

Parte A. DATOS PERSONALES

Fecha del CVA	14/05/2018
----------------------	------------

Nombre y apellidos	Juan Antonio Poce Fatou		
DNI/NIE/pasaporte	31.256.458-X	Edad	48
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	M-4369-2018	
	Código Orcid	0000-0003-3792-4066	

A.1. Situación profesional actual

Organismo	Universidad de Cádiz		
Dpto./Centro	Departamento de Química Física / Facultad de Ciencias		
Dirección	Polígono del Río San Pedro		
Teléfono	956016179	correo electrónico	juanantonio.poce@uca.es
Categoría profesional	Profesor Titular de Universidad	Fecha inicio	05/05/2004
Espec. cód. UNESCO	120326, 120410, 220304, 220905, 220906, 220910, 221103, 230108, 330707, 220306		
Palabras clave	Nucleación, cristal, precipitado, vinos, sobresaturación, simulación, transmitancia, ruido, láser, semiconductor, célula fotovoltaica, energía solar, focalización, concentración solar, acero, caracterización, LBIC, fotoquímica, tensioactivos. detergencia		

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

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
<i>Licenciado en Químicas</i>	<i>Universidad de Cádiz</i>	<i>1992</i>
<i>Doctor en Ciencias Químicas</i>	<i>Universidad de Cádiz</i>	<i>2000</i>

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

- Dos sexenios de investigación. El último correspondiente al tramo 2003-2008
- Citas totales: 62
- Promedio de citas / año durante los últimos 5: 3,65
- Publicaciones totales en primer cuartil (Q1): 6
- Índice h: 4

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

La actividad investigadora que he desarrollado abarca campos de trabajo diversos, desde la simulación de procesos de precipitación hasta la puesta a punto de técnicas de focalización en dispositivos LBIC (Laser Beam Induced Current), pasando por la investigación en didáctica de las ciencias experimentales.

El estudio de los procesos de precipitación constituye la base de mi trabajo inicial que abordé empleando técnicas de programación computerizada. Con ello se recreó el efecto de un haz láser focalizado en el seno de una disolución sobresaturada. El análisis del ruido asociado a la transmitancia del haz focalizado permite obtener información en las etapas tempranas de la precipitación, sobre la morfología del precipitado que va a aparecer y sobre la evolución del proceso (nucleación espontánea o crecimiento cristalino).

Las técnicas de simulación computerizada aplicadas al comportamiento de un haz láser se aplicaron posteriormente en la puesta a punto de técnicas de focalización de láseres en dispositivos LBIC, inicialmente sobre células solares de silicio, más adelante en células solares de colorante DSSC (Dye Sensitized Solar Cell). La técnica LBIC se basa en la extracción de corriente de una célula solar cuando es irradiada. Sobre la base de esta técnica y apoyado en un montaje de precisión micrométrica desarrollamos un sistema (patentado) con el que se pueden caracterizar células solares incluidas las propias DSSC, que por su naturaleza plantean graves problemas de estabilidad cuando se irradian con un láser focalizado, ya que éste concentra una gran energía en una superficie pequeña que en condiciones normales destruye sus componentes.

La combinación de conocimientos adquiridos en el transcurso de estos proyectos ha generado trabajos que se han aplicado en docencia como nuevas técnicas de didáctica experimental en estudios de procesos de degradación fotoquímica y en el ámbito del equipamiento para la investigación desarrollando técnicas de estudio espectrofotométrico basadas en el empleo de escáneres de sobremesa.

Los últimos trabajos de investigación en los que he trabajado han sido aplicados y se han materializado en contratos ligados a la industria del acero - ACERINOX, a la conservación del patrimonio gracias a la construcción de dispositivos para la caracterización de estructuras porosas - IAPH (Instituto Andaluz de Patrimonio Histórico), a la construcción de sistemas para facilitar el estudio de la evolución de materiales metálicos extraídos de pecios CAS (Centro de Arqueología Subacuática) y a la investigación de procesos deterivos en heliostatos de centrales eléctricas de concentración solar - GEMASOLAR.

En 2011 me incorporé al ámbito de la gestión universitaria como Director General de la Unidad de Innovación Docente y en 2015 como vicerrector de Recursos Docentes y de la Comunicación.

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (ordenados por tipología)

C.1. Publicaciones

J. A. Poce-Fatou, M. Bethencourt, F. J. Moreno-Dorado, J. M. Palacios Santander
Using a Flatbed Scanner to Measure Detergency
Journal of Chemical Education. ISSN: 0021-9584
Artículo. VOL: 88; 1314-1317. Junio 2011. EE. UU.

F. J. Navas-Pineda, J. A. Poce-Fatou, J. J. Gallardo-Bernal, J. Martín
Evaluation Method for Pore Size Distribution Using Capillary Liquid Suction Tests
Journal of Porous Material. ISSN: 1380-2224
Artículo. VOL: 17; 207-215. 2010. Holanda

J. A. Poce-Fatou, M. Bethencourt-Núñez, C. Moreno, J. J. Pinto-Ganfornina, F. J. Moreno-Dorado
A Lab Experience to Illustrate the Physicochemical Principles of Detergency
Journal of Chemical Education. ISSN: 0021-9584
Artículo. VOL: 85; 266-268. Febrero 2008. EE. UU.

C. Fernández-Lorenzo, J. A. Poce-Fatou, R. Alcántara, J. Navas, J. Martín
High resolution laser beam induced current focusing form photoactive survace characterization
Applied Surface Science. ISSN: 0169-4332
Artículo. VOL: 253(4); 2179-2188. Diciembre 2006. Holanda

J. A. Poce-Fatou
A Superficial Overview of Detergency
Journal of Chemical Education. ISSN: 0021-9584
Artículo. VOL: 83; 1147-1151. Agosto 2006. EE. UU.

J. Martín, C. Fernández-Lorenzo, J. A. Poce-Fatou y R. Alcántara
A versatile computer-controlled high-resolution LBIC system
Progress in Photovoltaics. ISSN: 1062-7995
Artículo. VOL: 12; 283-295. 2004. EE.UU.

J. A. Poce-Fatou, M L. A. Gil, R. Alcántara, C. Botella y J. Martín
A photochemical reactor for the study of kinetics and adsorption phenomena.
Journal of Chemical Education. ISSN: 0021-9584
Artículo. VOL: 81; 537-539. Abril 2004. EE. UU.

J. A. Poce-Fatou, J. Martín, R. Alcántara y C. Fernández-Lorenzo
A precision method for laser focusing on laser beam induced current experiments.
Review of Scientific Instruments. ISSN: 0034-6748
Artículo. VOL: 73(11); 3895-3900. Noviembre 2002. EE. UU.

Poce-Fatou J. A., Martín J. & Alcántara R.
Study on Shape Characterization of Crystalline Particles: Analysis of the Standard Deviation of the Angular Projection Function
Journal of Physical Chemistry A. ISSN: 1089-5639
Artículo. VOL: 106 (26); 6334-6338. 2002. EE. UU.

Poce Fatou, J. A., Alcántara R. & Martín J.

Theoretical Study of the Morphologically Originated Noise Associated with the Transmittance of a Precipitation System.

Computers & Chemistry. ISSN: 0097-8485

Artículo. VOL: 26; 131-140. 2002. Reino Unido.

Poce Fatou, J. A., Alcántara R. & Martín J.

Study of Precipitant Systems by Computerised Simulation. Influence of Optical Elements on the Noise Associated with the Transmittance.

Computers & Chemistry. ISSN: 0097-8485

Artículo. VOL: 25; 499-508. 2001. Reino Unido.

Poce Fatou, J. A., Alcántara R., Gallardo J. J. & Martín J.

Experimental Study of Precipitating Systems; Computerised Analysis of the Optical Transmittance and Associated Noise.

Computers & Chemistry. ISSN: 0097-8485

Artículo. VOL: 25; 447-457. 2001. Reino Unido.

