994)  
CLAVE=A
128. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, I. Rozas and J. Elguero  
TITULO: *Structure, Vibrational Frequencies and Thermodynamic Properties of Hydrogen Peroxide-Water Dimers. An Ab Initio Molecular Orbital Study.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Let. **219**, 45 (1994)  
CLAVE=A
129. AUTORES: J.-L.G. Abboud, R. Notario, E. Ballesteros, M. Herreros, O. Mó, M. Yáñez, J. Elguero, G.Boyer and R. Claramunt.  
TITULO: *Dissociative Attachment of Protons to 1-Fluoro- and 1-Chloro-Adamantane in the Gas-phase.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **116**, 2486 (1994)  
CLAVE=A
130. AUTORES: A. Martínez, J. Elguero, O.Mó and M. Yáñez  
TITULO: *An ab initio study of the azoniaspiro[2.2]pentane cation (azirineaziridinium ion).*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **115**, 45 (1994)  
CLAVE=A
131. AUTORES: A. Luna, M. Manuel, O.Mó and M. Yáñez  
TITULO: *G2 ab initio Calculations on the  $F^+ + OH_2$  singlet and triplet potential energy surfaces.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **98**, 6980 (1994)  
CLAVE=A
132. AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Thermochemistry of the Reactions of  $P^+(\overset{\rho}{P})$  and  $P^+(\overset{1}{D})$  with Formaldehyde. A G2 Molecular Orbital Study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **98**, 8679 (1994)  
CLAVE=A
133. AUTORES: A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A topological description of  $Si^+$  and  $C^+$  adducts of formaldehyde.*  
REF. REVISTA: Anales de Física **90**, 205 (1994)  
CLAVE=A
134. AUTORES: M.C. Bordejé, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Bond activation of four membered cycles by protonation in the gas phase.*  
REF. REVISTA: Anales de Física **90**, 209 (1994)  
CLAVE=A
135. AUTORES: M. Esseffar, O.Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Is the Depletion of Ozone by HSO an Exothermic Process?.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **101**, 2175 (1994)  
CLAVE=A

136. AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Thermochemistry of the Reactions of  $PH_2^+(\ ^3B_1)$  with CO. A G2 Molecular Orbital Study.*  
 REF. REVISTA: Chem. Phys. Let. **223**, 240 (1994) CLAVE=A
137. AUTORES: A. Luna, O.Mó and M. Yáñez  
 TITULO: *Gas-Phase reactions of  $C^+(\ ^2P)$  and  $Si^+(\ ^2P)$  with oxygen bases. A G2 ab initio molecular orbital study.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **310**, 135 (1994) CLAVE=A
138. AUTORES: O.Mó, M. Yáñez and J. Elguero  
 TITULO: *Cooperative Effects in the Cyclic Trimer of Methanol. An ab initio Molecular Orbital Study.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **314**, 73 (1994) CLAVE=A
139. AUTORES: O.Mó, M. Yáñez, M. Esseffar and J.L.M. Abboud  
 TITULO: *The Topological Analysis of the Electronic Charge Densities as a Tool to Study Protonation effects on Thiocarbonyl Compounds.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **7**, 685 (1994) CLAVE=A
140. AUTORES: J. Tortajada, E. León, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Ab initio calculations on Formamidine- $X^+$  ( $X = H, Li, Na, Mg, \text{ and } Al$ ) complexes.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **98**, 12919 (1994). CLAVE=A
141. AUTORES: A.L. Llamas, C. Foces-Foces, O.Mó, M. Yáñez E. Elguero and J. Elguero  
 TITULO: *The Geometry of Pyrazole: a test for ab initio calculations.*  
 REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **16**, 263 (1995) CLAVE=A
142. AUTORES: S. Blanco, J.C. López, J.L. Alonso, O.Mó, M. Yáñez, N. Jagerovic and J.Elguero.  
 TITULO: *Microwave Spectra and ab initio calculations of 1-Nitropyrazole.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. **344**, 241 (1995) CLAVE=A
143. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M. Eckert-Maksic and Z.B. Maksic.  
 TITULO: *Bent Bonds in Benzocyclopropenes and their fluorinated derivatives.*  
 REF. REVISTA: J. Org. Chem. **60**, 1638 (1995). CLAVE=A
144. AUTORES: O.Mó, M. Yáñez, A.L. Llamas-Saiz, C. Foces-Foces and J. Elguero  
 TITULO: *Ab initio study of the effect of N-substituents on properties of pyrazoles.*  
 REF. REVISTA: Tetrahedron **51**, 7045 (1995) CLAVE=A
145. AUTORES: M. Alcamí, I.L. Cooper, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Potential energy surfaces of the  $C_{2v}$  and  $D_{3h}$  ozone complexes with  $Li^+$ .*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **103**, 253 (1995) CLAVE=A
- 146.- AUTORES: J. Tortajada, E. León, J.P. Morizur, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Potential energy surface of protonated formamide and of formamide- $X^+$  ( $X = Li, Na, Mg, \text{ and } Al$ ) complexes.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **99**, 13890 (1995). CLAVE=A
- 147.- AUTORES: F. Ijjaali, O. Mó, M. Yáñez and J.-L.G. Abboud.  
 TITULO: *Hybridization effects on the intrinsic basicities of phosphorus and nitrogen containing bases.*

- REF. REVISTA: J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **338**, 225 (1995). CLAVE=A
- 148.- AUTORES: G. Bouchoux, D. Drancourt, D. Leblanc, M. Yáñez and O. Mó.  
TITULO: *Gas-phase basicities of lactones*.  
REF. REVISTA: New. J. Chem. **19**, 1243 (1995). CLAVE=A
- 149.- AUTORES: A.I. González and M. Yáñez.  
TITULO: *Energetics of addition versus insertion mechanisms in the  $Si^+(\overset{2}{P}) + HCOOH$  reaction*.  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **248**, 102 (1996). CLAVE=A
150. AUTORES: J.-L.G. Abboud, M. Herreros, R. Notario, M. Esseffar, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *A New Bond from an Old Molecule: Formation, Stability and Structure of  $P_4H^+$* .  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **118**, 1126 (1996) CLAVE=A
- 151 AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *High-level ab initio calculations on  $CH_2^+(\overset{2}{A}_1)$  with  $PO(\overset{2}{P})$  reactions*.  
REF. REVISTA: Int. J. Quant. Chem. **57**, 559 (1996). CLAVE=A
- 152.- AUTORES: A.I. González, O. Mó, M. Yáñez, E. León, J. Tortajada, J.P. Morizur, I. Leito, P.C. Maria and J.F. Gal.  
TITULO: *Basicity of Acetamidine. Experimental and Theoretical Study*.  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **100**, 10490 (1996) CLAVE=A
- 153.- AUTORES: O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The Theory of Atoms in Molecules as a Tool to Investigate the Reactivity of Tetraphosphacubane*  
REF. REVISTA: Canadian Journal of Chem. **74**, 901 (1996) CLAVE=A
154. AUTORES: M. T. Molina, W. Bouab, M. Esseffar, M. Herreros, R. Notario, J.-L.G. Abboud, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *The Intrinsic Acidity and Basicity of 2,2,2-Trifluoroethanethiol. The First Experimental and Theoretical Study*.  
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **61**, 5485 (1996) CLAVE=A
155. AUTORES: J.-L.G. Abboud, M. Herreros, R. Notario, O. Mó, M. Yáñez, M. Regitz and J. Elguero.  
TITULO: *Tetraphosphacubane: An unexpectedly strong base in the gas-phase*.  
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **61**, 7813 (1996) CLAVE=A
- 156.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Modeling Intrinsic Basicities: The Use of the Electrostatic Potentials and the Atoms-in-Molecules theory*.  
REF. REVISTA: Theoretical and Computational Chemistry Series. Vol 3. Molecular Electrostatic Potentials: Concepts and Applications. Ed. J.S. Murray and K. Sen. Elsevier Amsterdam 1996. CLAVE=CL
- 157.- AUTORES: B. Amekraz, J. Tortajada, J.P. Morizur, A.I. González, O. Mó, M. Yáñez, I. Leito, P.C. Maria and J.F. Gal.  
TITULO: *Experimental and Theoretical Study of the Basicity of Guanidine. The Performance of DFT calculations vs. high level ab initio approaches*.  
REF. REVISTA: New. J. of Chem. **20**, 1011 (1996) CLAVE=A
- 158.- AUTORES: M.C. Bordejé, O. Mó and M. Yáñez.

- TITULO: *Binding Energies of Metal Monocations to b-lactones and b-lactams. A theoretical Study of cyclization effects.*  
 REF. REVISTA: Structural Chem. **7**, 309 (1996). CLAVE=A
- 159.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *High level ab initio calculations on the 1,2-dithioglyoxal/1,2-dithiete isomerism.*  
 REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **263**, 407 (1996). CLAVE=A
- 160.- AUTORES: L. González, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
 TITULO: *Cooperative Effects in Water Trimers. The Performance of Density Functional Approaches.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **371**, 1 (1996). CLAVE=A
- 161.- AUTORES: B. Amekraz, J. Tortajada, J.P. Morizur, A.I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Acetamidine-Mg<sup>+</sup>(<sup>2</sup>S) complexes. The performance of different exchange and correlation density functionals approaches.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **371**, 313 (1996) CLAVE=A
- 162.- AUTORES: M. Manuel, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *A G2 molecular orbital study of the reactions of water with Cl<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P) and Cl<sup>+</sup>(<sup>1</sup>D).*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **101**, 1722 (1997). CLAVE=A
- 163.- AUTORES: E. Leon, B. Amekraz, J. Tortajada, J.P. Morizur, A.I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Acetamidine-X<sup>+</sup> and Guanidine-X<sup>+</sup> (X = Li, Na, Mg, Al) Complexes in the gas-phase. A Theoretical Study.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem.. **101**, 2489 (1997) CLAVE=A
164. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M. Esseffar, A. El-Hammadi, M. Herreros, R. Notario and J.L.G. Abboud.  
 TITULO: *The role of chelation and resonance an the intrinsic acidity and basicity of tropolone.*  
 REF. REVISTA: J. Org. Chem. **62**, 3200 (1997) CLAVE=A
- 165- AUTORES: M.T. Molina, M. Yáñez, O. Mó, R. Notario and J.L.G. Abboud.  
 TITULO: *The Thiocarbonyl Group.*  
 REF. REVISTA: "The Chemistry of Double-Bonded Functional Groups". Ed. S. Patai  
 John Wiley (1997), pg 1355 CLAVE=CL
- 166.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *High-level ab initio vs. DFT calculations on (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O complexes as prototypes of multiple hydrogen bond systems.*  
 REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **18**, 1124 (1997). CLAVE=A
- 167.- AUTORES: M. Manuel, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Thermochemistry of the reactions of F<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P) and F<sup>+</sup>(<sup>1</sup>D) with hydrogen sulfide. A molecular orbital study.*  
 REF. REVISTA: Mol. Phys. **91**, 503 (1997). CLAVE=A
- 168- AUTORES: A. Luna, B. Amekraz, J.P. Morizur, J. Tortajada, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Reaction between Guanidine and Cu<sup>+</sup> in the gas-phase. An Experimental and Theoretical Study.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem.. **101**, 5931 (1997) CLAVE=A

169. AUTORES: O.Mó, M. Yáñez, and J. Elguero  
 TITULO: *Study of the methanol trimer potential energy surface.*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **107**, 3592 (1997) CLAVE=A
- 170.- AUTORES: M. Manuel, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Structure and Stability of  $[H_2,Cl,O]^+$  triplet state cations. A G2 ab initio molecular orbital study.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. **398/399**, 417 (1997). CLAVE=A
- 171.- AUTORES: A.I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Structure and stability of  $[H_2O_2]^+$  Doublet and Quartet State Cations. An ab initio Molecular Orbital Study.*  
 REF. REVISTA: Anales de Química (International Edition) **93**, 310 (1997). CLAVE=A
172. AUTORES: H. Homan, M. Herreros, R. Notario, J.-L.G. Abboud, M. Esseffar, O. Mó, M. Yáñez, C. Foces-Foces, A. Ramos-Gallardo, M. Martinez-Ripoll, A. Vegas, M.T. Molina, J. Casanovas, C. Turrión, P. Jimenez, M.V. Roux.,  
 TITULO: *Strain effects in protonated carbonyl compounds. An experimental and ab initio, treatment of acyclic carboxamides and ketones.*  
 REF. REVISTA: J. Org. Chem. **62**, 8503 (1997) CLAVE=A
- 173.- AUTORES: G. Bouchoux, D. Leblanc, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Structural effects on the intrinsic basicities of  $\alpha,\beta$ -unsaturated lactones and ketones.*  
 REF. REVISTA: J. Org. Chem. **62**, 8439 (1997). CLAVE=A
174. AUTORES: J.M. Orza, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
 TITULO: *Vibrational Spectra of N-Methylpyrazole: An experimental and theoretical study.*  
 REF. REVISTA: Spectroquímica Acta A **53**, 1383 (1997) CLAVE=A
- 175.- AUTORES: A.I. González, D.C. Clary, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Calculations of rate constants for reactions of first and second row cations.*  
 REF. REVISTA: Theoretical Chemistry Accounts **98**, 33 (1997). CLAVE=A
- 176.- AUTORES: J.C. Guillemin, M. Decouzon, PC Maria, JF Gal, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Gas-Phase basicities and acidities of ethyl-, vinyl- and ethynylarsines. An Experimental and Theoretical Study.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **101**, 9525 (1997). CLAVE=A
- 177.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *High-level ab initio calculations on the intramolecular hydrogen bond in thiomalonaldehyde.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **101**, 9710 (1997). CLAVE=A
- 178.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Ionic Intrinsic Reactivities of Strained Systems*  
 REF. REVISTA: Recent Research Developments in Physical Chemistry (1997) CLAVE=CL
- 179.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Proton Transfer in Dissociative Protonation Processes.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 1356 (1998). CLAVE=A
- 180- AUTORES: A. Luna, B. Amekraz, J. Tortajada, J.P. Morizur, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.