C.2. Proyectos

Título del proyecto: Enlazando las escalas nanométrica y micrométrica en sistemas electrolíticos: de las células solares nanocristalinas a los dispositivos microfluídicos

Código / referencia de identificación del proyecto: P06-FQM-01869

Entidad financiadora: Proyecto de Investigación de Excelencia de la Junta de Andalucía

Duración: 12/04/2007- 11/04/2010

Cuantía: 256536,30 €

Investigador responsable: Luis Felipe Rull Fernández

Número de investigadores participantes: 14

Calidad en que ha participado: Investigador

Título del proyecto: Nanoestructuración de la capa semiconductor-colorante en células solares fotoelectroquímicas: Experimentación y Modelización

Código / referencia de identificación del proyecto: ENE2004-01657/ALT

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Duración: 13/12/2004 – 13/12/2007

Cuantía: 104700,0 €

Investigador responsable: Martín Calleja, Joaquín

Número de investigadores participantes: 4

Calidad en que ha participado: Investigador

Título del proyecto: Caracterización de partículas en suspensión mediante el análisis de la señal de transmitancia o reflectancia óptica usando radiación láser focalizada

Código / referencia de identificación del proyecto: PPQ2002-01588

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología

Duración: 01/11/2002/ - 31/10/2005

Cuantía: 32315 €

Investigador responsable: Alcántara Puerto, Rodrigo

Número de investigadores participantes: 4

Calidad en que ha participado: Investigador

C.3. Contratos

Título del contrato / proyecto: Estudio sobre medidas de centelleo en acero inoxidable

Tipo de contrato: Contrato de carácter científico, técnico o artístico, ref. OT2011-071

Entidad financiadora: Acerinox S. A.

Duración: 15/04/2011 – hasta fin de proyecto (previsto 5 meses)

Investigador responsable: Juan Antonio Poce Fatou

Número de investigadores participantes: 3

IMPORTE TOTAL DEL PROYECTO: 5000,00 €

Título del contrato / proyecto: Estudio de limpieza de superficies reflectantes

Tipo de contrato: Contrato de carácter científico, técnico o artístico, ref. OT2009-034

Entidad financiadora: Gemasolar, 2006 S. A.

Duración: 06/05/2009 – 05/05/2011

Investigador responsable: Juan Antonio Poce Fatou

Número de investigadores participantes: 3

IMPORTE TOTAL DEL PROYECTO: 103530,00 €

Título del contrato / proyecto: Monitorización de la señal de un conductímetro CM39 y de la temperatura de trabajo de un equipo de eliminación de sales en muestras arqueológicas.
Tipo de contrato: Contrato de carácter científico, técnico o artístico, ref. OT2009-198
Entidad financiadora: Instituto Andaluz de Patrimonio Histórico
Duración: 16/11/2009 – 29/01/2010
Investigador responsable: Juan Antonio Poce Fatou
Número de investigadores participantes: 2
IMPORTE TOTAL DEL PROYECTO: 1700,00 €

Título del contrato / proyecto: Diseño, montaje y puesta en funcionamiento de un equipo automatizado, calefactado y semiportátil de eliminación de sales en muestras arqueológicas.
Tipo de contrato: Contrato de carácter científico, técnico o artístico, ref. OT2009-009
Entidad financiadora: Instituto Andaluz de Patrimonio Histórico
Duración: 02/02/2009 – 19/05/2009
Investigador responsable: Juan Antonio Poce Fatou
Número de investigadores participantes: 3
IMPORTE TOTAL DEL PROYECTO: 3975,01 €

Título del contrato / proyecto: Construcción de un sistema Acuasor, UCM-ICE según patente P200403049
Tipo de contrato: Contrato de carácter científico, técnico o artístico, ref. OT2007/075
Entidad financiadora: Instituto de Geología Económica. Consejo Superior de Investigaciones Científicas
Duración: 30/04/2007 – 31/10/2007
Investigador responsable: Joaquín Martín Calleja
Número de investigadores participantes: 3
IMPORTE TOTAL DEL PROYECTO: 22000,0 €

Título del contrato / proyecto: Construcción de un sistema Acuasor, según patente P200403049
Tipo de contrato: Contrato art. 11/45 LRU – 68/83 LOU
Entidad financiadora: IAPH, Junta de Andalucía
Duración: 15/07/2005 – 15/01/2006
Investigador responsable: Joaquín Martín Calleja
Número de investigadores participantes: 4
IMPORTE TOTAL DEL PROYECTO: 13380,0 €

Título del contrato / proyecto: Suministro y puesta en funcionamiento de 2 unidades de Autosorc-1 (sistema de determinación de parámetros de sorción en muestras porosas).
Tipo de contrato: Trabajos Carácter Técnico Referencia: OT 129/99
Entidad financiadora: Modesto Montoto San Miguel
Duración: 02/01/2002 – 12/01/2003
Investigador responsable: Joaquín Martín Calleja
Número de investigadores participantes: 4
IMPORTE TOTAL DEL PROYECTO: 26250,0 €

C.4. Patentes

Inventores (p.o. de firma): Joaquín Martín Calleja, Concepción Fernández Lorenzo, Juan Antonio Poce Fatou y Rodrigo Alcántara Puerto
Título: Un sistema automatizado y un procedimiento para el estudio de superficies con propiedades dependientes de la irradiación fotónica
N. de solicitud: P200202069 País de prioridad: España Fecha de prioridad: 02/09/2002
Entidad titular: Universidad de Cádiz

C.5

Dirección de proyecto de investigación fin de máster

Alumna: Nivis del Carmen Torres Fuentes
Título: Degradación fotoquímica de omeprazol en aguas superficiales
Directores: Juan Antonio Poce Fatou y Erkuden Pérez Carrera
Fecha de defensa: 21 de diciembre de 2010
Calificación: 8,2

INSTRUCCIONES PARA RELLENAR EL CVA

Parte A. DATOS PERSONALES		Fecha del CVA	08/04/2016
Nombre y apellidos	MARÍA DOLORES MERCHÁN MORENO		
DNI/NIE/pasaporte	07858922Y	Edad	50
Núm. identificación del investigador	Researcher ID		
	Código Orcid	0000-0003-3573-3805	

A.1. Situación profesional actual

Organismo	UNIVERSIDAD DE SALAMANCA		
Dpto./Centro	QUÍMICA FÍSICA		
Dirección	C/ GLADIOLOS, 30		
Teléfono	699912315	correo electrónico	mdm@usal.es
Categoría profesional	Profesora Titular de Universidad	Fecha inicio	23/12/1999
Espec. cód. UNESCO	221004		
Palabras clave	Adsorción, Coloides, Interfases, monocapas de Gibbs y de Langmuir, Películas de QDs.		

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

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Lic. Ciencias Químicas	Universidad de Salamanca	1988
Dr. Ciencias Químicas	Universidad de Salamanca	1992

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

- Nº de sexenios de investigación: 2
- Primer tramo: 01/01/1992-31/12/1998
- Segundo tramo: 01/01/2001-31/12/2011
- Número de tesis doctorales dirigidas en los últimos 10 años: 2
- Citas totales: 197
- Promedio de citas/año durante los últimos 5 años (2014-2018): 7.88
- Publicaciones totales en primer cuartil (Q1): 8/21
- Índice h: 9

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

My research activity begins with my doctoral thesis, directed by Prof. F. Salvador, focused on the development of the technique of Thermoprogrammed Desorption in solution. Furthermore equipment design, different surface characterization tests and theoretical models aimed at obtaining kinetic parameters of adsorption and desorption were planned. The thesis was evaluated as Cum Laude and award of doctorate. Different technical applications were investigated: Contaminant retention, recovery and improved adsorption capacity of solids, pollutant destruction, etc. The possibility of performing catalytic reactions in solution were explored, supporting the active species, allowed to use the catalyst over several cycles maintaining the catalytic activity. This line led to 11 publications and 2 patents. A stay at the Institute of Catalysis and Petrochemistry of the CSIC of one year, and another at the University of New Hampshire. It allowed me to get the first six years of research (1992-1998), and stabilize my professional status in 1999 as professor of university.

I joined in 2002 the group of Prof. M. Velázquez. This allowed me to extend my study to the field of interfaces LV. During these years, I have gained experience in handling a variety of techniques, which have allowed me to study the adsorption kinetics in the LV interface as the

drop volume, and maximum bubble pressure tensiometers. Techniques such as Langmuir balance, surface potential, dynamic light scattering, and Brewster angle microscopy allowed me to characterize Langmuir and Gibbs monolayers of surfactants and mixtures of surfactants and polymers.

The results obtained in this field have provided me a valuable experience in the process and structures of self-assembly of surfactants and polymers, and has led to the evolution towards the deposition of hydrophobic films on solid supports. These jobs developed in solution, focused on zwitterionic surfactants and polyelectrolyte gave rise to 6 publications, work Degree of Salamanca and a doctoral thesis. This second research field allowed me to get the second six years of research (2001-2011). The last years are due to my maternity in 2000 and 2003.

Once the research group learned to control the structure of monolayers formed in the LV interface, the transfer of these films to solids was addressed by Langmuir-Blodgett technique. The characterization of the deposited films was carried out with different techniques such as atomic force microscopy, ellipsometry, transmission electron microscopy, scanning electron microscopy, quartz crystal microbalance with dissipation. This experience has facilitated the preparation of films of semiconductor crystals, using surfactants and polyelectrolytes as adsorption patterns. The photochemical properties of the QDs films were determined by Fluorescence Lifetime Imaging Microscope. This research line led to four publications, a work degree of Salamanca and a doctoral thesis. The experience on the characterization of interfaces and monolayers, along with the preparation of self-assembled QDs on solid films, puts us in an ideal position to address the preparation of nanocomposites using self-assembled materials.

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (ordenados por tipología)

C.1. Publicaciones

1. T Alejo, PMR Paulo, **M.D. Merchán**, E Garcia-Fernandez, SMB Costa, **(2017)** "Influence of 3D aggregation on the photoluminescence dynamics of CdSe quantum dot films". *Journal of Luminescence* 183, 113-120 **Q1**
2. Velázquez, M.M.; Alejo, T.; López-Díaz, D.; Martín-García, B.; **Merchán, M. D., (2016)** "Langmuir-Blodgett Methodology: a Versatile Technique to Build 2D Material Films" has been accepted for publication in the book "2D Materials", ISBN 978-953-51-4813-5.
3. Alejo, T.; **Merchán, M. D.**; Velázquez, M. **2014**. Adsorption of Quantum Dots onto Polymer and Gemini Surfactant Films: A Quartz Crystal Microbalance Study. *Langmuir* 30, pp. 9977 - 9984.
Posición de la revista en la categoría Physical Chemistry (ref. 2014): **(33/139) Q1**
4. Alejo T.; Martín-García, B.; **Merchán, M.D.**; Velázquez, M.M., **2013**. QDs-supported on Langmuir-Blodgett films of polymers and Gemini surfactant. *Journal of Nanomaterials* vol. 2013, Article ID 287094, 10 pages, 2013. doi:10.1155/2013/287094
Posición de la revista en la categoría Materials Science, Multidisciplinary (ref. 2013): **(104/251) Q2**
5. Alejo T.; **Merchán, M.D.**; Velázquez, M.M., **2013**. Polymer/surfactant assisted self-assembly of nanoparticles into Langmuir-Blodgett films. *Materials Chemistry and Physics* 138 (1), pp. 286-294.
Posición de la revista en la categoría Materials Science, Multidisciplinary (ref. 2013): **(70/251) Q2**
6. Alejo, T.; **Merchán, M. D.**; Velázquez, M. **2011**. Specific ion Effects on the Properties of Cationic Gemini Surfactant Monolayers. *Thin solid films*. 519/16, pp. 5689 - 5695.
Posición de la revista en la categoría Materials Sciences, Coatings and Films (ref. 2011): **(4/18) Q1**
7. Delgado, C.; **Merchán, M. D.**; Velázquez, M., **2008**. Effect of the addition of polyelectrolytes on monolayers of carboxibetaines. *Journal of Physical Chemistry B*. 112, pp. 687 - 693.

Posición de la revista en la categoría Physical Chemistry (ref. 2008): **(22/113), Q1**

8. J. Rivera Utrilla; M.A. Ferro García; I. Bautista Toledo; Sánchez, M. D. C.; Salvador, F.; **Merchán, M. D.** 2003. "Regeneration of ortho-chlorophenol-exhausted activated carbons with liquid water at high pressure and temperature. *Water Research*. 37, pp. 1905 - 1911.

Posición de la revista en la categoría Environmental Engineering (ref. 2003): **(4/35), Q1**

9. K. Wilkinson; **Merchán, M. D.**; P.T. Vasudevan. **1997**. Characterization of tungsten Sulfide Catalysts ex Ammonium thiotungstate. *Journal of Catalysis*. 171, pp. 325 - 328.

Posición de la revista en la categoría Physical Chemistry (ref. 1997): **(5/86) Q1**

10. Salvador, F.; **Merchán, M. D.** **1996**. Study of the desorption of Phenol and Phenolic compounds from activated carbon by Liquid-Phase Temperature-Programmed Desorption. *Carbon*. 34 (12), pp. 1543 - 1551.

Posición de la revista en la categoría Materials (ref. 1997): **(16/111) Q1**

11. Salvador, F.; **Merchán, M. D.** **1992**. A Simple Apparatus for Studies of Thermoprogrammed Desorption in Solution. *Langmuir*. 8, pp. 1226 - 1229.

Posición de la revista en la categoría Physical Chemistry (ref. 1997): **(10/86) Q1**

C.2. Participación en Proyectos

Título del proyecto: Propiedades de nuevos sistemas nanoestructurados de importancia tecnológica. CTQ2016-78895-R.

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad

Duración: 2017-19

Investigador responsable: R. González Rubio

Cuantía de la subvención: 134.310 €

Título del proyecto: Nuevas Tecnologías Basadas en Grafeno y Nanoestructuras Semiconductoras. SA045U16.

Entidad financiadora: Junta de Castilla y León

Duración: 2016-18

Investigador responsable: E. Diez

Cuantía de la subvención: 119.999 €

Título del proyecto: ICP Para Ataque Seco de Nanomateriales

Entidad financiadora: S2818001F Ministerio de Economía y competitividad

Duración: 01/01/2015-31/12/2015

Investigador responsable: Enrique Díez Fernández

Cuantía de la subvención: 582.374,63 Euros

Título del proyecto: Espectrómetro de Micro-Raman para la Universidad de Salamanca

Entidad financiadora: S2818001F, Ministerio de Economía y competitividad

Duración: 01/01/2015-31/12/2015

Investigador responsable: M. M. Velázquez

Cuantía de la subvención: 228.269,01 Euros

Título del proyecto: Modulación de las propiedades de sistemas nanoestructurados, puntos cuánticos y grafeno, mediante la utilización de sistemas autoensamblados de polímeros y tensioactivos

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación

Duración, desde 2011 hasta: 2013.

Investigador responsable: M. M. Velázquez

Cuantía de la subvención: 84.700 Euros

Título del proyecto: NATIONAL TEAMS OF BOLONIA EXPERTS

Entidad financiadora: Agencia Ejecutiva Europea EACEA

Duración, desde 2011 hasta: 2013.