- TITULO: *Modeling the interactions between peptide functions and Cu(I): Formamide Cu<sup>+</sup> reaction in the gas-phase.*  
 REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **120**, 5411 (1998) CLAVE=A
- 181.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *G2 ab initio Calculations on three-membered rings. The role of Hydrogen Atoms*  
 REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **19**, 1072 (1998) CLAVE=A
- 182.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Ab initio and density functional theory calculations on the protonated species of As<sub>4</sub> clusters.*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **108**, 8957 (1998) CLAVE=A
- 183.- AUTORES: A. Luna, J.P. Morizur, J. Tortajada, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *The role of Cu<sup>+</sup> association on the formamide → formamidic acid → (aminohydroxy) carbene isomerization in the gas-phase.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 4652 (1998) CLAVE=A
- 184.- AUTORES: M. Yáñez.  
 TITULO: *Química Iónica en Fase Gas. ¿Una nueva Química?.*  
 REF. REVISTA: Temas Actuales de la Química Cuántica. Cap.4 (1998). CLAVE=CL
- 185.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *High level ab initio and density functional theory studies on methanol-water dimers and cyclic methanol(water)<sub>2</sub> trimer.*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **109**, 139 (1998) CLAVE=A
- 186.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Stabilization of zwitterionic forms of three-membered rings by cationization in the gas phase*  
 REF. REVISTA: J. Mol Struct. (THEOCHEM) **433**, 217 (1998) CLAVE=A
- 187.- AUTORES: L. González, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero.  
 TITULO: *Very strong Hydrogen Bonds in Neutral Molecules: The Phosphinic Acid Dimers*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **109**, 2685 (1998) CLAVE=A
- 188.- AUTORES: M. Yáñez.  
 TITULO: *Are phosphatetrahedrane and diphosphatetrahedrane phosphorus or carbon bases?.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **11**, 678 (1998). CLAVE=A
- 189.- AUTORES: J.-L.G. Abboud, M. Esseffar, M. Herreros, O. Mó, M.T. Molina, R. Notario, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Protonation of S<sub>4</sub>, S<sub>6</sub> and S<sub>8</sub> sulfur cycles. A Quantitative study.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 7996 (1998) CLAVE=A
- 190.- AUTORES: O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Density Functional Theory Calculations on Hydrogen-Bonded Tropolone-(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub> Clusters.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 8174 (1998) CLAVE=A
- 191.- AUTORES: M. Begtrup, T. Balle, R.M. Claramunt, D. Sanz, JA. Jimenez, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
 TITULO: *GIAO ab initio calculations of nuclear shieldings of monosubstituted benzenes and n-substituted pyrazoles.*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **453**, 255 (1998) CLAVE=A

- 192.- AUTORES: G. Bouchoux, JF Gal, PC Maria, J.E.Szulejko, T.B. McMahon, J. Tortajada, A. Luna, M. Yáñez and O. Mó  
TITULO: *Gas-Phase Basicities of Acid Anhydrides.*  
REF. REVISTA: J. Phys.Chem. **102**, 9183 (1998). CLAVE=A
193. AUTORES: L. Infantes, C. Foces-Foces, P. Cabildo, R.M. Claramunt, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.  
TITULO: *The structure of aminoazoles and its relationship with aromaticity. crystal and molecular structure of two polymorphic forms of 4-aminopyrazole.*  
REF. REVISTA: Heterocycles **49**,157 (1998) CLAVE=A
- 194.- AUTORES: , M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, A. Luna, J. Tortajada and J.P. Morizur.  
TITULO: *Exploring the potential energy surface of the association of  $Cu^+$  to oxaziridine, nitrosomethane and formaldoxime.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 10120 (1998) CLAVE=A
- 195.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Ionic intrinsic reactivities of strained systems*  
REF. REVISTA: Recent Res. Devel. in Physical Chemistry **2**, 827 (1998) CLAVE=CL
- 196.- AUTORES: A. I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Exploring the Potential Energy Surfaces of the Reactions of  $O^+(\textit{^4}S)$  and  $O^+(\textit{^4}S)$  with ammonia*  
REF. REVISTA: J. Mass. Spectr. Ion Processes. **179/180**, 77 (1998) CLAVE=A
- 197.- AUTORES: M. Manuel, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *The reactions of  $Cl^+(\textit{^3}P)$  and  $Cl^+(\textit{^1}D)$  with hydrogen sulfide. A G2 molecular orbital study.*  
REF. REVISTA: Mol. Phys. **96**, 231 (1999). CLAVE=A
- 198.- AUTORES: Z.B. Maksic , M. Eckert-Maksic, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *The Mills-Nixon Effect: Fallacies, Facts and Chemical Relevance.*  
REF. REVISTA: Theoretical and Computational Chemistry vol 6. Pauling's Legacy. Modern Modeling of the Chemical Bonding. Elsevier. Amsterdam (1999) CLAVE=CL
- 199.- AUTORES: A. I. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *A gas-phase basicity scale for selenocarbonyl compounds based on high-level ab initio and density functional theory calculations*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **103**, 1662 (1999) CLAVE=A
- 200.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Substituent Effects on the Strength of the Intramolecular Hydrogen Bond of Thiomalonaldehyde.*  
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **64**, 2314 (1999) CLAVE=A
- 201.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M. Decouzon, PC Maria, JF Gal and J.C. Guillemin  
TITULO: *Gas-Phase basicities and acidities trends in  $\alpha,\beta$ -unsaturated amines,phosphines and arsines.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **121**, 4653 (1999). CLAVE=A
- 202.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez and I.L. Cooper.  
TITULO: *Ab initio Molecular Orbital Study of  $XO_2^+$  ( $X= F, Cl, Br, I$ ) Systems.*

- REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **103**, 2793 (1999) CLAVE=A
- 203.- AUTORES: G. Bouchoux, M. Yáñez and O. Mó  
TITULO: *Isomerization and Dissociation Processes of Protonated Benzene and Protonated Fulvene in the Gas-Phase.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectr. **185/186/187**, 241 (1999). CLAVE=A
- 204.- AUTORES: M. Alcamí, A.I. González, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Performance of Density Functional Theory methods for the treatment of metal-ligand dications.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **307**, 244 (1999) CLAVE=A
- 205.- AUTORES: A. I. González, A. Luna and M. Yáñez.  
TITULO: *High-Level ab initio calculations on the gas-phase reactions between C<sup>+</sup>(<sup>2</sup>P) and formic acid.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **103**, 4543 (1999) CLAVE=A
- 206.- AUTORES: L. González, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Density functional theory study on ethanol dimers and cyclic ethanol trimers*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **111**, 3855 (1999) CLAVE=A
- 207.- AUTORES: J.-L.M. Abboud, R. Notario, M. Yáñez, O. Mó, R. Flammang, N. Jagerovic, I. Alkorta and J. Elguero  
TITULO: *4-Nitropyrazole: A Nitrogen or Oxygen base in the gas phase?*  
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **12**, 787 (1999) CLAVE=A
- 208.- AUTORES: J.A. Jiménez, R. Claramunt, O. Mó, M. Yáñez, F. Wehrmann, G. Buntkowsky, H.H. Limbach, R. Goddard and J. Elguero.  
TITULO: *The structure of N-aminopyrazole in the solid state and in solution: an experimental and computational study.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **1**, 5113 (1999)
- 209.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M.V. Roux, P. Jiménez, J.Z. Dávalos, M.A.V. Ribeiro da Silva, M.D.M.C. Ribeiro da Silva, M.A.R. Matos, L.M.P.F. Amaral, A. Sánchez-Migallón, P. Cabildo, R. Claramunt, J. Elguero, J.E. Liebman.  
TITULO: *Enthalpies of Formation of N-Substituted Pyrazoles and Imidazoles*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **103**, 9336 (1999). CLAVE=A
- 210.- AUTORES: A.I. González, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *The structure and stability of Sb<sub>4</sub>H<sup>+</sup> clusters. The importance of non-classical structures.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **112**, 2258 (2000) CLAVE=A
- 211.- AUTORES: A. Luna, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Cu<sup>+</sup> binding energies. Dramatic failure of the G2 method vs. Good performance of the B3LYP approach.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **320**, 129 (2000) CLAVE=A
- 212.- AUTORES: J.L-M. Abboud, I. Alkorta, J.Z. Dávalos, J.F. Gal, M. Herreros, P.C. Maria, O. Mó, M.T. Molina, R. Notario and M. Yáñez.  
TITULO: *The P<sub>4</sub>...Li<sup>+</sup> Ion in the Gas Phase: A Planetary System.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **122**, 4451 (2000) CLAVE=A

- 213.- AUTORES: A. Luna, B. Amekraz, J.P. Morizur, J. Tortajada, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Reactions of Urea with Cu<sup>+</sup> in the Gas Phase: An Experimental and Theoretical Study*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **104**, 3132 (2000) CLAVE=A
- 214.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, and I. Cooper.  
 TITULO: *The Performance of density functional theory in challenging cases: Halogen oxides.*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **112**, 6131 (2000) CLAVE=A
- 215.- AUTORES: M. Lamsabhi, M. Alcamí, O. Mó, W. Bouab, M. Esseffar, J.L-M. Abboud, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Are the Thiouracils Sulfur Bases in the Gas-Phase?.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **104**, 5122 (2000) CLAVE=A
- 216.- AUTORES: G. Bouchoux, B. Gaudin, D. Leblanc. M. Yáñez and O. Mó.  
 TITULO: *Is ionized cyclopropylamine cyclic?.*  
 REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectr. **199**, 59 (2000) CLAVE=A
- 217.- AUTORES: A. Luna, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Cu<sup>+</sup> reactivity trends in sp, sp<sup>2</sup> and sp<sup>3</sup> nitrogen, phosphorus and arsenic containing bases.*  
 REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectr. **201**, 215 (2000) CLAVE=A
- 218.- AUTORES: M. Esseffar, W. Bouab, A. Lamsabhi, J.L.M. Abboud, R. Notario, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Thiocarbonyl-I<sub>2</sub> Molecular Complexes. An Experimental and Theoretical Study.*  
 REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **122**, 2300 (2000) CLAVE=A
- 219.- AUTORES: F. Fernández-Morata, M. Alcamí, L. González and M. Yáñez.  
 TITULO: *Thermochemistry of the Reactions F<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P, <sup>1</sup>D) + PH<sub>3</sub> in the Gas Phase*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **104**, 8075 (2000) CLAVE=A
- 220.- AUTORES: M.C. Oliveira, M.A. Almoester-Ferreira, O. Mó, M. Yáñez and H. Audier.  
 TITULO: *Exploring the Potential Energy Surface Associated with the HBr Loss from 2-Bromobutane Radical Cation*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **104**, 9287 (2000) CLAVE=A
- 221.- AUTORES: O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: ***Enlace Químico y Estructura Molecular***  
 REF. J.M. Bosch Editor. Barcelona 2000. CLAVE=L
- 222.- AUTORES: F. Ijjaali, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *A Theoretical Study of the Reaction between N<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P) and Formaldehyde and Related Processes in the Gas Phase.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **104**, 11132 (2000) CLAVE=A
- 223.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Protonation and Deprotonation of Thiomalonaldehyde. The role of the Intramolecular Hydrogen Bond*  
 REF. REVISTA: "Recent Theoretical and Experimental Advances in Hydrogen Bonded Clusters". Ed. S.S. Xantheas. Kluwer Academic Pub. (2000). The Netherlands. CLAVE=CL
- 224.- AUTORES: F. Ijjaali, M. El-Mouhtadi, M. Esseffar, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.

- TITULO: *The role of the spin-forbidden processes in  $N^+(\text{}^3P)+ NH_3$  reactions in the gas phase.*  
 REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **3**, 179 (2001) CLAVE=A
- 225.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, W. Bouab, M. Esseffar, M. Alcamí, M. Yáñez and J.L.M. Abboud.  
 TITULO: *Basicity of some carbonyl compounds towards Iodine monochloride: Experimental and theoretical study.*  
 REVISTA: New Journal of Chemistry **25**, 509 (2001) CLAVE=A
- 226.- AUTORES: A. Benidar, R. Le Doucen, J.C. Guillemin.O. Mó, M. Yáñez.  
 TITULO: *Vibrational Spectra, DFT calculations and Assignments of the syn- and the gauche forms of vinylphosphine.*  
 REVISTA: J. Mol. Spectrosc. **205**, 252 (2001) CLAVE=A
- 227.- AUTORES: F. Ijjaali, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Thermochemistry of the reactions between  $CN^+$  and  $H_2O$  in the gas phase.*  
 REVISTA: Mol. Phys. **99**, 1129 (2001) CLAVE=A
- 228.- AUTORES: J.F. Gal, M. Decouzon, P.C. Maria, A.I. González, O. Mó, M. Yáñez, S. El Chaouch and J.C. Guillemin.  
 TITULO: *Acidity trends in  $\alpha,\beta$ -Unsaturated alkanes, silanes, germanes and stannanes.*  
 REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **123**, 6353 (2001) CLAVE=A
- 229.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, L. González and J. Elguero.  
 TITULO: *Spontaneous Self-ionization in the Gas Phase. A Theoretical Prediction.*  
 REF. REVISTA: Chem. Phys. Chem. **7**, 465 (2001) CLAVE=A
- 230.- AUTORES: I. Alkorta, I. Rozas, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero.  
 TITULO: *Hydrogen bond vs. proton transfer between neutral molecules in the gas phase*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **105**, 7481 (2001) CLAVE=A
- 231.- AUTORES: M.C. Oliveira, M.A. Almoster-Ferreira, O. Mó, M. Yáñez, and H. Audier.  
 TITULO: *Reaction Mechanisms for the HBr Loss from 2-Bromobutane Radical Cations.*  
 REF. REVISTA: Adv. Mass Spectrom. **15**, 753 (2001) Ed. E. Gelpi. John Wiley & Sons. New York  
 CLAVE=CL
- 232.- AUTORES: M. Yáñez.  
 TITULO: *Some useful theoretical tools to investigate Ion-Molecule reactions in the gas phase.*  
 REF. REVISTA: Adv. Mass Spectrom. **15**, 333 (2001) Ed. E. Gelpi. John Wiley & Sons. New York.  
 CLAVE=CL
- 233.- AUTORES: A. Hoz, I. Almena, C. Foces-Foces, M. Yáñez, O. Mó, M. Alcamí, N. Jagerovic and J. Elguero  
 TITULO: *Synthesis, X-ray structure and properties of 2-(1'-pyridin-2'-one)benzimidazole.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. B **105**, 12759 (2001) CLAVE=A
- 234.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez  
 TITULO: *Computational Chemistry. A useful (some times mandatory) tool in mass spectrometry Studies.*  
 REF. REVISTA: Mass Spectrom. Rev. **20**, 195-245 (2001) CLAVE=A

- 235.- AUTORES: F. Ijjaali, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *High level ab initio study of the  $N^+(\textit{P})+ SH_2$  reactions in the gas phase. The role of spin forbidden pathways.*  
REVISTA: Int. J. Quantum Chem. **86**, 130 (2002) CLAVE=A
- 236.- AUTORES: L. Boutreau, J. Tortajada, A. Luna, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Perturbation of the intramolecular hydrogen bonds of Glucose by  $Cu^+$  association.*  
REVISTA: Int. J. Quantum Chem. **86**, 138 (2002) CLAVE=A
- 237.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Modeling Intrinsic Basicities and Acidities*  
REF. REVISTA: J. Phys Org. Chem. (Rev. Article) **15**, 174 (2002) CLAVE=A
- 238.- AUTORES: M. Alcamí, A. Luna, O. Mó, M. Yáñez, L. Boutreau and J. Tortajada  
TITULO: *An Experimental and Theoretical Investigation of the Reactions between Glucose and  $Cu^+$  in the Gas Phase.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 2641 (2002) CLAVE=A
- 239.- AUTORES: S. El Chaouch, J.C.Guillemin, J.F. Gal, P.C. Maria, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas-Phase acidity of primary  $\alpha,\beta$ -unsaturated germanes and stannanes.*  
REF. REVISTA: *Main Group Metal Chemistry*, **25**, 85 (2002). CLAVE=A
- 240.- AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *Competition between  $X...H...Y$  intramolecular hydrogen bonds and  $X...Y$  ( $X=O, S$ ;  $Y=Se, Te$ ) chalcogen-chalcogen interactions.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 4661 (2002) CLAVE=A
- 241.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, I. Alkorta and J. Elguero.  
TITULO: *Triaziridine and Tetrazetidine vs. Cyclic Water trimer and tetramer: A computational approach to the relationship between Molecular and Supramolecular Conformational Analysis.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **4**, 2123 (2002) CLAVE=A
- 242.- AUTORES: A. Luna, M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, and J. Tortajada  
TITULO: *A theoretical study of the interaction between  $Ni^+$  and small oxygen- and nitrogen-containing Bases.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom **217**, 119 (2002) CLAVE=A
- 243.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, T. El Messaoudi, M. Esseffar, M. Alcamí, and M. Yáñez  
TITULO: *Prototropic tautomerism of thioxo(oxo)-3 oxo(thioxo)-5 2,7-dimethyl-1,2,4-triazepines.*  
REVISTA: New Journal of Chemistry **26**, 711 (2002) CLAVE=A
- 244.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez J.F. Gal, P.C. Maria and J.C.Guillemin.  
TITULO: *Vinyl and Ethynyl Silanes, Germanes and Stannanes. A new case of Dissociative Proton Attachment.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **15**, 509 (2002) CLAVE=A
- 245.- AUTORES: G. Bouchoux, D. Defaye, T. McMahon, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Structural and energetic aspects of the protonation of phenol, catechol, resorcinol and hydroquinone.*

- REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **8**, 2900 (2002) CLAVE=A
- 246.- AUTORES: A. Benidar, R. Le Doucen, J.C.Guillemain, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Vibrational Spectra of Vinylarsine and Vinylstibine. An Experimental and Theoretical Study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 6262 (2002) CLAVE=A
- 247.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The Crucial role of agostic interactions in the binding of Cu<sup>+</sup> to alkanes, silanes and germanes in the gas phase.*  
REF. REVISTA: J. Comp. Methods in Sciences and Engineering **2**, 411(2002) CLAVE=A
- 248.- AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *The Role of Chalcogen-chalcogen interactions on the intrinsic basicity and acidity of  $\beta$ -chalcogenovinylaldehydes, HC(=X)-CH=CH-CYH (X=O, S; Y=Se, Te).*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **8**, 3999 (2002) CLAVE=A
- 240.- AUTORES: J.F. Gal, P.C. Maria, M. Decouzon, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas-Phase Lithium cation basicity of some benzene derivatives. An experimental and theoretical study.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom **219**, 445 (2002) CLAVE=A
- 250.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, M. Esseffar, W. Bouab, T. El Messaoudi, M. El Messaoudi, J.L.M. Abboud, M. Alcamí, and M. Yáñez  
TITULO: *The gas-phase basicity of 2,7-dimethyl-1,2,4-triazepine thio derivatives.*  
REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 7383 (2002) CLAVE=A
- 251.- AUTORES: L. Bouteau, P. Toulhoat, J. Tortajada, A. Luna, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Reactions between Glycolic Acid and Cu<sup>+</sup> in the Gas-phase. An experimental and theoretical study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **106**, 9359 (2002) CLAVE=A
- 252.- AUTORES: L. Galiano, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas Phase chemistry of ethyl- and vinyl-amines, phosphines and arsines. A DFT study of the structure and stability of their Cu<sup>+</sup> complexes.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 9306 (2002) CLAVE=A
- 253.- AUTORES: I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, M. Yáñez, and J. Del Bene.  
TITULO: *An ab initio study of the structural, energetic, bonding, and IR spectroscopic properties of complexes with dihydrogen bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **106**, 9325 (2002) CLAVE=A
- 254.- AUTORES: J. Del Bene, S.A. Perera, R.J. Bartlett, I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *One-Bond ( $^1J_{H-H}$ ) and Three-Bond ( $^3J_{X-M}$ ) Spin-Spin Coupling Constants across X-H...H-M Dihydrogen Bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 9331 (2002) CLAVE=A
- 255.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, J.C. Guillemain, E.H. Riague, J.F. Gal, P.C. Maria and C. Dubin-Poliart.  
TITULO: *The gas-phase acidity of HCP, CH<sub>3</sub>CP, HCAs and CH<sub>3</sub>Cas. An unexpected enhanced acidity*

- of the methyl group.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **8**, 4919 (2002) CLAVE=A
- 256.- AUTORES: M. Esseffar, E. Quintanilla, J.Z. Dávalos, J.L.M. Abboud, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Nitro derivatives of pyrrole, furan and 1H-tetrazole: ring or nitro bases?.*  
REF. REVISTA: New J. Chem. **26**, 1567 (2002) CLAVE=A
- 257.- AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *1,8-Chalcogen-Bridged Naphthalenes. Strong Carbon Bases in the Gas Phase.*  
REF. REVISTA: New J. Chem. **26**, 1747 (2002) CLAVE=A
- 258.- AUTORES: F. Martín, F. Borondo, M. Yáñez, et al. (Coordinadores J. Bertran, J. Nuñez).  
TITULO: *QUIMICA FISICA*  
REF. REVISTA: Ariel Ciencia, Barcelona (2002). CLAVE=CL
- 259.- AUTORES: L. Galiano, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas-Phase Chemistry of Ethynyl-Amine, Phosphine and Arsine. Structure and stability of their Cu<sup>+</sup> and Ni<sup>+</sup> complexes.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Chem. **4**, 72 (2003) CLAVE=A
- 260.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, J. Elguero, M.V. Roux, P. Jiménez, J.Z. Dávalos, M.A.V. Ribeiro da Silva, M. das D. M. C. Ribeiro da Silva, P. Cabildo, R. Claramunt.  
TITULO: *Substituent effects on enthalpies of formation. Benzene derivatives.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 366 (2003). CLAVE=A
- 261.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *Structure and stability of [H<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>, N]<sup>+</sup> singlet state cations. A comparison between DFT and high-level ab initio calculations.*  
REF. REVISTA: Int. J. Quantum Chem. **91**, 438 (2003) CLAVE=A
- 262.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Agostic vs.  $\pi$ -interactions in complexes of ethynyl-silanes and ethynyl-germanes with Cu<sup>+</sup> in the gas phase.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 1370 (2003) CLAVE=A
- 263.- AUTORES: J. Del Bene, S.A. Perera, R.J. Bartlett, M. Yáñez, O. Mó, I. Alkorta, and J. Elguero.  
TITULO: *Two-Bond F-N Spin-Spin Coupling Constants (<sup>2h</sup>J<sub>N-F</sub>) across FH...N Hydrogen Bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 3121 (2003) CLAVE=A
- 264.- AUTORES: J. Del Bene, S.A. Perera, R.J. Bartlett, M. Yáñez, O. Mó, I. Alkorta, and J. Elguero.  
TITULO: *Two-Bond N-F Spin-Spin Coupling Constants (<sup>2h</sup>J<sub>N-F</sub>) across NH<sup>+</sup>...F Hydrogen Bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 3126 (2003) CLAVE=A
- 265.- AUTORES: J. Del Bene, S.A. Perera, R.J. Bartlett, M. Yáñez, O. Mó, J. Elguero, and I. Alkorta.  
TITULO: *Two-Bond <sup>13</sup>C-<sup>15</sup>N Spin-Spin Coupling Constants (<sup>2h</sup>J<sub>C-N</sub>) across C-H-N Hydrogen Bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 3222 (2003) CLAVE=A
- 266.- AUTORES: M. Esseffar, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas-phase reactivity of lactones. Structures and stability of their Cu<sup>+</sup> complexes.*



- REF. REVISTA: Mol. Phys. **101**, 1249 (2003) CLAVE=A
- 267.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Binding energies of Cu<sup>+</sup> to saturated and  $\alpha,\beta$ -unsaturated alkanes, silanes and germanes. The role of agostic interactions.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom. **227**, 401 (2003) CLAVE=A
- 268.- AUTORES: M. Yáñez.  
TITULO: *Theory. Energies and Potential Energy Surfaces: Organics.*  
REF. REVISTA: Enciclopedia of Mass Spectrom. Vol 1: Theory and Ion Chemistry. Gen. Ed. M.L. Gross & R. Caprioli. Vol. Ed. P.B. Armentrout. Elsevier. Oxford UK. 2003. pg 68.  
CLAVE=CL
- 269.- AUTORES: D. Baric, Z.B. Maksic and M. Yáñez  
TITULO: *Atomic Additivity of the Correlation Energy in Molecules- An Ab Initio MP4 and G3 Study*  
REF. REVISTA: Mol. Phys. **101**, 1377 (2003)
- 270.- AUTORES: A. Luna, O. Mó, M. Yáñez, J.P. Morizur, E. Leclerc, B. Desmazières, V. Haldys, , J. Chamot-Rooke and J. Tortajada.  
TITULO: *Specific reactivity of alkenes with transition metal cations. 1-Pentene- and 1-Octene-Cu<sup>+</sup> reactions in the gas phase.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass. Spectrom. **228**, 359 (2003) CLAVE=A
- 271.- AUTORES: J.F. Gal, P.C. Maria, M. Decouzon, O. Mó, M. Yáñez, and J.-L. M. Abboud.  
TITULO: *Lithium-Cation/ $\pi$  complexes of aromatic systems. The effect of increasing the number of fused rings.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **125**, 10394 (2003) CLAVE=A
- 272.- AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *Characterization of intramolecular hydrogen bonds and other weak intramolecular interactions on the basis of the topology of the charge density .*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **5**, 2942 (2003) CLAVE=A
- 273.- AUTORES: M. Yáñez.  
TITULO: *La Química Computacional. Una herramienta para la Química del siglo XXI.*  
REF. REVISTA: Anales de la Real Sociedad Española de Química. (numero especial del centenario), **99(2)**, 203 (2003) CLAVE=A
- 274.- AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *Cyclization triggered by deprotonation. The gas-phase acidity of 1,8-Chalcogen-bridged naphthalenes..*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **4**, 830 (2003) CLAVE=A
- 275.- AUTORES: O. Mó and M. Yáñez, J.F. Gal, P.C. Maria, M. Decouzon.  
TITULO: *Enhanced Li<sup>+</sup> Binding energies in alkylbenzene derivatives. The scorpion effect.*  
REF. REVISTA: Chemistry European J. **9**, 4330 (2003) CLAVE=A
- 276.- AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.

- TITULO: *Resonance Assisted Intramolecular Chalcogen-Chalcogen Interactions?*  
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **9**, 4548 (2003) CLAVE=A
- 277.- AUTORES: M.C. Sicilia, O. Mó, M. Yáñez, J.C. Guillemin, J.F. Gal and P.C. Maria.  
TITULO: *Is Allylphosphine a Carbon or a Phosphorus base in the gas phase?*  
REF. REVISTA: Eur. J. Mass Spectrom. **9**, 257 (2003) CLAVE=A
- 278.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *The importance of agostic-type interactions on the gas-phase of saturated and  $\alpha,\beta$ -unsaturated alkanes, silanes and germanes towards  $Ni^+$ .*  
REF. REVISTA: New J. Chem. **27**, 1657 (2003) CLAVE=A
- 279.- AUTORES: A. El Firdoussi, M. Esseffar, W. Bouab, A. Lamsabhi, J.L.M. Abboud, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Basicity of Lactones and cyclic ketones towards  $I_2$  and  $ICl$ . An experimental and theoretical study.*  
REF. REVISTA: New J. Chem. **27**, 1741 (2003) CLAVE=A
- 280.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, M. Yáñez, A. Scott, and L. Radom  
TITULO: *The Interaction between Neutral Molecules and  $Ca^{2+}$ : An Assessment of Theoretical Procedures.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **107**, 10456 (2003) CLAVE=A
- 281.- AUTORES: A. M. Lamsabhi, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Gas-Phase Reactivity of uracil, 2-thiouracil, 4-thiouracil, and 2,4-dithiouracil towards the  $Cu^+$  cation: a DFT study.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Chem. **4**, 1011 (2003) CLAVE=A
- 282.- AUTORES: J.-Y. Salpin, J. Tortajada, M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Optimization of extended basis sets and assessment of different theoretical schemes for Pb containing compounds.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **383**, 561 (2004) CLAVE=A
- 283.- AUTORES: J. Del Bene, J. Elguero, I. Alkorta, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO:  *$^{19}F$ - $^{19}F$  Spin-Spin Coupling Constant surfaces for  $(HF)_2$  clusters: The orientation and distance dependence of the sign and magnitude of  $J_{F-F}$ .*  
REF. REVISTA: J. Chem Phys. **120**, 3237 (2004) CLAVE=A
- 284.- AUTORES: A. Palacios, F. Martín, O. Mó, M. Yáñez, and Z. B. Maksic  
TITULO: *Stable doubly charged positive ions formed by direct attachment of alpha particles to HCN and HNC.*  
REF. REVISTA: Phys. Rev. Lett. **92**, 133001 (2004) CLAVE=A
- 285.- AUTORES: M.A.V. Ribeiro da Silva, M. das D. M. C. Ribeiro da Silva, L.M.P.F. Amaral, P. Jiménez, M.V. Roux, J.Z. Dávalos, M. Temprano, P. Cabildo, R. Claramunt, J. Elguero, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Experimental thermochemical study of two 2-alkylbenzimidazole isomers (alkyl = propyl and isopropyl).*  
REF. REVISTA: J. Chem. Thermo. **36**, 533 (2004). CLAVE=A

- 286.- AUTORES: J. Tortajada, B. Amekraz, M. Alcamí, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Unimolecular reactivity of strong metal cation complexes in the gas phase. Ethylenediamine-Cu<sup>+</sup>*  
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **10**, 2927 (2004) CLAVE=A
- 287.- AUTORES: P. Jiménez, M.V. Roux, J.Z. Dávalos, M. Temprano, M.A.V. Ribeiro da Silva, M. das D. M. C. Ribeiro da Silva, L.M.P.F. Amaral, P. Cabildo, R. Claramunt, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero.  
TITULO: *Substituent and ring effects on enthalpies of formation: 2-methyl- and 2-ethyl-benzimidazol vs. benzene- and imidazole-derivatives.*  
REF. REVISTA: Mol. Phys. **102**, 711 (2004). CLAVE=A
- 288.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *Bonding and Bonding Perturbation in Ion-Molecule Interactions in the Gas Phase.*  
REF. REVISTA: Encyclopedia of Computational Chemistry. Published on line  
URL: <http://www.mrw.interscience.wiley.com/ecc/articles/cn0062/frame.html> CLAVE=CL
- 289.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *The importance of non-conventional structures in the binding of Ni<sup>+</sup> to ethynyl-silanes and ethynyl-germanes.*  
REF. REVISTA: Theoret. Chem. Accounts. **112**, 298 (2004) CLAVE=A
- 290.- AUTORES: M. Alcamí, A. Luna, O. Mó, J. Tortajada and M. Yáñez  
TITULO: *A theoretical survey of the potential energy surface of Ethylenediamine + Cu<sup>+</sup> reactions.*  
REF. REVISTA: J. Phys.Chem. A **108**, 8367 (2004) CLAVE=A
- 291.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *Theoretical survey of the potential energy surfaces associated with the N<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P, <sup>1</sup>D) + C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> reactions in the gas phase.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **108**, 9762 (2004) CLAVE=A
- 292.- AUTORES: G. Bouchoux, J-Y. Salpin, and M. Yáñez  
TITULO: *Low energy dissociation processes of ionized cyclohexene: a theoretical insight.*  
REF. REVISTA: J. Phys.Chem. A **108**, 9853 (2004) CLAVE=A
- 293.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, M. Yáñez, J-Y. Salpin, J. Tortajada and L. Radom  
TITULO: *Gas-Phase Reactions between Urea and Ca<sup>2+</sup>: The importance of Coulomb explosions.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **108**, 10080 (2004) CLAVE=A
- 294.- AUTORES: A. El Firdoussi, M. Esseffar, W. Bouab, J.L.M. Abboud, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Push-pull electronic effects in charge-transfer complexes. The case of N-H and N-Me lactams.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **108**, 10568 (2004) CLAVE=A
- 295.- AUTORES: A. M. Lamsabhi, M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, and J. Tortajada.  
TITULO: *Cu<sup>2+</sup> association to uracil and its thio-derivatives. A theoretical study.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **5**, 1871-78 (2004) CLAVE=A
- 296.- AUTORES: I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, M. Yáñez, and J. Del Bene.  
TITULO: *Do coupling constants and chemical shift provide evidence for the existence of Resonance Assisted Hydrogen Bonds (RAHB)?*  
REF. REVISTA: Mol. Phys. **102**, 2563 (2004) CLAVE=A

- 297.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO: *Li<sup>+</sup> vs. Cu<sup>+</sup> association to toluene, phenyl-silane and phenyl-germane. Conventional vs. non-conventional  $\pi$ -complexes.*  
REF. REVISTA: Eur. J. Mass Spectrom. **10**, 921 (2004) CLAVE=A
- 298.- AUTORES: C. Emmeluth, V. Dyczmons, T. Kinzel, P. Botschwina, M.A. Suhm and M. Yáñez.  
TITULO: *Combined jet relaxation and quantum chemical study of the pairing preferences of ethanol.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **7**, 991 (2005) CLAVE=A
- 299.- AUTORES: E. Quintanilla, J.Z. Dávalos, J.L.M. Abboud, M. Alcamí, M.P. Cabildo, R. Claramunt, J. Elguero, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Why does pivalaldehyde (trimethylacetaldehyde) unexpectedly seem more basic than 1-adamantanecarbaldehyde in the gas-phase?. A FT-ICR and high-level ab initio study.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **11**, 1826 (2005) CLAVE=A
- 300.- AUTORES: J.C. Guillemin, E. H. Riague, J.F. Gal, P.C. Maria, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Acidity trends in  $\alpha,\beta$ -unsaturated sulfur, selenium and tellurium derivatives. Comparison with C-, Si-, Ge-, Sn-, N-, P-, As-, and Sb-containing analogs.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **11**, 2145 (2005) CLAVE=A
- 301.- AUTORES: J. Del Bene, J. Elguero, I. Alkorta, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Ab initio study of the influence of trimer formation on one and two-bond spin-spin coupling constants across X-H-Y hydrogen bonds: Complexes AH:XH:YH<sub>3</sub> for A,X = <sup>19</sup>F, <sup>35</sup>Cl and Y = <sup>15</sup>N, <sup>31</sup>P.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem A. **109**, 2350 (2005) CLAVE=A
- 302.- AUTORES: O. Picazo, I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Chiral Recognition in phosphinic acids dimers.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **18**, 491 (2005) CLAVE=A
- 303.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, and J.C. Guillemin.  
TITULO: *A theoretical study on the dimers of Aminoacrylonitrile (3-Amino-2-Propenenitrile), a compound of astrochemical interest.*  
REF. REVISTA: Arkivoc **IX**, 239 (2005) CLAVE=A
- 304.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M. Eckert-Maksic, Z.B. Maksic, I. Alkorta and J. Elguero.  
TITULO: *Periodic trends in bond dissociation energies. A theoretical study..*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem A **109**, 4359 (2005) CLAVE=A
- 305.- AUTORES: A. Benidar, J.C. Guillemin, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Infrared Spectra of a Species of Astrochemical Interest: Aminoacrylonitrile (3-Amino-2-Propenenitrile).*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **109**, 4705 (2005) CLAVE=A
- 306.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, J. Del Bene, I. Alkorta, and J. Elguero.  
TITULO: *Cooperativity and proton transfer in hydrogen-bonded trimers.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **6**, 1411 (2005) CLAVE=A
- 307.- AUTORES: A. Palacios, I. Corral, O. Mó, F. Martín and M. Yáñez  
TITULO: *On the existence and lifetimes of Cu<sup>2+</sup> complexes with water, ammonia and hydrogen cyanide.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **123**, 014315 (1-5) (2005) CLAVE=A