Investigador responsable: Francisco Javier Jiménez Leube (Coordinador Institucional)

Título del proyecto: Formación y propiedades de películas densas de polímeros adsorbidos en la interfase aire-agua: posibilidad de utilizarlas para la fabricación de sensores ópticos.
Entidad financiadora: ASGINV000295100 Junta de Castilla y León
Duración, desde 2008 hasta: 2010.
Investigador responsable: M. M. Velázquez
Cuantía de la subvención: 11.00 Euros

Título del proyecto: Interfases fluidas: propiedades de equilibrio y dinámicas de interfases con polímeros y tensioactivos.
Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia
Duración, desde 2008 hasta: 2010.
Investigador responsable: M. M. Velázquez
Cuantía de la subvención: 48.400 Euros

Título del proyecto: Estructura y propiedades de interfases que contienen tensioactivos y polímeros.
Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia
Duración: 2005-2007
Investigador responsable: M.M. Velázquez
Cuantía de la subvención: 64.400 Euros

Título del proyecto: Estudio dinámico de la adsorción de tensioactivos en la interfase aire/agua: efecto de la estructura del tensioactivo y de la adición de polímeros
Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia
Duración, desde: 2002 hasta: 2004
Investigador responsable: M.M. Velázquez
Cuantía de la subvención: 40.433,07 Euros

C.3. Contratos

C.4. Patentes

1. Inventores (p.o. de firma): Francisco Salvador; **María Dolores Merchán**

Título: Procedimiento y aparato de desorción térmica programada

N. de solicitud: P92-01729 País de prioridad: España Fecha de prioridad: 1992

Entidad titular: Universidad de Salamanca

Países a los que se ha extendido: CEE (93500099.2), USA (5.400.642)

Empresa/s que la están explotando:

2. Inventores (p.o. de firma): Francisco Salvador; **María Dolores Merchán**; Carmen Sánchez.

Título: Mejoras en la patente N° 9201729, relativas a un procedimiento y aparato de desorción térmica programada.

N. de solicitud: 9500669 País de prioridad: España Fecha de prioridad: 1995

Entidad titular: Universidad de Salamanca

Países a los que se ha extendido:

Empresa/s que la están explotando:

3. Inventores (p.o. de firma): Francisco Salvador; **María Dolores Merchán**; Carmen Sánchez; Aurelio Salvador.

Título: Procedimiento y aparato para la producción de carbón activo

N. de solicitud: P9801552 País de prioridad: España Fecha de prioridad: 1998

Entidad titular: Universidad de Salamanca

Países a los que se ha extendido: USA (09/209,439)

Empresa/s que la están explotando:

C6. Directora de 1 Tesis doctoral, 9 Trabajos fin de Máster y 5 TFG (2013-2018).

C5. Directora del Servicio de Promoción, Información y Orientación de la Universidad de Salamanca.

Fecha de concesión: 01/10/2014 hasta 25/02/2018.

C6. Descripción del mérito: Coordinadora de Ordenación de Titulaciones, Vicerrectorado de Docencia de la Universidad de Salamanca.

Fecha de concesión: 01/09/2012 hasta 30 de septiembre de 2014.

C7. Descripción del mérito: Miembro del Equipo Español de Expertos de Bolonia (BET)

Fecha de concesión: 16/05/2013

C8. Descripción del mérito: Vicedecana de calidad de la Facultad de Ciencias Químicas.

Fecha de concesión: 27/09/2009 hasta 05/09/2010

C9. Descripción del mérito: EVALUADOR DEL PROGRAMA DOCENTIA DE LA UNIVERSIDAD DE SALAMANCA.

Fecha de concesión: 01/09/2010.

C10. Descripción del mérito: Secretaria del Comité Organizador de la VI Reunión del Grupo Especializado de Coloides e Interfases y I Reunión Ibérica de Coloides e Interfases de la RSEQ. Salamanca, 13-15 de julio de 2005.

Fecha del CVA	01/10/2018
---------------	------------

Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre y Apellidos	Santiago Aparicio Martínez		
DNI	13147670L	Edad	46
Núm. identificación del investigador	Researcher ID		
	Scopus Author ID		
	Código ORCID	0000-0001-9996-2426	

A.1. Situación profesional actual

Organismo	Universidad de Burgos		
Dpto. / Centro	Departamento de Química / Facultad de Ciencias		
Dirección	Plaza Misael Bañuelos s.n., 09001, Burgos		
Teléfono	(34) 661925129	Correo electrónico	sapar@ubu.es
Categoría profesional	Profesor Titular de Universidad	Fecha inicio	2009
Espec. cód. UNESCO	230700 - Química física		
Palabras clave	Química física de materiales; Química computacional; Gas natural		

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

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Programa de doctorado en química	Universidad de Burgos	2001

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

Santiago Aparicio ha publicado 160 artículos JCR y 5 capítulos de libros, dando lugar a un índice de impacto de 32. El 75 % de los artículos publicados pertenecen a revistas tipo Q1 de sus correspondientes áreas.

El autor tiene tres sexenios de investigación evaluados positivamente (incluyendo sexenio vivo).

Ha dirigido proyectos de investigación financiados por agencias regionales, nacionales e internacionales (incluyendo tres proyectos H2020).

Sus líneas de investigación se desarrollan en colaboración con grupos en Qatar University, Texas A&M University (USA), Heriott Watt University (UK), Korean Advanced Institute of Science and Technology, así como con diversos grupos de investigación en España.

Su trabajo de investigación ha dado lugar a varios artículos con alto impacto. Por ejemplo, su estudio sobre las propiedades termofísicas de líquidos iónicos ha sido el tercer trabajo más citado en la revista Industrial and Engineering Chemistry Research (American Chemical Society) y ha sido seleccionado para formar parte del special issue "Most-Cited: All-Time Greats and Contemporary Favorites" de dicha revista. Asimismo, su trabajo sobre las propiedades de los Deep Eutectic Solvents publicado en la revista Energy and Fuels (American Chemical Society) ha sido el segundo artículo más leído en los últimos dos años en dicha revista.

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (ordenados por tipología)

C.1. Publicaciones

- Artículo científico.** Santiago Aparicio; Mert Atilhan; Alberto Gutierrez. 2018. A Theoretical Study of Oil Desulfuration by Ammonium-Based Deep Eutectic Solvents Energy & Fuels. American Chemical Society. 32-7, pp.7497-7507.
- Artículo científico.** Santiago Aparicio; Mert Atilhan; Alberto Gutierrez. 2018. A nanoscopic approach on benzene-toluene-xylenes extraction by sulfolane Journal of Molecular Liquids. Elsevier. 249, pp.1039-1046.

- 3 **Artículo científico.** Santiago Aparicio; Mert Atilhan; Cesar Herrera. 2018. A theoretical study on mixtures of amino acid-based ionic liquids *Physical Chemistry Chemical Physics*. Royal Society of Chemistry. 20-15, pp.10213-10223.
- 4 **Artículo científico.** S. Aparicio; et al. 2018. Adsorption equilibrium studies of CO₂, CH₄ and N₂ on various modified zeolites at high pressures up to 200 bars *Journal of Molecular Liquids*. Elsevier. 256, pp.286-295.
- 5 **Artículo científico.** S. Aparicio; et al. 2018. Adsorption equilibrium studies of CO₂, CH₄ and N₂ on various modified zeolites at high pressures up to 200 bars *Journal of Molecular Liquids*. Elsevier. 256, pp.286-295.
- 6 **Artículo científico.** Mert Atilhan; et al. 2018. Adsorption equilibrium studies of CO₂, CH₄ and N₂ on various modified zeolites at high pressures up to 200 bars *Microporous and Mesoporous Materials*. Elsevier. 262, pp.49-58.
- 7 **Artículo científico.** M. Atilhan; et al. 2018. Cost-effective alkylammonium formate-based protic ionic liquids for methane hydrate inhibition *Journal of Natural Gas Science and Technology*. Elsevier. 58, pp.59-68.
- 8 **Artículo científico.** Santiago Aparicio; et al. 2018. Insights on the mixtures of imidazolium based ionic liquids with molecular solvents *Journal of Molecular Liquids*. Elsevier. 255, pp.199-207.
- 9 **Artículo científico.** Santiago Aparicio; Mert Atilhan; Rafael Alcalde. 2018. Intermolecular forces in 1-butyl-3-methylimidazolium bis (trifluoromethylsulfonyl) imide+ ethanol mixtures *Journal of Molecular Liquids*. Elsevier. 258, pp.1-9.
- 10 **Artículo científico.** Santiago Aparicio; et al. 2018. Microscopic characterization of mixtures of amino acid ionic liquids and organic solvents *Journal of Molecular Liquids*. Elsevier. 250, pp.111-120.
- 11 **Artículo científico.** Santiago Aparicio; Mert Atilhan. 2018. Molecular Dynamics Simulations of Metal Nanoparticles in Deep Eutectic Solvents *Journal of Physical Chemistry C*. American Chemical Society. 122-31, pp.18029-18039.
- 12 **Artículo científico.** M. Atilhan; C.T. Yavuz; S. Aparicio. 2018. Molecular Insights into Benzimidazole-Linked Polymer Interactions with Carbon Dioxide and Nitrogen *Chemistry Select*. Wiley. 3-13, pp.3691-3701.
- 13 **Artículo científico.** Santiago Aparicio; Mert Atilhan; Alberto Gutierrez. 2018. Molecular Modeling Analysis of CO₂ Absorption by Glymes *Journal of Physical Chemistry B*. American Chemical Society. 122-6, pp.1948-1957.
- 14 **Artículo científico.** Santiago Aparicio; et al. 2018. Molecular dynamics and experimental characterization of [BMIM][BF₄] and [BMIM][PF₆] with ether cosolvent binary mixtures *Journal of Molecular Liquids*. Elsevier. 271, pp.65-73.
- 15 **Artículo científico.** S. Aparicio; et al. 2018. On the properties and structure of 2-hydroxyethylammonium formate ionic liquid *Journal of Molecular Liquids*. Elsevier. 249, pp.233-244.
- 16 **Artículo científico.** M. Atilhan; C.T. Yavuz; S. Aparicio. 2018. Structural Elucidation of Covalent Organic Polymers (COP) and Their Linker Effect on Gas Adsorption Performance via Density Functional Theory Approach *Chemistry Select*. Wiley. 3-28, pp.8294-8305.
- 17 **Artículo científico.** Santiago Aparicio; Mert Atilhan. 2018. Theoretical Study of Low Viscous Ionic Liquids at the Graphene Interface *Journal of Physical Chemistry C*. American Chemical Society. 122-3, pp.1645-1656.
- 18 **Artículo científico.** Herrera, C.; et al. 2017. A theoretical study on amino acid-based ionic liquids with acid gases and water *Journal of Molecular Liquids*. 225, pp.347-356.
- 19 **Artículo científico.** Altamash, T.; et al. 2017. Carbon Dioxide Solubility in Phosphonium-, Ammonium-, Sulfonyl-, and Pyrrolidinium-Based Ionic Liquids and their Mixtures at Moderate Pressures up to 10 bar *Journal of Chemical and Engineering Data*. 62-4, pp.1310-1317.
- 20 **Artículo científico.** Santiago Aparicio; et al. 2017. Elucidating the Properties of Graphene–Deep Eutectic Solvents Interface *Langmuir*. American Chemical Society. 33-21, pp.5154-5165.
- 21 **Artículo científico.** Mert Atilhan; et al. 2017. Gas Solubility and Rheological Behavior of Natural Deep Eutectic Solvents (NADES) via Combined Experimental and Molecular Simulation Techniques *Chemistry Select*. Wiley.

- 22 **Artículo científico.** Qureshi, M.F.; et al. 2017. High-pressure gas hydrate autoclave hydraulic experiments and scale-up modeling on the effect of stirring RPM effect *Journal of Natural Gas Science and Engineering.* 38, pp.50-58.
- 23 **Artículo científico.** Santiago Aparicio; et al. 2017. Insights into Glycol Ether–Alkanol Mixtures from a Combined Experimental and Theoretical Approach *Journal of Physical Chemistry B. American Chemical Society.* 121-22, pp.5601-5612.
- 24 **Artículo científico.** Mohamed, N.A.; et al. 2017. Investigation of the performance of biocompatible gas hydrate inhibitors via combined experimental and DFT methods *Journal of Chemical Thermodynamics.* 111, pp.7-19.
- 25 **Artículo científico.** Lourenço, T.C.; et al. 2017. Local environment structure and dynamics of CO₂ in the 1-ethyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethanesulfonyl)imide and related ionic liquids *Journal of Chemical Physics.* 146-10.
- 26 **Artículo científico.** Santiago Aparicio; Mert Atilhan; Alberto Gutiérrez. 2017. Microscopic Characterization of CO₂ and H₂S Removal by Sulfolane *Energy and Fuels. American Chemical Society.* 31-9, pp.9800-9813.
- 27 **Artículo científico.** Herrera, C.; et al. 2017. Microscopic characterization of amino acid ionic liquids - water mixtures *Journal of Molecular Liquids.* 236, pp.81-92.
- 28 **Artículo científico.** Santiago Aparicio; Luciano Costa; Mert Atilhan. 2017. On the behaviour of aqueous solutions of deep eutectic solvents at lipid biomembranes *Journal of Molecular Liquids. Elsevier.* 247, pp.116-125.
- 29 **Artículo científico.** Altamash, T.; et al. 2017. Rheological, Thermodynamic, and Gas Solubility Properties of Phenylacetic Acid-Based Deep Eutectic Solvents *Chemical Engineering and Technology.* 40-4, pp.778-790.
- 30 **Artículo científico.** García, G.; Atilhan, M.; Aparicio, S.2017. Simultaneous CO₂ and SO₂ capture by using ionic liquids: A theoretical approach *Physical Chemistry Chemical Physics.* 19-7, pp.5411-5422.
- 31 **Artículo científico.** Mohamad Tariq; et al. 2016. Experimental and DFT Approach on the Determination of Natural Gas Hydrate Equilibrium with the Use of Excess N₂ and Choline Chloride Ionic Liquid as an Inhibitor *Energy and Fuels. American Chemical Society.* 30, pp.DOI: 10.1021/acs.energyfuels.6b00117.
- 32 **Artículo científico.** Fahed Qureshi; et al. 2016. Gas Hydrate Prevention and Flow Assurance by Using Mixtures of Ionic Liquids and Synergent Compounds: Combined Kinetics and Thermodynamic Approach *Energy and Fuels. American Chemical Society.* 30, pp.DOI: 10.1021/acs.energyfuels.5b03001.
- 33 **Artículo científico.** Ruh Ullah; et al. 2016. Synthesis, characterization and evaluation of porous polybenzimidazole materials for CO₂ adsorption at high pressures *Adsorption. Springer.* 22, pp.247-260.
- 34 **Artículo científico.** Gregorio García; Mert Atilhan; Santiago Aparicio. 2016. Flavonol–carbon nanostructure hybrid systems: a DFT study on the interaction mechanism and UV/Vis features† *Physical Chemistry Chemical Physics. Royal Society of Chemistry.* 18, pp.4760-4771.
- 35 **Artículo científico.** Herrera, C.; et al. 2016. A molecular dynamics study on aminoacid-based ionic liquids *Journal of Molecular Liquids.* 213, pp.201-212.
- 36 **Artículo científico.** Atilhan, M.; Aparicio, S.2016. Deep eutectic solvents on the surface of face centered cubic metals *Journal of Physical Chemistry C.* 120-19, pp.10400-10409.
- 37 **Artículo científico.** Atilhan, M.; et al. 2016. Double Salt Ionic Liquids Based on Ammonium Cations and Their Application for CO₂ Capture *Journal of Physical Chemistry C.* 120-31, pp.17829-17844.
- 38 **Artículo científico.** Tariq, M.; et al. 2016. Experimental and DFT Approach on the Determination of Natural Gas Hydrate Equilibrium with the Use of Excess N₂ and Choline Chloride Ionic Liquid as an Inhibitor *Energy and Fuels.* 30-4, pp.2821-2832.
- 39 **Artículo científico.** García, G.; Atilhan, M.; Aparicio, S.2016. Flavonol-carbon nanostructure hybrid systems: A DFT study on the interaction mechanism and UV/Vis features *Physical Chemistry Chemical Physics.* 18-6, pp.4760-4771.
- 40 **Artículo científico.** Qureshi, M.F.; et al. 2016. Gas Hydrate Prevention and Flow Assurance by Using Mixtures of Ionic Liquids and Synergent Compounds: Combined Kinetics and Thermodynamic Approach *Energy and Fuels.* 30-4, pp.3541-3548.