- 308.- AUTORES: J. Zevallos, A. Toro-Labbé, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The role of Intramolecular Hydrogen Bond vs. other weak interactions on the conformation of hyponitrous acid and its mono- and dithio-derivatives.*  
REF. REVISTA: Struct. Chem. **16**, 295 (2005) CLAVE=A
- 309.- AUTORES: M.A.V. Ribeiro da Silva, M.das D. M. C. Ribeiro da Silva, L.M.P.F. Amaral, J. Elguero, P. Jiménez, M.V. Roux, J.Z. Dávalos, M. Temprano, P. Cabildo, R. Claramunt, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Thermochemical Properties of Two Benzimidazole Derivatives: 2-Phenyl- and 2-Benzylbenzimidazole.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Therm. **37**, 1168 (2005). CLAVE=A
- 310.- AUTORES: I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, M. Yáñez, and J. Del Bene,  
TITULO: *Are RAHBs "resonance assisted"? A theoretical NMR study.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **411**, 411 (2005) CLAVE=A
- 311.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, M. Yáñez and L. Radom  
TITULO: *Why the  $Ca^{2+}$  and  $K^+$  binding energies of formaldehyde and ammonia are reversed with respect to their proton affinities?*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **109**, 6735 (2005) CLAVE=A
- 312.- AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *The NICS(Nucleus-Independent Chemical Shift) as a probe of the relative stability of  $\beta$ -Chalcogenovinylaldehydes stabilized through intramolecular chalcogen-chalcogen interactions.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **730**, 217 (2005) CLAVE=A
- 313.- AUTORES: B. Kovačević, M. Rožman, L. Klasinc, D. Srzić, Z.B.Maksic and M. Yáñez  
TITULO: *Gas phase structure of protonated histidine and histidine methyl ester– a combined experimental mass spectrometry and theoretical ab initio study.*  
REF. REVISTA: J. Phys Chem. A **109**, 8329 (2005) CLAVE=A
- 314.- AUTORES: A. El Firdoussi, M. Esseffar, W. Bouab, J.L.M. Abboud, O. Mó, M. Yáñez and M.F. Ruasse.  
TITULO: *Density Functional Theory Study of the Hydrogen Bond Interaction Between Lactones, Lactams and Methanol.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **109**, 9141 (2005) CLAVE=A
- 315.- AUTORES: X. Solans, M. Sodupe, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero.  
TITULO: *Hydrogen bond vs. Proton transfer in médium-size zeolitas. A Theoretical Study.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. B **109**, 19301 (2005) CLAVE=A
- 316.- AUTORES: M. Güell, J. Poater, J. M. Luis, O. Mó, M. Yáñez and M. Solà  
TITULO: *An aromaticity analysis of Lithium-cation/  $\pi$  complexes of aromatic systems.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **6**, 2552 (2005) CLAVE=A
- 317.- AUTORES: G. Bouchoux, D. Leblanc, W. Bertrand, T.B. McMahon, J.E. Szulejko, F. Berruyer-Penaud, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Protonation thermochemistry of selected hydroxy and methoxy carbonyl molecules.*  
REF. REVISTA: J. Phys Chem. A **109**, 11851 (2005) CLAVE=A
- 318.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez

- TITULO: *Analysis of the bonding in  $XH_3-Cu^+$  ( $X=B,Al,Ga$ ) complexes.*  
REF. REVISTA: Int. J. Quantum Chem. **106**, 659 (2006) CLAVE=A
- 319.- AUTORES: A. M. Lamsabhi, M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, and J. Tortajada.  
TITULO: *On the gas-phase deprotonation of Uracil- $Cu^{2+}$  and Thiouracil- $Cu^{2+}$  Complexes.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **110**, 1943 (2006) CLAVE=A
- 320.- AUTORES: L. Infantes, O. Mó, M. Yáñez, M.V. Roux, P. Jiménez, J.Z. Dávalos, M. Temprano, M.A.V. Ribeiro da Silva, M.das D. M. C. Ribeiro da Silva, L.M.P.F. Amaral, P. Cabildo, R. Claramunt, and J. Elguero.  
TITULO: *Substituent Effects on Enthalpies of Formation of Nitrogen Heterocycles: 2-Substituted Benzimidazoles and Related Compounds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **110**, 2535 (2006). CLAVE=A
- 321.- AUTORES: C. Trujillo, A. M. Lamsabhi, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The reactions of  $F^+(\ ^3P)$  and  $F^+(\ ^1D)$  with silicon oxide. Possibility of spin-forbidden processes.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **110**, 7130 (2006) CLAVE=A
- 322.- AUTORES: M.I. Colvin, C.J. Cramer, C.E. Dykstra, J.H. Jensen, S. Krimm, J-L. Rivail, A.J. Tacar and M. Yáñez.  
TITULO: *Molecular quantum mechanics to biodynamics: Essential connections.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct (THEOCHEM) **764**, 1 (2006) CLAVE=A
- 323.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez  
TITULO:  *$Cu^+$  association to some  $Ph-X$  ( $X=OH, NH_2, CHO, COOH, CF_3$ ) phenyl derivatives. A comparison with  $Li^+$  complexes.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass. Spectrom. **255-256**, 20 (2006) CLAVE=A
- 324.- AUTORES: J. Del Bene, J. Elguero, I. Alkorta, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *An ab initio study of  $^{15}N-^{11}B$  spin-spin coupling constants for borazine and selected derivatives.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **110**, 9959 (2006) CLAVE=A
- 325.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, M. Yáñez J-Y Salpin, J. Tortajada, D. Moran and L. Radom  
TITULO: *An experimental and theoretical investigation of glycine+  $Ca^{2+}$  reactions in the gas phase*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **12**, 6787 (2006) CLAVE=A
- 326.- AUTORES: J.F. Gal, P.C. Maria, O. Mó, M. Yáñez and D. Kuck.  
TITULO: *Gaseous Complexes between Lithium Cation and Diphenylalkanes. The Pincer Effect.*  
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **12**, 7676 (2006) CLAVE=A
- 327.- AUTORES: A. Luna, O. Mó, M. Yáñez J.F. Gal, P.C. Maria, and J.C. Guillemin.  
TITULO: *Gas-phase protonation and deprotonation of acrylonitrile derivatives  $N\equiv C-CH=CH-X$  ( $X=CH_3, NH_2, PH_2, SiH_3$ ).*  
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **12**, 9254 (2006) CLAVE=A
- 328.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez

- TITULO: *On the stability of non-conventional  $\pi$ -complexes between  $Ni^+$  and toluene, phenyl-silane and phenyl-germane*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **19**, 495 (2006) CLAVE=A
- 329.- AUTORES: A. M. Lamsabhi, O. M3, M. Y3nez, J. Tortajada, and J-Y Salpin.  
 TITULO: *Unimolecular reactivity of Uracil- $Cu^{2+}$  complexes in the Gas-Phase*  
 REF. REVISTA: ChemPhysChem **8**, 181 (2007.) CLAVE=A
- 330.- AUTORES: J.Z. D3valos, R. Herrero, J.L.M. Abboud, O. M3, and M. Y3nez.  
 TITULO: *How can a carbon atom be covalently bound to five ligands?. The case of  $Si_2(CH_3)_7^+$  or the beauty of symmetry.*  
 REF. REVISTA: Angew. Chem. Int. Ed. **46**, 381 (2007) CLAVE=A
- 331.- AUTORES: J. Del Bene, J. Elguero, I. Alkorta, M. Y3nez, and O. M3.  
 TITULO: *Attacking Boron Nucleophiles: NMR Properties of 5-membered Diazaborole Rings.*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **111**, 419 (2007) CLAVE=A
- 332.- AUTORES: M. Esseffar, R. Herrero, E. Quintanilla, J.Z. D3valos, , J.L.M. Abboud, M. Y3nez, and O. M3.  
 TITULO: *Activation of the disulfide bond and chalcogen-chalcogen interactions. An experimental (FT-ICR) and computational study .*  
 REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **13**, 1796 (2007) CLAVE=A
- 333.- AUTORES: J. Del Bene, O. M3, M. Y3nez, I. Alkorta, and J. Elguero.  
 TITULO: *Spin-Spin Coupling Constants for Iminoboranes RBNH, HBNR, and RBNR and Comparisons with Corresponding Isoelectronic Acetylenes RCCH and RCCR, for R = H, CH<sub>3</sub>, NH<sub>2</sub>, OH, and F.*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **3**, 549 (2007) CLAVE=A
- 334.- AUTORES: E. Rinc3n, O. M3, A. Toro-Labb3, and M. Y3nez.  
 TITULO: *Effect of Ni(II), Cu(II) and Zn(II) association on the keto-enol tautomerism of thymine.*  
 REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **9**, 2531 (2007) CLAVE=A
- 335.- EDITORS: O. M3, M. Y3nez.  
 TITULO: *Special Issue on "COMPUTATIONAL ORGANIC CHEMISTRY"*  
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM, **811** (2007) CLAVE=L
- 336.- AUTORES: O. M3, M. Y3nez, J-Y Salpin, and J. Tortajada.  
 TITULO: *Thermochemistry, Bonding and Reactivity of  $Ni^+$  and  $Ni^{2+}$  in the gas phase*  
 REF. REVISTA: Mass Spectrom. Rev. **26**, 474-516 (2007) CLAVE=A
- 337.- AUTORES: C. Trujillo, O. M3, M. Y3nez, J-Y Salpin, and J. Tortajada.  
 TITULO: *Gas-Phase Reactions between Thiourea and  $Ca^{2+}$ . New evidences for the formation of  $[Ca(NH_3)]^{2+}$  and other doubly charged species*  
 REF. REVISTA: ChemPhysChem **8**, 1330 (2007) CLAVE=A
- 338.- AUTORES: P. Sanz, O. M3, M. Y3nez, and J. Elguero  
 TITULO: *Resonance-assisted hydrogen bonds: A critical examination. Structure and stability of the enols of beta-diketones and beta-enaminones*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **111**, 3585 (2007) CLAVE=A

- 339.- AUTORES: C. Trujillo, O. Mó, M. Yáñez.  
TITULO *A Theoretical Study of hydration effects on the Prototropic Tautomerism of Selenouracils.*  
REF. REVISTA: Org. Biomol. Chem. **5**, 3092 (2007) CLAVE=A
- 340.- AUTORES: P. Sanz, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero  
TITULO: *Non-resonance-assisted hydrogen bonding in hydroxymethylene and aminomethylene cyclobutanones and cyclobutenones and their nitrogen counterparts*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **8**, 1950 (2007) CLAVE=A
- 341.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, A. Martín-Pendás, I. Alkorta, J. Elguero, and J. Del Bene  
TITULO: *Unusual substituent effects on the bonding of iminoboranes.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **9**, 3970 (2007) CLAVE=A
- 342.- AUTORES: A. Luna, O. Mó, M. Yáñez, J.C. Guillemin, J.F. Gal, and P.C. Maria.  
TITULO *Cyano substituent effects on enol and enethiol acidity and basicity: the protonation and deprotonation of 3-hydroxy-2-propenenitrile and its thio analogue.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom. **267**, 125 (2007) CLAVE=A
- 343.- AUTORES: R. Caballol and M. Yáñez,  
TITULO *Quantum Chemistry Methods.I.-Wave Function-Based Methods.* Theoretical and Computational Chemistry: Foundations, Methods and Techniques. Ed. J. Andrés and J. Bertran.  
REF. REVISTA: CienciasExperimentals 11, 155-220 . Univ. Jaume I (2007) CLAVE=CL
- 344.- AUTORES: J.A. Gámez, J.C. Guillemin, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Strong Dissimilarities between the Gas-Phase Acidities of Saturated and  $\alpha,\beta$ -Unsaturated Boranes and the corresponding Alanes and Gallanes.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **14**, 2201 (2008) CLAVE=A
- 345.- AUTORES: A. M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez, J. Tortajada, and J-Y Salpin.  
TITULO: *Ni<sup>+</sup> reactions with aminoacetonitrile, a potential pre-biological molecule precursor of glycine.*  
REF. REVISTA: J. Mass Spectrom. **43**, 317 (2008) CLAVE=A
- 346.- AUTORES: P. Sanz, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero  
TITULO: *Bonding in Tropolone, 2-Aminotropone and Aminotropoimine. No evidence of Resonance Assisted Hydrogen Bonding..*  
REF. REVISTA: Chem Eur. J. **14**, 4225 (2008) CLAVE=A
- 347.- AUTORES: C. Trujillo, O. Mó, M. Yáñez, J. Tortajada, and J-Y Salpin.  
TITULO: *Selenourea-Ca<sup>2+</sup> Reactions in the Gas-Phase. Similarities and dissimilarities with urea and thiourea..*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. B. **112**, 5479 (2008) CLAVE=A
- 348.- AUTORES: A. Medina, C.G. Claessens, G.M. Aminur Rahman, A.M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez, D.M. Guldi and T. Torres.  
TITULO: *Accelerating charge transfer in a triphenylamine-subphthalocyanine donor-acceptor system.*  
REF. REVISTA: Chem. Comm. **15**, 1759 (2008) CLAVE=A
- 349.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and R. Boyd.



- TITULO: *Gas-phase Interactions of Calcium ( $Ca^{2+}$ ) with Seleno Derivatives of Uracil*  
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **4**, 1002 (2008) CLAVE=A
- 350.- AUTORES: C. Trujillo, A.M. Lamsabhi, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The importance of the oxidative character of doubly charged metal cations in binding neutral bases.  $[Urea-M]^{2+}$  and  $[Thiourea-M]^{2+}$  ( $M = Mg, Ca, Cu$ ) Complexes.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **10**, 3229 (2008) CLAVE=A
- 351.- AUTORES: C. Trujillo, O. Mó, M. Yáñez  
TITULO: *Why are selenouracils as basic as but stronger acids than uracil in the gas phase?*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **9**, 1715 (2008) CLAVE=A
- 352.- AUTORES: A. Cimas, J.A. Gámez, O. Mó, M. Yáñez and J. Y. Salpin  
TITULO: *Computational study on the kinetics of the reaction between  $Ca^{2+}$  and urea.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **456**, 156 (2008) CLAVE=A
- 353.- AUTORES: C. Trujillo, O. Mó, M. Yáñez and B. Silvi  
TITULO: *On the Bonding of selenocyanates and isoselenocyanates and their protonated derivatives*  
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comput. **4**, 1593 (2008) CLAVE=A
- 354.- AUTORES: M. Yáñez, O. Mó, I. Alkorta and J. E. Del Bene  
TITULO: *Structures, bonding, and one-bond B-N and B-H spin-spin coupling constants for a series of neutral and anionic five-membered rings containing BN bonds*  
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comput. **11**, 1869 (2008) CLAVE=A
- 355.- AUTORES: A. Eizaguirre, O. Mó, M. Yáñez and J.-C. Guillemin  
TITULO:  *$\alpha,\beta$ -unsaturated and saturated derivatives of Be, Mg and Ca. Are they carbon or metal acids in the gas phase?*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **14**, 10423 (2008) CLAVE=A
- 356.- AUTORES: A. Eizaguirre, M. Yáñez, J. Tortajada and J.-Y. Salpin  
TITULO:  *$Sr^{2+}$ -neutral molecules interactions. An Assessment of Theoretical Procedure*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **464**, 240 (2008) CLAVE=A
- 357.- AUTORES: M. Hurtado, J. G. Contreras, A. Matamala, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Conformational analysis, NMR properties and nitrogen inversion of N-substituted 1,3-oxazines.*  
REF. REVISTA: New J. Chem. **32**, 2209 (2008) CLAVE=A
- 358.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez, J.-Y. Salpin, V. Haldys, J. Tortajada, and J.-C. Guillemin.  
TITULO:  *$Ni^+$  Reactions with Aminoacrylonitrile, A Species of Potential Astrochemical Relevance*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **112**, 8046 (2008) CLAVE=A
- 359.- AUTORES: C. Trujillo, A. M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J.-Y. Salpin.  
TITULO: *Interaction of  $Ca^{2+}$  with uracil and its thio derivatives in the gas phase*  
REF. REVISTA: Org. Biomol. Chem., **6**, 3695 (2008) CLAVE=A
- 360.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, O. Mó, S. Gutierrez-Oliva, P. Perez, A. Toro-Labbé, and M. Yáñez.