- 41 **Artículo científico.** Ullah, R.; et al. 2016. High performance CO₂ filtration and sequestration by using bromomethyl benzene linked microporous networks RSC Advances. 6-70, pp.66324-66335.
- 42 **Artículo científico.** Altamash, T.; et al. 2016. Insights into choline chloride-phenylacetic acid deep eutectic solvent for CO₂ absorption RSC Advances. 6-110, pp.109201-109210.
- 43 **Artículo científico.** Ullah, R.; et al. 2016. Investigation of Ester- and Amide-Linker-Based Porous Organic Polymers for Carbon Dioxide Capture and Separation at Wide Temperatures and Pressures ACS Applied Materials and Interfaces. 8-32, pp.20772-20785.
- 44 **Artículo científico.** Gregorio García Moreno; Mert Atilhan; Santiago Aparicio Martínez. 2015. Interfacial Properties of Double Salt Ionic Liquids: A Molecular Dynamics Study Journal of Physical Chemistry C. American Chemical Society. 120.

C.2. Proyectos

- 1 MODELIZACIÓN TEÓRICA DE DISOLVENTES EUTÉCTIVOS PARA EL DISEÑO DE PROCESOS DE SEPARACIÓN SOSTENIBLES Junta de Castilla y León. Santiago Aparicio. (Universidad de Burgos). 01/06/2018-31/05/2021. 120.000 €.
- 2 CO2MPRISE (H2020 - MSCA-RISE-2016-CO2MPRISE-734873) H2020 Program. (Universidad de Burgos). 01/03/2017-28/02/2021. 702.000 €.
- 3 DRYNET (H2020 - MSCA-RISE-2016-DRYNET-734434) (Universidad de Burgos). 01/01/2017-31/12/2019. 841.500 €.
- 4 Methane Storage and Natural Gas Sweetening Processes By Porous Nanocomposites of Ionic Liquids Qatar National Research Fund. Cafer Yavuz. (Universidad de Burgos). 01/01/2016-31/12/2018. 900.000 €.
- 5 Captura de CO₂ en post-combustión utilizando líquidos iónicos Junta de Castilla y León. Gregorio García Moreno. (Universidad de Burgos). 01/01/2014-31/12/2017. 28.750 €.
- 6 SOLUTION (H2020-MSCA-ITN-2016-SOLUTION-GA-721642) H2020 Program. (Universidad de Burgos). 01/03/2017-28/02/2017. 3.510.527 €.
- 7 APLICACION DE LIQUIDOS IONICOS A LA CAPTURA DE GASES ACIDOS: UN ESTUDIO TEORICO Y EXPERIMENTAL Ministerio de Economía y Competitividad. Santiago Aparicio Martínez. (Universidad de Burgos). 01/01/2014-31/12/2016. 59.000 €.
- 8 Avoiding Gas Hydrate Problems in Qatari's Oil and Gas Industry: An Integrated Experimental and Modeling Approach Qatar National Research Fund. Bahman Tohidi. (Universidad de Burgos). 01/11/2013-01/11/2016. 1.048.000 €.
- 9 Líquidos iónicos como nuevos absorbentes físicos para la captura de CO₂ Santiago Aparicio Martínez. (Universidad de Burgos). 01/12/2010-31/12/2013. 180.150 €.
- 10 A Quantum Chemistry Study of Natural Gas Hydrates Nezhil Pala. (National Energy Research Scientific Computing Center - Department of Energy-USA). 01/01/2012-31/12/2012. 50.000 €.
- 11 Measurements of Densities and Phase Envelopes for Qatari Type Natural Gas Mixtures and Development of a Rational Equation of State to Describe the Data Qatar National Research Fund. Mahmoud El-Halwagi. (Universidad de Burgos). 01/04/2008-01/04/2011. 1.050.000 €.

C.3. Contratos

- 1 Study of the system ethyl lactate + lactic acid + water system. TRIMB HEALTHCARE. Desde 01/01/2017. 12.000 €.
- 2 Study of Cyclodextrines Complexation with Amygdalin CTD Holdings - CYCLODEX. Santiago Aparicio Martínez. 01/06/2015-P1Y. 25.000 €.

C.4. Patentes

Parte A. DATOS PERSONALES		Fecha del CVA		02/10/2008	
Nombre y apellidos	Begoña García Ruiz				
DNI/NIE/pasaporte	122144168S		Edad	65	
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	L-4805-2014			
	Código Orcid	https://orcid.org/0000-0002-0817-1651			

A.1. Situación profesional actual

Organismo	Universidad de Burgos				
Dpto./Centro	Facultad de Ciencias				
Dirección	Plaza Misael Bañuelos s/n				
Teléfono	628644811	correo electrónico	begar@ubu.es		
Categoría profesional	CAUN		Fecha inicio	15/12/ 2011	
Espec. cód. UNESCO	230226, 230223, 241401, 230206, 230307, 230321, 239001, 2307, 2213, 3201.01, 2390.01, 2210.28-1				
Palabras clave	Complejos metálicos, clústeres cuánticos, antitumorales, terapia fotodinámica, antimicrobianos, ácidos nucleicos, G-cuádruplex.				

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

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Doctorado	Valladolid	1977
Doctorado	Valladolid	1984

Publicaciones:

- D. Buceta, N. Busto, G. Barone, J. M. Leal, F. Domínguez, L. J. Giovanetti, F. G. Requejo, B. García and M. A. López-Quintela.
 Ag₂ and Ag₃ clusters: synthesis, characterization and interaction with DNA
Angew. Chemie, Int. Edit. **2015**, 54 (26), 7612-7616.
- J. Neissa, C. Pérez-Arnaiz, V. Porto, N. Busto, E. Borrajo, J. M. Leal, M. A. López-Quintela, B. García, and F. Domínguez
 Interaction of silver metal clusters with living organisms: bactericidal effect of Ag₃ clusters mediated by disruption of topoisomerase-DNA complexes
Chem. Sci. **2015**, 6, 6717 – 6724.
Hot article en julio de 2015 y Front Cover del número de diciembre.
- B. Díaz de Greñu, J. García-Calvo, J. V. Cuevas, G. García-Herbosa, B. García, N. Busto, S. Ibeas, T. Torroba, B. Torroba, A. Herrera and S. Pons,
 Chemical Speciation of MeHg⁺ and Hg²⁺ in Water Solutions and HEK Cells Nuclei by means of DNA Interacting Fluorogenic Probes
Chem. Sci. **2015**, 6, 3757–3764
- Vanesa Porto, Erea Borrajo, David Buceta, Carmen Carneiro, Shahana Huseyinova, José Neissa, Tomás García-Caballero, Giampaolo Barone, M. Carmen Blanco, Natalia Busto, Begoña García, José María Leal, José Blanco, José Rivas, M. Arturo López-Quintela and Fernando Domínguez
 Silver nanoclusters augment the therapeutic index of DNA-binding drugs by increasing chromatin accessibility.
Adv. Mater. **2018**, 1801317 Inside front cover del número de agosto
- C. Pérez-Arnaiz, M. I. Acuña, N. Busto, I. Echevarría, M. Martínez-Alonso, G. Espino, B. García, F. Domínguez.
 Thiabendazole-based Rh(III) and Ir(III) Biscyclometallated Complexes with Mitochondria-Targeted Anticancer Activity and Metal-Sensitive Photodynamic Activity. *Eur. J. Med. Chem.* **2018**, 157, 279e293

6. Natalia Busto, Patricia Calvo, Javier Santolaya, José M. Leal, Aurore Guédin Giampaolo Barone, Tomás Torroba, Jean L. Mergny, and Begoña García.
Fishing G- quadruplexes in solution with a perylene diimide derivative labeled with biotins. *Chem.-Eur. J.* **2018**, 24, 11292 – 11296
7. Mónica Vaquero, Alba Ruiz-Riaguas, Marta Martínez-Alonso, Félix A. Jalón, Blanca R. Manzano, Ana M. Rodríguez, Gabriel García-Herbosa, Arancha Carbayo, Begoña García, Gustavo Espino.
Selective Photooxidation of Sulphides catalyzed by Biscyclometalated Ir(III) Photosensitizers Bearing 2,2'- dipyridylamine Based Ligands
Chem.-Eur. J. **2018**, 24, 10662 – 10671 Back cover del número de mayo.
8. Anna Łęczkowska, Jorge Gonzalez-Garcia, Cristina Perez-Arnaiz, Begoña García, Andrew J. P. White, Ramon Vilar.
Binding studies of metal-salphen and metal-bipyridine complexes towards G-quadruplex DNA *Chem.-Eur. J.* **2018**, 24, 11785 – 11794
9. M. Martínez-Alonso, N. Busto, L. D. Aguirre, L. Berlanga, M. C. Carrión, J. V. Cuevas, A. M. Rodríguez, A. Carbayo, B. R. Manzano, E. Ortí, F. A. Jalón, B. García, G. Espino
Strong Influence of the Ancillary Ligand over the Photodynamic Anticancer Properties of Neutral Biscyclometalated Ir(III) Complexes Bearing 2-Benzoazole-Phenolates
Chem.-Eur. J. **2018** .Propuesto para cover. Doi: 10.1002/chem.201803784.
10. M. Lari.; M. Martínez-Alonso; N. Busto; B.R. Manzano; A.M. Rodríguez; M.I. Acuña; F. Dominguez; J.L. Albasanz; J.M. Leal; G. Espino; B. García
Strong influence of the ancillary ligands containing benzothiazole or benzimidazole rings, in the cytotoxicity and photoactivation of Ru(II) arene complexes.
Inorg. Chem. **2018**. (en revisión, propuesto para cover)

Proyectos

1. Título del Proyecto: Interacción de ADN con complejos organometálicos de Ru(II) y Clústeres Cuánticos Atómicos (AQC'S)
Entidad Financiadora: Obra Social la Caixa (LCF/PR/PR12/11070003)
Duración: 4 años Cuantía de la subvención: 1.172.080 €
Concedido: Enero 2013-diciembre 2016
Investigadores responsables: Begoña García y José M. Leal (Universidad de Burgos) y Manuel Arturo López Quintela y Fernando Domínguez (Universidad de Santiago de Compostela)
2. Título del Proyecto: Síntesis, caracterización y estudio de las propiedades antitumorales de Clústeres Cuánticos Atómicos (AQC's) y complejos organometálicos de Ru(II), Ir(III) y Rh(III). *Este proyecto es prórroga del anterior.*
Entidad Financiadora: Obra Social la Caixa
Duración: 3 años Cuantía de la subvención: 879.060 €
Concedido: Enero 2017-diciembre 2019
Investigadores responsables: los mismos del anterior proyecto.
3. Título del Proyecto: Interacción de ADN y proteínas con Clústeres Cuánticos Atómicos de plata y de cobre de distinta atomicidad y con Complejos metalorgánicos de Ru(II), Ir(III) y Rh(III). Interés biológico.
Junta de Castilla y León BU042U16
Concedido: junio 2016-junio 2018
Cuantía 120.000 € (incluyó Contratado Doctor por 21 meses).
IP: Begoña García y José M. Leal
4. Título del Proyecto: Nuevas estrategias en el diseño de compuestos metalorgánicos como fármacos anticancerígenos y catalizadores. Estudio del mecanismo de acción sobre ADN y proteínas como posibles dianas biológicas

Ministerio de Economía y Competitividad CTQ2014-58812-C2-2-R
Concedido: abril 2015-agosto 2018
Cuantía 66.550 €
IP: Begoña García y José M. Leal

Patentes

COMPLEJOS DE IRIDIO(III) DE FÓRMULA GENERAL $[\text{Ir}(\text{C}^{\wedge}\text{N})_2(\text{N}^{\wedge}\text{O})]$ o $[\text{Ir}(\text{C}^{\wedge}\text{N})_2(\text{N}^{\wedge}\text{N}')]$

Número de publicación: 2 642 114. Número de solicitud: 201630610. Fecha de presentación: 11.05.2016. Fecha de publicación de la solicitud: 15.11.2017. Fecha de concesión: 14.05.2018 Fecha de publicación de la concesión: 22.05.2018
En total 13 firmantes, la IP en el numero 12.

Tesis doctorales

Durante la realización del proyecto que termina 3 tesis doctorales, reconocidas con Premio Extraordinario, Hector J. Lozano (codirigida por B. Garcia y N. Busto), Matteo Lari (B. Garcia y José M. Leal) y Cristina Pérez-Arnaiz (B. Garcia y N. Busto). Dos se presentaron en 2019, Ana Rosa Rubio (B. Garcia y N. Busto) y Javier Santolaya (B. García y G. Barone) y dos mas estan en el primer año de realización, Jairo Fidalgo (B. García y G. Espino) y Nathalie Fernández (B. Garcia y N. Busto).

CURRICULUM VITAE ABREVIADO (CVA)

DATOS PERSONALES

Fecha del CVA	15/10/2018
---------------	------------

Nombre y apellidos	MARÍA DEL PILAR GARCÍA SANTOS		
DNI	11955106M	Fecha de Nacimiento	23/04/1968

Situación profesional actual

Organismo	Universidad de Salamanca		
Dpto./Centro	Departamento de Química Física/Facultad de Farmacia		
Dirección	Campus Miguel Unamuno, 37007 Salamanca		
Teléfono	670546560; ext. 6271 677585072; ext. 6765	correo electrónico	pigarsan@usal.es
Categoría profesional	Profesor Titular de Universidad	Fecha inicio	26/07/2010
Espec. cód. UNESCO	221003		
Palabras clave	Cinética Química. Reactividad Química. Mecanismos de formación de nitrosocompuestos cancerígenos. Mecanismos de alquilación de moléculas modelo del ADN		

FORMACIÓN ACADÉMICA

- 1 LICENCIADA en Ciencias Químicas. Universidad de Salamanca. 1992.
- 2 GRADO DE SALAMANCA "Tesis de Licenciatura". 1993.
- 3 DOCTORA EN QUÍMICA por la Universidad de Salamanca. 1999. Calificación: Sobresaliente cum laude por unanimidad.
- 4 PREMIO EXTRAORDINARIO DE DOCTORADO.

ACTIVIDADES ANTERIORES DE CARÁCTER CIENTÍFICO O PROFESIONAL

- 1 BECARIA PREDOCTORAL DE INVESTIGACIÓN (FPU). Dpto. Química Física, Fac. C. Químicas, Univ. Salamanca. 01/04/1995-31/03/1999.
- 2 BECARIA de Proyectos de I+DT del Centro de Investigación y Desarrollo Tecnológico del Agua (CIDTA) de la Univ. de Salamanca. 01/05/2000-28/02/2001 y 01/04/2001-05/11/2001.
- 3 PROFESORA de la Facultad de Ciencias Biológicas de la Universidad S.E.K. Segovia. 10/10/2000-18/02/2001.
- 4 PROFESORA ASOCIADA TIPO 2. Dpto. Química Física, Fac. C. Químicas, Univ. Salamanca. 19/02/2001-30/09/2003.
- 5 PROFESORA AYUDANTE DOCTORA. Dpto. Química Física, Fac. Farmacia, Univ. Salamanca. 01/10/2003-15/05/2005.
- 6 PROFESORA CONTRATADA DOCTORA. Dpto. Química Física, Fac. Farmacia, Univ. Salamanca. 16/05/2005-25/07/2010.