- TITULO: *The mechanism of double proton transfer in dimers of uracyl and 2-thiouracyl The reaction force perspective.*  
REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **30**,389-398 (2009) CLAVE=A
- 361.- AUTORES: P.Sanz, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero  
TITULO: *The effects of C by N replacement on the hydrogen bonding of malonaldehyde: N-formylformimidic acid, N-(hydroxymethyl)formamide and related compounds*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **11**, 762 (2009) CLAVE=A
- 362.- AUTORES: M. Hurtado, M. Yáñez, R. Herrero, A. Guerrero, J. Z. Dávalos, J.-L. M. Abboud, B. Khater and J.-C. Guillemin  
TITULO: *The Ever-Surprising Chemistry of Boron: Enhanced Acidity of Phosphine-Boranes*  
REF. REVISTA: Chem. Eur J. **15**, 4622 (2009) CLAVE=A
- 363.- AUTORES: J. M. Saá and M. Yáñez  
TITULO: *On the "Gluing" Effect of Lithium: the Lithium-driven Assembly of circumarranged, Edge-fused Cyclopentadienyl Lithium Compounds and Aza Analogues.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **15**, 3123 (2009)
- 364.- AUTORES: M. Hurtado, O. Mó, M. Yáñez and J.-C. Guillemin.  
TITULO: *Acidity enhancement of the cyclopentadiene cycle by PH<sub>2</sub> and AsH<sub>2</sub> substitution*  
REF. REVISTA: Croat. Chim. Acta. **82**, 1 (2009) CLAVE=A
- 365.- AUTORES: J. E. Del Bene, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Substituent effects on B-N bonding and coupling constants in five-membered rings N<sub>3</sub>B<sub>2</sub>H<sub>4</sub>X and N<sub>2</sub>B<sub>3</sub>H<sub>4</sub>X, X = H, F, and Li*  
REF. REVISTA: Croat. Chim. Acta. **82**, 149 (2009) CLAVE=A
- 366.- AUTORES: P. López-Tarifa, F. Martín, M. Yáñez and M. Alcamí  
TITULO: *Theoretical study of doubly charged X(H<sub>2</sub>O) and X(NH<sub>3</sub>) (X=Si, Ge, Sn, Pb) molecular ions.*  
REF. REVISTA: Croat. Chim. Acta. **82**, 129 (2009) CLAVE=A
- 367.- AUTORES: J. E. Del Bene, M. Yáñez, I. Alkorta and J. Elguero  
TITULO: *An ab initio study of the structures and selected properties of 1,2-dihydro-1,2-azaborine and related molecules.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comput. **5**, 2239 (2009) CLAVE=A
- 368.- AUTORES: M. Hurtado, M. Yáñez and J.-C. Guillemin.  
TITULO: *Enhanced Acidity of cyclopenta-2,4-dienylborane and its Al and Ga analogues. The role of aromatization.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. , **11**, 8759-8766 (2009)
- 369.- AUTORES: I. Alkorta, J. E. Del Bene, J. Elguero, O.Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *A theoretical study of diborenes HRB=BRH for R = CO, NH<sub>3</sub>, OH<sub>2</sub> PH<sub>3</sub>, SH<sub>2</sub>, ClH: Structures, energies and spin-spin coupling constants.*  
REF. REVISTA: Theoret. Chem. Acc. **124**, 186-195 (2009) CLAVE=A
- 370.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, M. Yáñez, J.-Y. Salpin, J. Tortajada.

- TITULO: *Gas-phase chemistry of organocopper compounds.*  
 REF. REVISTA: The Chemistry of organocopper compounds. pg. 279-346. Ed. Z. Rappoport and I. Marek. J.Wiley & Sons. (2009) CLAVE=CL
- 371.- AUTORES: P.Sanz, M. Yáñez, O.Mó, I. Alkorta, and J. Elguero.  
 TITULO: *Beryllium bonds, do they exist?*  
 REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **5**, 2763-2771 (2009) CLAVE=A
- 372.- AUTORES: A. Benidar, B. Khater, J.C. Guillemin, J.A. Gámez, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Gas Phase Infrared Spectra of Vinyselenol and Vinyltellurol*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **113**, 12857-12863 (2009) CLAVE=A
- 373.- AUTORES: M. Esseffar, A. El Firdoussi, W. Bouab, J.L.M. Abboud, O. Mo, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Combined Experimental and Theoretical Study on Hydrogen-Bonded Complexes between Cyclic Ketones, Lactones and Lactams and 3,4-Dinitrophenol*  
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **113**, 14711-14717 (2009) CLAVE=A
- 374.- AUTORES: José A. Gámez, Luis Serrano-Andrés and Manuel Yáñez.  
 TITULO: *Electron capture activation of the disulfide bond. The role of the asymmetry and electronegativity.*  
 REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **12**, 1042-1050 (2010) CLAVE=A
- 375.- AUTORES: I. Corral, C.Trujillo, J.-Y. Salpin and M. Yáñez.  
 TITULO: *Ca<sup>2+</sup> reactivity in the gas phase. . Bonding, catalytic effects and coulomb explosions.*  
 REF. REVISTA: Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics. Vol. 12 Kinetics and Dynamics: From Nano- to Bio-Scale. Eds. P. Paneth and A.Dybala-Defratyka. Springer. London (2010) CLAVE=CL
- 376.- AUTORES: M. Hurtado, A.M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J.-C. Guillemin.  
 TITULO: *Are cyclopentadienylberyllium, magnesium and calcium hydrides carbon or metal acids in the gas phase?*  
 REF. REVISTA: Dalton Trans. **39**, 4593-4601 (2010) CLAVE=A
- 377.- AUTORES: José A. Gámez, Luis Serrano-Andrés and Manuel Yáñez.  
 TITULO: *Asymmetry and Non-Adiabaticity in Fragmentation of Disulfide Bonds upon Electron Capture.*  
 REF. REVISTA: ChemPhysChem **10**, 2530-2538 (2010) CLAVE=A
- 378.- AUTORES: M. Hurtado, O. Mó and M. Yáñez.  
 TITULO: *Homoselenocisteina. An Oxygen or a Selenium acid in the gas-phase?*  
 REF. REVISTA: Can. J. Chem. **88**, 744-753 (2010) CLAVE=A
- 379.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, O. Mó, and M. Yáñez.  
 TITULO: *Serine-Ca<sup>2+</sup> vs. Serine-Cu<sup>2+</sup> complexes. A theoretical perspective.*  
 REF. REVISTA: Can. J. Chem. **88**, 759-768 (2010) CLAVE=A
- 380.- AUTORES: Alvaro Cimas, Inés Corral, Otilia Mó, Manuel Yáñez and Nazario Martín.  
 TITULO: *Hydrogen bonding in electronically excited states: A comparison between formic acid dimer and its mono-substituted thioderivatives.*  
 REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **12**, 13037-46 (2010) CLAVE=A

- 381.- AUTORES: José A. Gámez, Inés Corral, Otilia Mó and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Unexpected gas-phase ion chemistry results unraveled by computational chemistry.*  
REF. REVISTA: *Current Org. Chem.* **14**, 1600-1611 (2010) CLAVE=A
- 382.- AUTORES: Ibon Alkorta, José Elguero, Janet E. Del Bene, Otilia Mó, and Manuel Yáñez,  
TITULO: *New insights into factors influencing B-N bonding in  $X:BH_{3-n}F_n$  and  $X:BH_{3-n}Cl_n$  for  $X=N_2$ , HCN, LiCN,  $H_2CNH$ ,  $NF_3$ ,  $NH_3$  and  $n = 0-3$ : The importance of deformation.*  
REF. REVISTA: *Chem. Eur. J.* **16**, 11897-11905 (2010) CLAVE=A
- 383.- AUTORES: A. Benidar, R. Georges, J-C. Guillemin, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Infrared Spectra of a Species of Potential Prebiotic and Astrochemical Interest: Cyanoethenethiol (HS-CH=CH-CN).*  
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. A* **114**, 9583-9588 (2010) CLAVE=A
- 384.- AUTORES: José A. Gámez and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Asymmetry and Electronegativity in the electron capture activation of the Se-Se bond:  $\sigma^*(Se-Se)$  vs  $\sigma^*(Se-X)$ .*  
REF. REVISTA: *J. Chem. Theor. Comp.* **6**, 3102-3112 (2010) CLAVE=A
- 385.- AUTORES: A. Gonzalez-Castrillo, M. Hurtado, O. Mó, M. Yáñez, and J.C. Guillemin.  
TITULO: *The role of hyperconjugative  $\pi$ -aromaticity on the enhanced acidity of  $CpXH_3$  ( $X = C, Si, Ge$ ) derivatives.*  
REF. REVISTA: *Mol. Phys.* **108**, 2467-2476 (2010) CLAVE=A
- 386.- AUTORES: Janet E. Del Bene, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez,  
TITULO: *Structural and Electronic Effects on One-bond Spin-spin Coupling Constants  $^1J(B-N)$ ,  $^1J(B-H)$ ,  $^1J(B-F)$  for Complexes of Nitrogen Bases with  $BH_3$  and its Fluoro-substituted Derivatives.*  
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. A*, **114**, 12775-12779 (2010) CLAVE=A
- 387.- AUTORES: A. Eizaguirre, O.Mó, M. Yáñez and R.J. Boyd  
TITULO: *Effect of  $Sr^{2+}$  association on the tautomerization processes of uracil and its dithio- and diseleno-derivatives.*  
REF. REVISTA: *Org. Biomol. Chem.* **9**, 423-431 (2011) CLAVE=A
- 388.- AUTORES: Otilia Mó and Manuel Yáñez.  
TITULO: *La Química Computacional en la Nueva Frontera.*  
REF. REVISTA: *Arbor* **187**, 143-155 (2011) CLAVE=A
- 389.- AUTORES: A. Eizaguirre, A.M. Lamsabhi, O.Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Assisted Intramolecular Proton Transfer in  $(uracil)_2Ca^{2+}$  complexes*  
REF. REVISTA: *Theor. Chem. Acc.* **128**, 457-464 (2011) CLAVE=A
- 390.- AUTORES: I. Corral, A. Palacios, and M. Yáñez.  
TITULO: *On the stability and lifetime of  $GaO^{2+}$  in the gas phase.*  
REF. REVISTA: *Theor. Chem Acc.* **129**, 401-407 (2011) CLAVE=A
- 391.- AUTORES: Otilia Mó and Manuel Yáñez.  
TITULO: *La Química Cuántica o la larga travesía del desierto*  
REF. REVISTA: *Gaceta de la RSEM* **14**, 229-246 (2011) CLAVE=A

- 392.- AUTORES: José A. Gámez and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Is Se-Se bond cleavage the most favourable process in electron attachment to diselenides? The importance of asymmetry.*  
REF. REVISTA: Chem. Comm. **47**, 3939-3941 (2011) CLAVE=A
- 393.- AUTORES: José A. Gámez, Luis Serrano-Andrés, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Two and Three State Conical Intersections in the Electron Capture Dissociation of Disulfides: The importance of Multireference Calculations.*  
REF. REVISTA: Int. J. Quant. Chem. **111**, 3316-3323 (2011) CLAVE=A
- 394.- AUTORES: José A. Gámez and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Electron attachment to diselenides revisited: Se-Se bond cleavage is neither adiabatic nor the most favorable process.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp **7**, 1726-1735 (2011) CLAVE=A
- 395.- AUTORES: I. Corral, and M. Yáñez.  
TITULO: *[ML<sub>n</sub>]<sup>2+</sup> doubly charged systems. Modeling, bonding, lifetimes and unimolecular reactivity.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. (perspective article) **13**, 14848-14864 (2011)  
CLAVE=A
- 396.- AUTORES: C. Trujillo, A. M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J.-Y. Salpin.  
TITULO: *Unimolecular Reactivity upon collision of Uracil-Ca<sup>2+</sup> complexes in Gas Phase: Comparison with uracil-M<sup>+</sup> (M= H, alkali metals) and uracil-M<sup>2+</sup> (M=Cu, Pb) systems.*  
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom. **306**, 27-36 (2011). CLAVE=A
- 397.- AUTORES: I. Corral, A. Palacios, and M. Yáñez.  
TITULO: *Electronic structure and lifetimes of GaX<sup>2+</sup> (X= N, O, F) in the gas phase. Unraveling stability trends.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **13**, 18365-18372 (2011) CLAVE=A
- 398.- AUTORES: A. Eizaguirre, O.Mó, M. Yáñez and J-Y. Salpin.  
TITULO: *Modeling the interaction between peptide functions and Sr<sup>2+</sup>: Formamide- Sr<sup>2+</sup> reactions in the gas phase*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **13**, 18409-18417 (2011) CLAVE=A
- 399.- AUTORES: M. Hurtado, A-M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J-C. Guillemin.  
TITULO: *Stability trends and tautomerization of chalcocyclopentadienes. The role of aromaticity.*  
REF. REVISTA: New J. of Chem. **35**, 2713-2719 (2011) CLAVE=A
- 400.- AUTORES: A-M. Lamsabhi, M. Yáñez, O. Mó, C. Trujillo, F. Blanco, I. Alkorta, J. Elguero, E. Caballero, M.S. Rodríguez-Morgade, CG. Claessens and T. Torres.  
TITULO: *TDDFT study of the UV-vis spectra of subporphyrazines and subphthalocyanines*  
REF. REVISTA: Journal of Porphyrins and Phthalocyanines **15**, 1220-1230 (2011) CLAVE=A
- 401.- AUTORES: I. Corral, A.M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Infrared spectra of charge-solvated vs. salt-bridge conformations of glycine-, serine- and cisteine-Ca<sup>2+</sup> complexes.*

- REF. REVISTA: Int. J. Quant. Chem. **112**, 2126-2134 (2012) CLAVE=A
- 402.- AUTORES: M. Hurtado, A-M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J-C. Guillemin.  
TITULO: *On the origin of the enhanced acidity of chalcocyclopentadienes(cyclopentadiene-chalcogenols) in the gas phase.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **13**, 1167-1172 (2012), Inside cover, VIP, CLAVE=A
- 403.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, I. Corral, P. Perez, O. Tapia and M. Yáñez.  
TITULO: *Oxygenation of the phenylhalocarbenes. Are they spin allowed or spin forbidden reactions?*  
REF. REVISTA: J. Molecular Modeling 182813-182821 (2012) CLAVE=A
- 404.- AUTORES: Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, José Elguero.  
TITULO: *Modulating the strength of hydrogen bonds through beryllium bonds.*  
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **8**, 2293-2300 (2012) CLAVE=A
- 405.- AUTORES: Goar Sanchez-Sanz, Ibon Alkorta, José Elguero, Manuel Yáñez, Otilia Mó.  
TITULO: *Strong interactions between copper halides and unsaturated systems: new metallocycles? or the importance of deformation.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **14**, 11468-11477 (2012) CLAVE=A
- 406.- AUTORES: A. Eizaguirre, M. Yáñez and L. Erikson.  
TITULO: *Stability and iron coordination in DNA adducts of anthracycline based anti-cancer drugs.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **14**, 12505-12514 (2012) CLAVE=A
- 407.- AUTORES: A. Eizaguirre, O.Mó, M. Yáñez, J-Y. Salpin and J. Tortajada.  
TITULO: *Modelling peptide-metal dication interactions: Formamide-Ca<sup>2+</sup> reactions in the Gas Phase.*  
REF. REVISTA: Org. Biomol. Chem. **10**, 7552-7561 (2012) CLAVE = A
- 408.- AUTORES: A. Martin-Somer, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Unexpected Acidity Enhancement Triggered by AlH<sub>3</sub> Association to Phosphines.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem A. **116**, 6950-6954 (2012) CLAVE=A
- 409.- AUTORES: A. Martin-Somer, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *The importance of deformation on the strength of berillium bonds.*  
REF. REVISTA: Comp and Theoret. Chem. **998**, 74-79 (2012) CLAVE=A
- 410.- AUTORES: Laura Albrecht, Russell J. Boyd, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Cooperativity between Hydrogen bonds and beryllium bonds in (H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>BeX<sub>2</sub> (n =1-3, X = H, F) complexes. A new perspective.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **14**, 14540-14547 (2012) CLAVE=A
- 411.- AUTORES: A. Martin-Somer, A-M. Lamsabhi, M. Yáñez, J.Z. Davalos, J. Gonzalez, R. Ramos, and J-C. Guillemin.  
TITULO: *Can an amine be a stronger acid than a carboxylic acid? The surprisingly high acidity of amine-borane complexes.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **18**, 15699-15705 (2012) CLAVE=A
- 412.- AUTORES: M. M. Vallejos, A-M. Lamsabhi\*, N. M. Peruchena, O. Mó and M. Yáñez

- TITULO: *Microsolvation of Morpholine, a bidentate base. The importance of cooperativity*  
REF. REVISTA: J.Phys. Org. Chem. **25**, 1380-1390 (2012) CLAVE=A
- 413.- AUTORES: M. Montero-Campillo, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Alkyl Mercury Compounds: An Assessment of DFT Methods*  
REF. REVISTA: Theoret. Chem. Acc. **132**, 1328-8 (2013) CLAVE=A
- 414.- AUTORES: R. Verzeni, O. Mó, A. Cimas, I. Corral and M. Yáñez  
TITULO: *MS-CASPT2 study of the low-lying electronic excited states of di-thiosubstituted formic acid dimers*  
REF. REVISTA: Theoret. Chem. Acc. **132**, 1338-8 (2013) CLAVE=A
- 415.- AUTORES: Gavin S. Heverly-Coulson, Russell J. Boyd, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Revealing unexpected mechanisms for nucleophilic attack on S-S and Se-Se bridges.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **19**, 3629-3638 (2013) CLAVE=A
- 416.- AUTORES: A. Eizaguirre, O.Mó, M. Yáñez and J-Y. Salpin.  
TITULO: *Unimolecular reactivity of the [Urea-Sr]<sup>2+</sup> complex, a metastable dication in the gas phase: An experimental and theoretical perspective.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. B **117**, 2088-2095 (2013) CLAVE=A
- 417.- AUTORES: M. Montero-Campillo, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *UV-Vis Spectra Of Subporphyrazines And Subphthalocyanines with Aluminum And Gallium: A Time Dependent-DFT Study.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **14**, 915-922 (2013) CLAVE=A
- 418.- AUTORES: Oriana Brea, Manuel Yáñez, Otilia Mó, and Al Mokhtar Lamsabhi.  
TITULO: *On the stability of [(uracil)<sub>2</sub>-Cu]<sup>2+</sup> complexes in the gas phase. Different pathways for the formation of [(uracil-H)(uracil)-Cu]<sup>+</sup> monocations.*  
REF. REVISTA: Org. Biomol. Chem., **11**, 3862-3870 (2013) CLAVE=A
- 419.- AUTORES: Cristina Trujillo, Goar Sánchez-Sanz, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez,  
TITULO: *Resonance assisted hydrogen bonds in open-chain and cyclic structures of malonaldehyde enol: A theoretical study.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. **1048**, 138-151 (2013) CLAVE=A
- 420.- AUTORES: M. Montero-Campillo, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez  
TITULO: *Modulating weak intramolecular interactions through the formation of beryllium bonds: complexes between squaric acid and BeH<sub>2</sub>.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Mod. **19**, 2759-2766 (2013) CLAVE=A
- 421.- AUTORES: Manuel Yáñez, Otilia Mó, Ibon Alkorta, José Elguero.  
TITULO: *Can conventional Bases and Unsaturated Hydrocarbons be converted into gas-phase Superacids that are stronger than most of the known Oxyacids?The role of Berillium Bonds.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **19**, 11637-11643 (2013) CLAVE=A
- 422.- AUTORES: M. Hurtado, M. Monte-Caballero, A-M. Lamsabhi, M. Yáñez, O. Mó and J-Y Salpin.  
TITULO: *Modelling interactions between an aminoacid and a metal dication: cysteine-Ca(II) reactions in the gas phase..*

- REF. REVISTA: ChemPlusChem **78**, 1124-1133 (2013), CLAVE=A
- 423.- AUTORES: A.C. Marele, I. Corral, P. Sanz, M.R. Mas-Ballesté, F. Zamora, M. Yáñez and J.M. Gómez-Rodríguez.  
TITULO: *Some pictures of alcoholic dancing: From simple to complex hydrogen-bonded networks based on polyalcohols*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. C **117**, 4680-4690 (2013) CLAVE=A
- 424.- AUTORES: Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, and José Elguero.  
TITULO: *Enhancing and modulating the intrinsic acidity of imidazole and pyrazol through Beryllium bonds.*  
REF. REVISTA: J. Mol. Mod. **19**, 4139-4145 (2013) CLAVE=A
- 425.- AUTORES: Gavin S. Heverly-Coulson, Russell J. Boyd, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Dramatic substituent effects on the mechanisms of nucleophilic attacks on Se-S bridges.*  
REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **34**, 2537-2547 (2013) CLAVE=A
- 426.- AUTORES: A-M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J-C. Guillemin.  
TITULO: *Conformational preferences of RCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CN (R= CH<sub>3</sub>, F, Cl) cyanides and their corresponding isocyanides.*  
REF. REVISTA: Struct. Chem. **24**, 1789-1798 (2013), CLAVE=A
- 427.- AUTORES: A. Benidar, R. Georges, J-C. Guillemin O. Mó and M. Yáñez.  
TITULO: *Infrared Spectra of Cyanoacetaldehyde (NCCH<sub>2</sub>CHO): A Potential Prebiotic compound of Astrochemical Interest.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **14**, 2764-2771 (2013), CLAVE=A
- 428.- AUTORES: Manuel Yáñez, Otilia Mó, Ibon Alkorta, and José Elguero.  
TITULO: *Spontaneous ion-pair formation in the gas phase induced by Beryllium bonds*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **590**, 22-26 (2013) CLAVE=A
- 429.- AUTORES: José A. Gámez, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *[FAAF]<sup>-</sup> (A = O, S, Se, Te) or How Electrostatic Interactions Influence the Nature of the Chemical Bond*  
REF. REVISTA: J. Chem.Theory. Comp. **11**, 5211-5215 (2013)CLAVE=A
- 430.- AUTORES: M. Hurtado, A-M. Lamsabhi, M. Yáñez, and O. Mó.  
TITULO: *Complexation of Ca<sup>2+</sup> with Selenocysteine and effects on its intrinsic acidity*  
REF. REVISTA: Arkivoc **ii**, 207-223 (2014), CLAVE=A
- 431.- AUTORES: Ibon Alkorta, José Elguero, Manuel Yáñez, and Otilia Mó.  
TITULO: *Cooperativity in Beryllium Bonds*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **16**, 4305-4312 (2014) CLAVE=A
- 432.- AUTORES: A. Benidar, M. Montero-Campillo, A-M. Lamsabhi, O. Mó, J-C. Guillemin and M. Yáñez.  
TITULO: *On the Structures, lifetimes, and Infrared Spectra of Alkyl Mercury Hydrides.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **15**, 530-541 (2014), CLAVE=A
- 433.- AUTORES: Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, and José Elguero.  
TITULO: *Spontaneous proton transfers induced by Beryllium bonds*



- REF. REVISTA: Mol. Phys. **112**, 592-600 (2014) CLAVE=A
- 434.- AUTORES: F. Aguilar-Galindo, M. Montero-Campillo, M. Yáñez, and O. Mó  
TITULO: *On the Stability of [Pb(Proline)]<sup>2+</sup> Complexes. Reconciling Theory with Experiment.*  
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **598**, 91-95 (2014) CLAVE=A
- 435.- AUTORES: M. Montero-Campillo, M. Yáñez, A-M. Lamsabhi, and O. Mó  
TITULO: *Spontaneous H<sub>2</sub> Loss through the Interaction of Squaric Acid Derivatives and BeH<sub>2</sub>*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **20**, 5309-5316 (2014) CLAVE=A
- 436.- AUTORES: A. Martin-Somer, MP. Gaigeot, M. Yáñez and R. Spezia.  
TITULO: *RRKM study and DFT assessment on gas-phase fragmentation of formamide-M<sup>2+</sup> (M=Ca, Sr).*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **16**, 14813-14825 (2014) CLAVE=A
- 437.- AUTORES: Laura Albrecht, Russell J. Boyd, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Changing weak halogen bonds into strong ones through cooperativity with beryllium bonds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **118**, 4205-4213(2014) CLAVE=A
- 438.- AUTORES: K. Lemishko, M. Montero-Campillo, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *The Behavior of Carboxylic Acids Upon Complexation With Beryllium Compounds.*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **118**, 5720-5726 (2014) CLAVE=A
- 439.- AUTORES: A. Martin-Somer, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *Are Boryl radicals from amine- and phosphine-boranes the most stable radicals?.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **15**, 2288- 2294 (2014) CLAVE=A
- 440.- AUTORES: E. Fernandez Villanueva, O. Mó, and M. Yáñez.  
TITULO: *On the existence and Characteristics of  $\pi$ -Berilium bonds.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **16**, 17531- 17536 (2014) CLAVE=A
- 441.- AUTORES: A. Martin-Somer, M. Yáñez, MP. Gaigeot, and R. Spezia.  
TITULO: *Unimolecular Fragmentation Induced by Low-Energy Collisions: Statistically or Dynamically Driven?*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **118**, 10882-10893 (2014) CLAVE=A
- 442.- AUTORES: M. Hurtado, O. Mó, M. Yáñez, B. Herrera, and A-M. Lamsabhi.  
TITULO: *New insights into the gas-phase unimolecular fragmentations of [Cysteine-Ca]<sup>2+</sup> complexes.*  
REF. REVISTA: COMPTC **1047**, 38-46 (2014) CLAVE=A
- 443.- AUTORES: Julia Guilleme, Lara Martínez-Fernández, David González-Rodríguez, Inés Corral, Manuel Yáñez, and Tomás Torres.  
TITULO: *An Insight into the Mechanism of the Axial Ligand Exchange Reaction in Boron Subphthalocyanine Macrocycles.*  
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **136**, 14289-14298 (2014) CLAVE=A
- 444.- AUTORES: A. Martin-Somer, M.M. Montero-Campillo, O. Mó, M. Yáñez, I. Alkorta and J. Elguero.

- TITULO: *Some Interesting Features of Non-Covalent Interactions*  
REF. REVISTA: Croat Chem.Acta. **87**, 291-306 (2014) CLAVE=A
- 445.- AUTORES: Kathy J. Chen, Otilia Mó, Manuel Yáñez, and Inés Corral  
TITULO: *Can transition metals and group II mono- and dications discriminate between homo- and heterochiral XYYX' dimers (X,X'=H,Me; Y=O,S,Se)?*  
REF. REVISTA: Croat Chem.Acta. **87**, 481-493 (2014) CLAVE=A
- 446.- AUTORES: Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, Manuel Yáñez, and Janet E. Del Bene.  
TITULO: *Using Beryllium Bonds to Change Halogen Bonds From Traditional to Chlorine-shared to Ion-pair.*  
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **17**, 2259-2267 (2015) CLAVE=A
- 447.- AUTORES: A. Martin-Somer, O. Mó, M. Yáñez and JC Guillemin.  
TITULO: *Acidity enhancement of unsaturated bases of group 15 by association with borane and beryllium dihydride. Unexpected boron and beryllium Bronsted acids.*  
REF. REVISTA: Dalton Trans. **44**, 1193-1202 (2015) DOI:10.1039/c4dt02292k CLAVE=A
- 448.- AUTORES: Marta Marín-Luna, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Interplay in BeR<sub>2</sub>:C<sub>6</sub>X<sub>6</sub>:Y(-) complexes (R=H, F and Cl, X=H and F, and Y=Cl and Br).*  
REF. REVISTA: Molecules **20**, 9961-9976 (2015) CLAVE=A
- 449.- AUTORES: Oriana Brea, Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, José Elguero.  
TITULO: *Creating  $\sigma$ -holes trough the formation of berillium bonds.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **21**, 12676-12682 (2015) CLAVE=A
- 450.- AUTORES: J-F. Gal, M. Yáñez, O. Mó,  
TITULO: *The aluminum mono-cation basicity and affinity scales.*  
REF. REVISTA: Eur. J. Mass Spectr. **21**, 517-532 (2015) CLAVE=A
- 451.- AUTORES: Marta Marín-Luna, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Simultaneous Aromatic-Beryllium Bonds and Aromatic-Anion Interactions: Naphthalene and Pyrene as Models of Fullerenes, Carbon Single-Walled Nanotubes (SWNTs) and Graphene.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **16**, 2680-2686 (2015) CLAVE=A
- 452.- AUTORES: A-M. Lamsabhi, S. Gutierrez-Oliva, O. Mó, A. Toro-Labbé and M. Yáñez  
TITULO: *Effects of the Ionization in the Tautomerism of Uracil: A Reaction Electronic Flux Perspective.*  
REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **36**, 2135-2145 (2015) CLAVE=A
- 453.- AUTORES: Oriana Brea, Manuel Yáñez, Otilia Mó, and Al Mokhtar Lamsabhi.  
TITULO: *Why is the spontaneous deprotonation of [(Uracil)<sub>2</sub>Cu]<sup>2+</sup> Complexes accompanied by an enolization of the system?*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **16**, 2375-2382 (2015) CLAVE=A
- 454.- AUTORES: Oriana Brea, Otilia Mó, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Ga<sup>+</sup> Basicity and Affinity Scales Based on High-Level Ab Initio Calculations.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **16**, 2306-2313 (2015) CLAVE=A
- 455.- AUTORES: Julia Guilleme, Lara Martínez-Fernández, Inés Corral, Manuel Yáñez, David

- González-Rodríguez, and Tomás Torres.  
TITULO: *Direct Access to Axial Substituted Subphthalocyanines from Trimethylsilyl-Protected Nucleophiles.*  
REF. REVISTA: Organic Lett. **17**, 4722-4725 (2015) CLAVE=A
- 456.- AUTORES: Kateryna Mykolayivna-Lemishko, Giovani Bistoni, Leonardo Belpassi, Francesco Tarantelli, M. Merced Montero-Campillo and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Charge Transfer in Beryllium Bonds and Cooperativity of Beryllium and Halogen Bonds. A new Perspective.*  
REF. REVISTA: Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics. Applications of Topological Methods in Molecular Chemistry. Invited Chapter. 461-489. R. Chauvin et al. Eds. Springer Int. CH (2016) CLAVE=CL
- 457.- AUTORES: Marta Marín-Luna, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Fullerene and corannulene derivatives acting as insulators of Cl<sup>-</sup> and BeH<sub>2</sub>.*  
REF. REVISTA: PhysChemChemPhys **18**, 6059-6068 (2016) CLAVE=A
- 458.- AUTORES: A. Martin-Somer, M. Yáñez, W.L. Hase, MP. Gaigeot, and R. Spezia.  
TITULO: *Post Transition State Dynamics in Gas Phase Reactivity: The Importance of Bifurcations and Rotational Activation*  
REF. REVISTA: J. Chem.Theory. Comp **12**, 974-982 (2016) CLAVE=A
- 459.- AUTORES: M.Merced Montero-Campillo, Otilia Mó, Manuel Yáñez, Abdessamad Benidar, Cedric Rouxel, Nicolas Kerisit, Y. Trolez and Jean Claude Guillemin  
TITULO: *Gas Phase Infrared Spectroscopy of Substituted Cyanobutadiynes. The Role Played by Bromine Atom and Methyl Group as Substituents.*  
REF. REVISTA: ChemPhysChem **17**, 1018-1024 (2016) CLAVE=A
- 460.- AUTORES: Al Mokhtar Lamsabhi, Margarita M. Vallejos, Barbara Herrera, Otilia Mó, and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Effect of beryllium bonds on the keto-enol tautomerism of formamide derivatives. A subtle basicity-acidity balance.*  
REF. REVISTA: Theor. Chem. Acc. **135**, 147 (9 pgs.) (2016) CLAVE=A
- 461.- AUTORES: Oriana Brea, Ibon Alkorta, Otilia Mó, Manuel Yáñez, José Elguero, Inés Corral.  
TITULO: *Exergonic and spontaneous production of radicals through beryllium bonds.*  
REF. REVISTA: Angew. Chem. Int. Ed. **55**, 8736-8739 (2016) CLAVE=A
- 462.- AUTORES: M.Merced Montero-Campillo, Al Mokhtar Lamsabhi, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Photochemical Behavior of Beryllium Complexes With Subporphyrazines and Subphthalocyanines*  
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **120**, 4845-4852 (2016) CLAVE=A
- 463.- AUTORES: Elena Kusevska, M.Merced Montero-Campillo, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Boron-Boron One Electron Sigma Bonds vs. B-X-B bridge structures.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **22**, 13697-13704 (2016) CLAVE=A
- 464.- AUTORES: Oriana Brea, Ibon Alkorta, Inés Corral, Otilia Mó, Manuel Yáñez, José Elguero.  
TITULO: *Intramolecular beryllium bonds. Further insights into resonance assistance phenomena.*  
REF. REVISTA: Intermolecular Interactions in Crystals: Fundamentals of Crystal Engineering. Ed

- J. J. Novoa. (submitted) CLAVE=CL
- 465.- AUTORES: Manuel Yáñez.  
TITULO: *Modelling intrinsic chemical properties through non-covalent interactions.*  
REF. REVISTA: European Acad. Of Sciences 2015 Annual Report CLAVE=A
- 466.- AUTORES: Oriana Brea, Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, José Elguero.  
TITULO: *On the existence of intramolecular one-electron Be-Be bonds.*  
REF. REVISTA: Chem. Comm. **52**, 9656-9659 (2016) CLAVE=A
- 467.- AUTORES: M.Merced. Montero-Campillo, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *Beryllium Subphthalocyanines Self-Assembling Properties.*  
REF. REVISTA: Can. J. Chem. **94**, 1015-1021 (2016) CLAVE=A
- 468.- AUTORES: Oriana Brea, Ines Corral, Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, José Elguero.  
TITULO: *Beryllium-based Anion sponges close relatives of proton sponges.*  
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **22**, 18322-18325 (2016) Hot Paper. CLAVE = A
- 469.- AUTORES: Ana Martin-Somer, Ricardo Spezia and Manuel Yáñez.  
TITULO: *Gas-phase reactivity of [Ca-formamide]<sup>2+</sup> complex: an example of different dynamical behaviours.*  
REF. REVISTA: Philosophical Trans. (in press) (2016) CLAVE=A
- 470.- AUTORES: Jean-Yves Salpin, Violette Haldys, Vincent Steinmetz, Emmanuelle Leon, Manuel Yáñez, Mercedes M. Montero-Campillo.  
TITULO: *Protonation of Methyl-Uracils in the gas phase: the particular case of 3-Methyl-uracyl.*  
REF. REVISTA: to be submitted CLAVE=A
- 471.- AUTORES: Romain Ligny, Manuel Yáñez, Thierry Roisnel, Jean-Claude Guillemin, Yann Trolez  
TITULO: *One-step synthesis of conjugated enynenitriles from bromocyanoacetylene.*  
REF. REVISTA: to be submitted. CLAVE=A
- 472.- AUTORES: Rizalina Tama, Otilia Mó, Manuel Yáñez, and M. Merced Montero-Campillo  
TITULO: *Characterizing Magnesium Bonds: Main Features of a Non-Covalent Interaction.*  
REF. REVISTA: Theor. Chem. Acc. (in press) CLAVE=A
- 473.- AUTORES: Elena Kusevska, M.Merced. Montero-Campillo, Otilia Mó and Manuel Yáñez  
TITULO: *One-Electron Bonds in Frustrated Lewis Pair TPB Ligands: Boron Behaving as A Lewis Base.*  
REF. REVISTA: Angew. Chem. Int. Ed., (in press) CLAVE=A

## ESTANCIAS EN CENTROS EXTRANJEROS

**(superiores a cuatro semanas)**

---

CENTRO: Carnegie- Mellon University  
LOCALIDAD: Pittsburgh PAIS: EEUU AÑO: 1974-76 DURACION: 2 años  
TEMA: Estancia postdoctoral con el Prof. Pople

---

CENTRO: Sydney University  
LOCALIDAD: Sydney PAIS: Australia AÑO: 2003 DURACION: 2 meses  
TEMA: Visiting Professor en el grupo del Profesor Leo Radom

---

CENTRO: Université d'Evry val d'Essonne  
LOCALIDAD: Evry PAIS: Francia AÑO: 2004 DURACION: 3 meses  
TEMA: Visiting Professor en el grupo de la Profesora Jeanine Tortajada

---

CENTRO: Université d'Evry val d'Essonne  
LOCALIDAD: Evry PAIS: Francia AÑO: 2006 DURACION: 2 meses  
TEMA: Visiting Professor en el grupo de la Profesora Jeanine Tortajada

---

CENTRO: Université d'Evry val d'Essonne  
LOCALIDAD: Evry PAIS: Francia AÑO: 2008 DURACION: 1 mes  
TEMA: Visiting Professor en el grupo de la Profesora Jeanine Tortajada

---

CENTRO: Université d'Evry val d'Essonne  
LOCALIDAD: Evry PAIS: Francia AÑO: 2009 DURACION: 1 mes  
TEMA: Visiting Professor en el grupo de la Profesora Jeanine Tortajada

---

CENTRO: École Nationale Supérieure de Chimie de Rennes  
LOCALIDAD: Rennes PAIS: Francia AÑO: 2010 DURACION: 1 mes  
TEMA: Visiting Professor en el grupo del Prof. Jean Claude Guillemin

---

CENTRO: Université d'Evry val d'Essonne  
LOCALIDAD: Evry PAIS: Francia AÑO: 2012 DURACION: 3 meses  
TEMA: Visiting Professor en el grupo de la Profesora Jeanine Tortajada

---

CENTRO: Dalhousie University  
LOCALIDAD: Dalhousie PAIS: Canada AÑO: 2012 DURACION: 3 meses  
TEMA: Sabatico en el grupo del Profesor Russell Boyd

---

CENTRO: Université d'Evry val d'Essonne  
LOCALIDAD: Evry PAIS: Francia AÑO: 2014 DURACION: 1 mes  
TEMA: Visiting Professor en el grupo de la Profesora Jeanine Tortajada

---

CENTRO: Université d'Evry val d'Essonne  
LOCALIDAD: Evry PAIS: Francia AÑO: 2015 DURACION: 1 mes  
TEMA: Visiting Professor en el grupo de la Profesora Jeanine Tortajada

---

## CONGRESOS

---

- TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 6th Symposium International on Chemical and Biochemical Reactivity  
LUGAR DE CELEBRACION: Jerusalem AÑO: 1973
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación invitada  
CONGRESO: Microsymposium on Quantum Chemistry.  
LUGAR DE CELEBRACION: Liblice (Checoslovaquia) AÑO: 1981
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicacion Invitada  
CONGRESO: Euchem Conference on Ion Chemistry. Gaseous vs. Solvated Ions  
LUGAR DE CELEBRACION: Lido di Ostia AÑO: 1982
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicacion Invitada  
CONGRESO: Symposium on the Chemistry of Heterocyclic Compounds (VIIIth) and of Nucleic Acid Components  
LUGAR DE CELEBRACION: Praga (Checoslovaquia) AÑO: 1984
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 11<sup>eme</sup> Colloque sur la Physique des Collisions Atomiques et Electroniques.  
LUGAR DE CELEBRACION: Metz (Francia) AÑO: 1986
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Miembro del Comité Organizador  
CONGRESO: First Europhysics Summer School on Chemical Physics  
LUGAR DE CELEBRACION: Santander (España) AÑO: 1986
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Director  
CONGRESO: Third Europhysics Summer School on Chemical Physics  
LUGAR DE CELEBRACION: Santander (España) AÑO: 1988
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: International Conference on the Physics of Multicharged Ions  
LUGAR DE CELEBRACION: Grenoble (Francia) AÑO: 1988
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de la Octava Sesión  
CONGRESO: Second Euchem Conference on the Gas Phase Ion Chemistry. Structure and Stereochemistry.  
LUGAR DE CELEBRACION: Frascati-Roma (Italia) AÑO: 1989
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Forty Years of Quantum Chemistry. An International Conference in Honor of Prof. J.A. Pople.  
LUGAR DE CELEBRACION: Athens, Georgia (U.S.A.) AÑO: 1989
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicacion Invitada  
CONGRESO: Second World Congress of Theoretical Organic Chemistry  
LUGAR DE CELEBRACION: Toronto (Canada) AÑO: 1990
- 
- TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: XIX Congreso Internazionale dei Chimici Teorici dei Paesi di Espressione Latina.  
LUGAR DE CELEBRACION: Roma (Italia) AÑO: 1990
-

TIPO DE PARTICIPACION: Miembro del Comité Organizador  
CONGRESO: III Congreso de Física Atómica y Molecular  
LUGAR DE CELEBRACION: Toledo (España) AÑO: 1991

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de la Sesión Inaugural  
CONGRESO: I South European Conference of the Atomic and Molecular Physics.  
LUGAR DE CELEBRACION: Gandia (España) AÑO: 1992

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: XX Congreso de Químicos Teóricos de los Países de expresión Latina.  
LUGAR DE CELEBRACION: Mérida (Venezuela) AÑO: 1992

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: First Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics.  
LUGAR DE CELEBRACION: Lisboa (Portugal) AÑO: 1993

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: The Third World Congress of Theoretical Organic Chemists (WATOC'93)  
LUGAR DE CELEBRACION: Toyohashi (Japón) AÑO: 1993

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 8th International Congress of Quantum Chemistry  
LUGAR DE CELEBRACION: Praga (Republica Checa, junio de 1994) AÑO: 1994

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesión  
CONGRESO: The 5th European Symposium on Organic Reactivity. ESOR-V  
LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Compostela (España) AÑO: 1995

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Molecular Quantum Mechanics: Methods and Applications  
LUGAR DE CELEBRACION: Cambridge (Reino Unido) AÑO: 1995

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Workshop on Weakly Bonded Species in ionic gas-phase Reactions  
LUGAR DE CELEBRACION: Palaiseau (Francia) AÑO: 1996

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Fourth World Congress of Theoretically Oriented Chemists- WATOC'96  
LUGAR DE CELEBRACION: Jerusalem (Israel) AÑO: 1996

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesión  
CONGRESO: XXIII QTEL  
LUGAR DE CELEBRACION: Cáceres (España) AÑO: 1996

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: International Meeting on Localization and Transfer of Hydrogen  
LUGAR DE CELEBRACION: Madrid (España) AÑO: 1996

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Fourth European Workshop on FTMS

LUGAR DE CELEBRACION: Pont-à-Mousson (Francia) AÑO: 1997

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Recent Theoretical and Experimental Advances in Hydrogen-Bonded Clusters  
LUGAR DE CELEBRACION: Elounda, Creta AÑO: 1997

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Sixth European Symposium on Organic Reactivity ESOR VI  
LUGAR DE CELEBRACION: Louvain-la Neuve(Belgica) AÑO: 1997

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Hydrogen Transfer: Experiment and Theory  
LUGAR DE CELEBRACION: Berlin (Alemania) AÑO: 1997

---

TIPO DE PARTICIPACION: Profesor Invitado (4 Conferencias Plenarias)  
CONGRESO: 2da. Escuela Iberoamericana de Química Computacional y Diseño Molecular.  
LUGAR DE CELEBRACION: La Habana (Cuba) AÑO: 1998

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman of the Organizing Committee  
CONGRESO: Workshop on Computational Chemistry  
LUGAR DE CELEBRACION: Miraflores de la Sierra, Madrid (España) AÑO: 1998

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: XXIV QUITEL  
LUGAR DE CELEBRACION: Puebla de los Angeles (Mexico) AÑO: 1998

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: International Symposium on Gas-Phase Ion Chemistry and Physics  
LUGAR DE CELEBRACION: Rome (Italy) AÑO: 1998

---

TIPO DE PARTICIPACION: Profesor Invitado  
CONGRESO: International Conference in Honor John A. Pople.  
LUGAR DE CELEBRACION: Amelia Island Florida (USA) AÑO: 1999

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman of the Organizing Committee  
CONGRESO: International Symposium on Physical Organic Chemistry  
LUGAR DE CELEBRACION: Miraflores de la Sierra, Madrid (España) AÑO: 1999

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 5<sup>th</sup> World Congress of Theoretically Oriented Chemists.  
LUGAR DE CELEBRACION: Londres (Reino Unido) AÑO: 1999

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Inaugural  
CONGRESO: Energetique et Reactivite des Ions en Phase Gazeuse: Experience et Theorie.  
LUGAR DE CELEBRACION: Gif sur Yvette (Francia) AÑO: 1999

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: X<sup>th</sup> International Congress of Quantum Chemistry.  
LUGAR DE CELEBRACION: Menton (Francia) AÑO: 2000

---



TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 15<sup>th</sup> International Mass Spectrometry Conference.  
LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (España) AÑO: 2000

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Third European Conference on Computational Chemistry EUCCO-CC3.  
LUGAR DE CELEBRACION: Budapest (Hungria) AÑO: 2000

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: International Conference on: Electronic Structure: Prediction and Applications.  
LUGAR DE CELEBRACION: San Sebastián (España) AÑO: 2000

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 8<sup>th</sup> European Symposium on Organic Reactivity.  
LUGAR DE CELEBRACION: Cavtat (Dubrovnik) (Croatia) AÑO: 2001

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 9<sup>th</sup> International Conference on the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics.  
LUGAR DE CELEBRACION: S. Lorenzo del Escorial (España) AÑO: 2001

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesión  
CONGRESO: Electronic Structure and Chemical Reactivity.  
LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (España) AÑO: 2001

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 4<sup>th</sup> European Conference on Computational Chemistry.  
LUGAR DE CELEBRACION: Assisi (Italia) AÑO: 2002

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de la Sesión de clausura  
CONGRESO: Electronic Structure Principles and Applications (ESPA2002).  
LUGAR DE CELEBRACION: Sevilla (España) AÑO: 2002

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: HALCHEM Internacional Meeting  
LUGAR DE CELEBRACION: Cerdeña (Italia) AÑO: 2002

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Gordon Research Conference: Gaseous Ions: Structures, Energetics & Reactions  
LUGAR DE CELEBRACION: Ventura, California (USA) AÑO: 2003

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesión  
CONGRESO: Modelling Chemical Reactivity: from gas phase to solution and enzymes.  
LUGAR DE CELEBRACION: Nancy (Francia) AÑO: 2003

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: XIth Internacional Congreso of Quantum Chemistry 2003  
LUGAR DE CELEBRACION: Bonn (Alemania) AÑO: 2003

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 29th Congres Internacional des Chimistes Theoriciens d'Expression Latine  
LUGAR DE CELEBRACION: Marrakech (Marruecos) AÑO: 2003

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Seleccionada por el Comité Científico  
CONGRESO: 52nd ASMS conference on Mass Spectrometry  
LUGAR DE CELEBRACION: Nashville, Tennessee (USA) AÑO: 2004

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 5th European Conference on Computational Chemistry (EUCOCC5)  
LUGAR DE CELEBRACION: La Londe les Maures (Francia) AÑO: 2004

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Molecular Quantum Mechanics: The No Nonsense Path to Progress  
LUGAR DE CELEBRACION: Cambridge (Inglaterra) AÑO: 2004

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de sesión  
CONGRESO: XXX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina  
LUGAR DE CELEBRACION: Oporto (Portugal) AÑO: 2004

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Electronic Structure, Principles and Applications (ESPA2004)  
LUGAR DE CELEBRACION: Valladolid (España) AÑO: 2004

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 7th Congreso of the World Association of Theoretical Oriented Chemists (WATOC 2005)  
LUGAR DE CELEBRACION: Ciudad del Cabo (Sudáfrica) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Symposium in Honor of J.A. Pople. 229<sup>th</sup> ACS National Meeting  
LUGAR DE CELEBRACION: San Diego, CA (USA) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 10th European Symposium on Organic Reactivity  
LUGAR DE CELEBRACION: Roma (Italia) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 1<sup>o</sup> Symposium de Chimie et Biologie Analytiques : De la Molécule au Protéome  
LUGAR DE CELEBRACION: Montpellier (Francia) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Recent advances on the dynamics of atomic and molecular particles interacting with gas and solid targets (Workshop in honor of Antoine Salin)  
LUGAR DE CELEBRACION: Donostia (España) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: International Chemical Congress of Pacific basin Societies (Pacifichem2005)  
LUGAR DE CELEBRACION: Honolulu (USA) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: XX Bienal de la Real Sociedad Española de Química.  
LUGAR DE CELEBRACION: Lugo (España) AÑO: 2005

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 89th Canadian Chemistry Conference  
LUGAR DE CELEBRACION: Halifax (Canada) AÑO: 2006

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: VII Girona Seminar on Chemical Bonding  
LUGAR DE CELEBRACION: Girona (Spain) AÑO: 2006

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Electronic Structure, Principles and Applications (ESPA2006)  
LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Compostela (España) AÑO: 2006

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia invitada  
CONGRESO: 6th European Conference on Computational Chemistry (EUCCOC6)  
LUGAR DE CELEBRACION: Tale (Eslovaquia) AÑO: 2006

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación invitada  
CONGRESO: 9th European Conference on Atoms Molecules & Photons (ECAMP IX)  
LUGAR DE CELEBRACION: Hersonissos, Creta (Grecia) AÑO: 2007

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman  
CONGRESO: Molecular Quantum Mechanics: Analytic Gradients and Beyond  
LUGAR DE CELEBRACION: Budapest (Hungría) AÑO: 2007

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 3rd Symposium on Theoretical Biophysics (TheoBio-07)  
LUGAR DE CELEBRACION: Cetraro, Calabria (Italia) AÑO: 2007

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de sesión  
CONGRESO: 11-European Symposium on Organic Reactivity (ESOR XI)  
LUGAR DE CELEBRACION: Faro (Portugal) AÑO: 2007

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia invitada  
CONGRESO: Conference of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC-2008)  
LUGAR DE CELEBRACION: Sydney (Australia) AÑO: 2008

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: The International Conference on the Theory and Applications of Computational Chemistry  
LUGAR DE CELEBRACION: Shanghai (China) AÑO: 2008

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Oral invitada  
CONGRESO: 19th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry 2008  
LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Compostela (España) AÑO: 2008

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia invitada  
CONGRESO: Meeting in Computational Chemistry  
LUGAR DE CELEBRACION: Kongsvinger (Noruega) AÑO: 2008

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesion  
CONGRESO: 13th International Congress on Quantum Chemistry  
LUGAR DE CELEBRACION: Helsinki (Finlandia) AÑO: 2009

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 7<sup>th</sup> Canadian Computational Chemistry Conference  
LUGAR DE CELEBRACION: Halifax (Canada) AÑO: 2009

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia invitada  
CONGRESO: Theoretical Chemistry: Modelling Reactivity from Gas Phase to Biomolecules and Solids.  
LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (Spain) AÑO: 2009

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: XXV QUITEL  
LUGAR DE CELEBRACION: S. Andrés (Colombia) AÑO: 2009

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: Molecular Quantum Mechanics 2010. In honor of H.F. Schaefer  
LUGAR DE CELEBRACION: Berkeley, California (EEUU) AÑO: 2010

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesion  
CONGRESO: ESPA-2010. Electronic Structure Principles and Applications.  
LUGAR DE CELEBRACION: Oviedo (Spain) AÑO: 2010

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesion  
CONGRESO: ECAMP 2010. European Conference in Atoms, Molecules and Photons.  
LUGAR DE CELEBRACION: Salamanca (Spain) AÑO: 2010

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesión  
CONGRESO: 8<sup>th</sup> European Conference on Computational Chemistry  
LUGAR DE CELEBRACION: Lund (Suecia) AÑO: 2010

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: XXVI QUITEL  
LUGAR DE CELEBRACION: Biarritz (Francia) AÑO: 2010

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Canadian Society of Chemistry (CSC 2011) Conference  
LUGAR DE CELEBRACION: Montreal (Canada) AÑO: 2011

---

TIPO DE PARTICIPACION: Presidente del Comité Organizador  
CONGRESO: World Association of Theoretical and Computational Chemists. (WATOC-2011)  
LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Compostela (Spain) AÑO: 2011

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Inaugural Invitada.  
CONGRESO: Modeling Interactions in Biomolecules V.  
LUGAR DE CELEBRACION: Kutná Hora (Republica Checa) AÑO: 2011

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Anharmonicity in medium-sized molecules and clusters  
LUGAR DE CELEBRACION: Marne-La-Vallée (Francia) AÑO: 2012

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Canadian Society of Chemistry (CSC 2012) Conference  
LUGAR DE CELEBRACION: Calgary (Canada) AÑO: 2012

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Plenaria  
CONGRESO: ESPA-2012. Electronic Structure Principles and Applications.  
LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (Spain) AÑO: 2012

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairperson of session  
CONGRESO: Quantum Chemistry in the Solid State: Magnetic Coupling and Excited States. Symposium  
in honor of Ria Broer.  
LUGAR DE CELEBRACION: Groningen (The Netherlands) AÑO: 2012

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Plenaria  
CONGRESO: Modeling and Design of Molecular Materials 2012.  
LUGAR DE CELEBRACION: Wroclaw (Poland) AÑO: 2012

---

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesión  
CONGRESO: Theoretical Chemistry in Spain told by women. .  
LUGAR DE CELEBRACION: Tarragona (Spain) AÑO: 2013

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 7th Molecular Quantum Mechanics.  
LUGAR DE CELEBRACION: Lugano (Suiza) AÑO: 2013

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: Workshop in "Topological approaches to Weak Interactions".  
LUGAR DE CELEBRACION: Paris (Francia) AÑO: 2013

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: XVIII Workshop in "Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology"  
LUGAR DE CELEBRACION: Paraty, Rio de Janeiro (Brasil) AÑO: 2013

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 9º ESPA- Electronic Structure Principles and Applications  
LUGAR DE CELEBRACION: Badajoz (Spain) AÑO: 2014

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 97th Canadian Chemistry Conference 2014  
LUGAR DE CELEBRACION: Vancouver (Canada) AÑO: 2014

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: 14th Rencontre des Chimistes Theoriciens francophones  
LUGAR DE CELEBRACION: Paris (France) AÑO: 2014

---

TIPO DE PARTICIPACION: Plenary Lecture  
CONGRESO: Xth WATOC  
LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Chile (Chile) AÑO: 2014

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada  
CONGRESO: 15<sup>th</sup> Int. Congress of Quantum Chemistry (ICQC)  
LUGAR DE CELEBRACION: Pekin (China) AÑO: 2015

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada  
CONGRESO: The Chemical Bonds at the 21<sup>th</sup> Century  
LUGAR DE CELEBRACION: Xiamen (China) AÑO: 2015

---

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada

CONGRESO: ICPEAC 2015

LUGAR DE CELEBRACION: Toledo (Spain)

AÑO: 2015

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada y presidente de sesión

CONGRESO: 10th European Conference on Computational Chemistry

LUGAR DE CELEBRACION: Fulda (Alemania)

AÑO: 2015

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada

CONGRESO: PACIFICHEM 2015 (The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015)

LUGAR DE CELEBRACION: Honolulu, Hawai (EEUU)

AÑO: 2015

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada

CONGRESO: 26th Austin Symposium on Molecular Structure and Dynamics

LUGAR DE CELEBRACION: Dallas, Texas (EEUU)

AÑO: 2016

---

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada

CONGRESO: ESPA 2016

LUGAR DE CELEBRACION: Castellón (Spain)

AÑO: 2016

---

TIPO DE PARTICIPACION: Miembro del Comité Científico

CONGRESO: European Symposium in Chemical Bond (ESCB1)

LUGAR DE CELEBRACION: Rouen (Francia)

AÑO: 2016

---

## TESIS DOCTORALES DIRIGIDAS

---

TITULO: Proyección de la Densidad de Carga Molecular en Componentes Esféricos. Un Nuevo Análisis de Población Electrónica

DOCTORANDO: Félix Escudero Molina

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 1982

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude

---

TITULO: Estudio Teórico de Equilibrios de Transferencia Protónica en Fase Gas.

DOCTORANDO: José Luis García de Paz

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 1985

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude

---

TITULO: Estudios de Resonancias Electrónicas en Moléculas y Cuasimoléculas

DOCTORANDO: Fernando Martín García

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 1986

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Apto cum Laude

---

TITULO: Cálculos ab initio y Análisis Topológico de la Basicidad frente a Monocationes

DOCTORANDO: Manuel Alcamí Pertejo

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 1990

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Apto cum Laude

---

TITULO: Estudio Teórico de Reacciones Ión Capa Abierta-Molécula de Interés en Astroquímica.

DOCTORANDO: Alberto Luna Fernández

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 1994

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Apto cum Laude

---

TITULO: Reacciones Cation-Molécula de Interés en Astroquímica y en la Química de los Elementos del Tercer y Cuarto Período.

DOCTORANDO: Ana Isabel González Jiménez

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 1999

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude por Unanimidad

---

TITULO: Contribution Experimentale et Theorique a l'etude de la basicité des groupements carbonyles et Thiocarbonyles vis-a-vis de I<sub>2</sub>, ICl et H<sup>+</sup>.

DOCTORANDO: Al Mokhtar Lamsabhi.

UNIVERSIDAD: Cadi Ayyad

AÑO: 2002

FACULTAD: Sciences

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude por Unanimidad

---

TITULO: Contribution a l'etude theorique par les méthodes ab initio des mecanismes reactionnels de processus interstellaires.

DOCTORANDO: Fatima Ijjaali

UNIVERSIDAD: Cadi Ayyad

AÑO: 2002

FACULTAD: Sciences

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude por Unanimidad

---

TITULO: Una Aproximación Teórica a la Química de los Calcógenos

DOCTORANDO: Pablo Sanz Mercado

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 2003

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude por Unanimidad

---

TITULO: Enlace y Perturbaciones de Enlace en Reacciones Ion-Molécula en Fase Gas.

DOCTORANDO: Inés Corral Pérez

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

FACULTAD: Ciencias

AÑO: 2005

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude y Mención Europea

**Esta Tesis Recibió el Premio a la Mejor Tesis de Química de la Comunidad Autónoma de Madrid en 2005.**

---

TITULO: Estudio de Enlaces y Reactividad Unimolecular de Dicaciones Orgánicas en Fase Gas.

DOCTORANDO: Cristina Trujillo del Valle

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

FACULTAD: Ciencias

AÑO: 2008

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude

TITULO: Electron Capture Dissociation of Disulphides and Diselenides.

DOCTORANDO: José Antonio Gámez Martínez

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

FACULTAD: Ciencias

AÑO: 2010

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude y Mención Europea

TITULO: Reacciones en Fase gas de bases de Relevancia Bioquímica con  $\text{Ca}^{2+}$  y  $\text{Sr}^{2+}$ .

DOCTORANDO: Ane Eizaguirre Martínez de Antoñana

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

FACULTAD: Ciencias

AÑO: 2012

CALIFICACION: Apto cum Laude y Mención Europea

TITULO: Gas phase reactivity of Lewis-adducts and model biological systems. Quantum Chemistry and Molecular Dynamics perspectives.

DOCTORANDO: Ana Martín Sómer

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

FACULTAD: Ciencias

AÑO: 2014

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude y Mención Europea.

Tesis en cotutela con la Universidad d'Evry val d'Essonne.

---



## OTROS MERITOS O ACLARACIONES QUE DESEA HACER CONSTAR

---

### Premios

1. Premio Extraordinario de Licenciatura en Ciencias Químicas.  
Universidad de Santiago de Compostela.  
Julio de 1970.
2. Premio Nacional Fin de Carrera. Sección de Químicas.  
Marzo de 1971.
3. Ingreso en la **Orden Civil de Alfonso X el Sabio**, con categoría de Cruz.  
Julio de 1971.
4. Premio Extraordinario de Doctorado.  
Universidad Autónoma de Madrid.  
Enero de 1974.
5. **Premio de Investigación** de la Fundación de la U. A. M.  
Mayo de 1993.
6. **Premio de Investigación en Química Física** de la Real Sociedad Española de Química.  
Noviembre de 2001.
7. **Premio Científico Hispano Francés J. A. Betancourt J. Perronet**  
Marzo de 2003
8. Nombrado Académico Correspondiente de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales,  
Mayo, 2015

### Editor

- Editor de Journal of Molecular Structure (THEOCHEM) y en la Actualidad de Computational and Theoretical Chemistry
- Editor General de Anales de Química
- 

### Editorial Boards a los que perteneció o pertenece

- Mass Spectrometry Reviews
- The Open Chemical Physics Journal
- 

### Asociaciones a las que pertenece:

- Miembro del American Chemical Society desde Enero de 1976.
- Miembro de la Sociedad Europea de Física desde Enero de 1987.
- Miembro de la Real Sociedad Española de Física desde Enero de 1988.
- Miembro de la Real Sociedad Española de Química desde Enero de 2000.
- Miembro del Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular desde su fundación.
- Secretario del Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular 1988-1995.

### Revistas de las que es referee:

- Journal of Molecular Structure (THEOCHEM).
- Chemical Physics.

- Chemical Physics Letters
- Journal of the American Chemical Society.
- Angewandte Chemie
- Journal of Physical Chemistry A.
- Journal of Physical Chemistry B
- Journal of Physics B.
- Chemical Physics Research.
- Journal of Organic Chemistry
- Langmuir
- Theoretical Chemical Accounts
- Chemistry European Journal
- European Journal of Organic Chemistry.
- Organic & Biomolecular Chemistry
- Zeitsch. Für Anorg. Allg. Chemie
- European Physics Journal
- European Journal of Inorganic Chemistry.
- Physical Chemistry Chemical Physics.
- ChemPhysChem
- Molecules
- Molecular Physics
- Heteroatom Chemistry

#### **Cargos Académicos**

- Director del Departamento de Química de Septiembre de 1994-Diciembre de 1997
- Director del Centro de Computación Científica de la Facultad de Ciencias de la UAM desde Mayo de 1998 a mayo de 2002.

#### **Evaluaciones de Investigación y Docencia**

- 7 tramos de Investigación evaluados positivamente (periodo 1970-2000; 2000-2006; 2006-2012)
- 8 tramos de Docencia evaluados positivamente (periodo 1970-2000; 2000-2005; 2005-2010)

#### **Comités Científicos de los que forma parte.**

- Vicechairman of the European Division of Computational Chemistry
- Comité Internacional del WATOC (World association of theoretical and computational chemists).
- Comisión de Evaluación para la promoción a Cátedras de la UAM.
- Comité Internacional de Evaluación de la Licenciatura de Química de las Universidades Portuguesas.
- Representante Español en el Comité del Programa COST D26.
- Comité de Evaluación de los Laboratorios de Química de la Ecole Polytechnique, Palaiseau.
- Comité de Evaluación del Profesorado de la Comunidad Valenciana
- Comité Internacional de Evaluación de Grupos de Investigación de las Universidades Portuguesas

.- Coordinador General del “European Master on Theoretical Chemistry and Computacional Modelling” proyecto Europeo que involucra a 47 Universidades Europeas de 8 países distintos. Este master ha recibido el EUROLABEL de la European Chemistry Thematic Network (C.N. EM0701). En estos momentos este es un master ERASMUS MUNDUS 2009-2015 coordinado por el Prof. Manuel Yáñez del Departamento de Química UAM. Prorrogado por tres ediciones más hasta 2019.

.- Coordinador General del Proyecto Europeo “Theoretical Chemistry and Computational Modelling “. Innovative Training Network (ITN) de European Commission. Research Executive Agency. **MSCA-ITN-EJD**. SEP-210137947 hasta 2019, que involucra a 12 Universidades Europeas y 9 Empresas privadas y Centros de HPC a nivel europeo.