GESTIÓN

- 1 DIRECTORA DEL MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA de la Universidad de Salamanca. 01/10/2014-30/09/2016.
- 2 SUBDIRECTORA DEL DEPARTAMENTO DE QUÍMICA FÍSICA de la Universidad de Salamanca desde 22/10/2016.
- 3 Investigadora Principal del Proyecto "Diseño de un método de seguimiento cinético de reacciones de alquilación de las bases nitrogenadas del ADN" de la Universidad de Salamanca. 01/05/2017-31/12/2018.

ACTIVIDAD INVESTIGADORA

Publicaciones representativas

- 1.- González-Jiménez, M.; Arenas-Valgañón, J.; García-Santos, M. P.; Calle, E.; Casado, J. Mutagenic products are promoted in the nitrosation of tyramine ***Food Chemistry* 2017, 216, 60-65.**
- 2.- Marina González Pérez, Rafael Gómez Bombarelli, M. Teresa Pérez Prior, Jorge Arenas Valgañón, M. del Pilar García Santos, Emilio Calle, Julio Casado. Alkylating Potential of Styrene Oxide: Reactions and Factors Involved in the Alkylation Process. ***Chemical Research in Toxicology* 2014,27, 1853-1859.**
- 3.- Marina González Pérez, Rafael Gómez Bombarelli, Jorge Arenas Valgañón, M. Teresa Pérez Prior, M. del Pilar García Santos, Emilio Calle, Julio Casado. Connecting the Chemical and Biological Reactivity of Epoxides. ***Chemical Research in Toxicology* 2012, 25, 2755-2762.**
- 4.- M. Teresa Pérez Prior, Rafael Gómez Bombarelli, Marina González Pérez, José A. Manso, M. del Pilar García Santos, Emilio Calle, Julio Casado. Reactivity of the Mutagen 1,4-Dinitro-2-methylpyrrole as an Alkylating Agent. ***Journal of Organic Chemistry* 2010, 75, 1444-1449.**
- 5.- M. Teresa Pérez Prior, Rafael Gómez Bombarelli, Marina González Pérez, José A. Manso, M. del Pilar García Santos, Emilio Calle, Julio Casado. Sorbate-Nitrite Interactions: Acetonitrile Oxide as an Alkylating Agent. ***Chemical Research in Toxicology* 2009, 22, 1320-1324.**
- 6.- M. Teresa Pérez Prior, José A. Manso, M. del Pilar García Santos, Emilio Calle, Julio Casado. Alkylating Potential of Potassium Sorbate. ***Journal of Agricultural and Food Chemistry* 2005, 53, 10244-10247.**
- 7.- José A. Manso, M. Teresa Pérez Prior, M. del Pilar García Santos, Emilio Calle, Julio Casado. A Kinetic Approach to the Alkylating Potential of Carcinogenic Lactones. ***Chemical Research in Toxicology* 2005, 18, 1161-1166.**
- 8.- M. Teresa Pérez Prior, José A. Manso, M. del Pilar García Santos, Emilio Calle, Julio Casado. Reactivity of Lactones and GHB Formation. ***Journal of Organic Chemistry* 2005, 70, 420-426.**
- 9.- M. del Pilar García Santos, Samuel González Mancebo, Emilio Calle, Jesús Hernández Benito, Julio Casado. Reactivity of Amino Acids in Nitrosation Reactions and Its Relation to the Alkylating Potential of Their Products. ***Journal of the American Chemical Society* 2002, 124, 2177-2182.**
- 10.- M. del Pilar García Santos, Emilio Calle, Julio Casado. Amino Acids Nitrosation Products as Alkylating Agents. ***Journal of the American Chemical Society* 2001, 123, 7506-7510.**

Últimos proyectos disfrutados

- 1.- Título: Diseño de un método de seguimiento cinético de reacciones de alquilación de las bases nitrogenadas del ADN. Entidad financiadora: **Universidad de Salamanca**. Investigador principal: María del Pilar García Santos. Duración: 01/05/2017-31/12/2018.
- 2.- Título: Estudio cinético de la reactividad de agentes alquilantes y nitrosantes de interés biológico. Entidad financiadora: **Ministerio de Ciencia e Innovación (CTQ 2010-18999)**. Investigador principal: Julio Casado. Duración: 2011-2015. Tipo de participación: Investigador.

3.- Título: Formación y estabilidad de aductos de agentes mutágenos y antimutágenos con nucleófilos biomiméticos. Entidad financiadora: DGI, **Ministerio de Educación y ciencia (CTQ 2007-63263)**. Investigador principal: Julio Casado. Duración: 2008-2010. Tipo de participación: Investigador.

4.- Título: Estudio cinético de la formación de aductos en mecanismos de alquilación. Entidad financiadora: **Junta de Castilla y León (SA040A08)**. Investigador principal: Julio Casado. Duración: 2008-2010. Tipo de participación: Investigador.

5.- Título: Estudio cinético integrado de la reactividad de agentes alquilantes y mecanismos de nitrosación precursores. Entidad financiadora: **Ministerio de Educación y Ciencia (CTQ2004-05048/BQU)**. Investigador principal: Julio Casado. Duración: 2005-2007. Tipo de participación: Investigador.

Estancias en Centros extranjeros

1.- Departamento de Química Física. Universidad de Bielefeld (Alemania). 1992. Tema: Disociación de ácidos en microemulsiones.

2.- Departamento de Química Física. Universidad de Bielefeld (Alemania). 1993-1994. Temas: Cinéticas rápidas de reacciones químicas en disolución.

3.- Centro: Departamento de Química y Química Industrial. Universidad de Pisa (Italia). 2003 Tema: Estudio cinético de la capacidad alquilante de especies mutágenas/cancerígenas. Acción Integrada HI2001-0119.

Tesis Doctoral dirigida

Título: Estudio cinético de reacciones de interés biológico con moléculas modelo del ADN. Doctoranda: Marina González Pérez. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad de Salamanca. Fecha: 03/05/**2013**. Calificación: Apto cum laude. Directores: Emilio Calle, Julio Casado y María del Pilar García Santos. **Premio Extraordinario de Doctorado**.

ACTIVIDAD DOCENTE

- Licenciatura en Ciencias Biológicas, Licenciatura en Ciencias Químicas, Ingeniería Química, Licenciatura en Biotecnología, Licenciatura en Farmacia, Grado en Farmacia y Grado en Biotecnología.
- Máster Universitario en Química, Máster Universitario en Evaluación y Desarrollo de Medicamentos y Máster Universitario en Química Supramolecular.
- Doctorado "Reactividad y Tecnología Químicas".

Número de Sexenios de Investigación concedidos: **2**.

CURRICULUM VITAE
ACCESO A CUERPOS DOCENTES UNIVERSITARIOS

DATOS PERSONALES	
Apellidos y Nombre:	José María Leal Villalba
Cuerpo docente al que pertenece: Catedrático de Univ.	Año de ingreso al cuerpo: 1997
Universidad a la que pertenece:	Burgos
ACTIVIDAD INVESTIGADORA	
Difusión actividad investigadora: publicaciones y creaciones artísticas profesionales, congresos, conferencias, seminarios,... (5 últimos años- máx.10 ítems)	
<ol style="list-style-type: none"> 1. N. Busto, P. Calvo, J. Santolaya, J. M Leal, A. Guédin, G. Barone, T. Torroba, J.L.Mergny, J. M. Leal, B. García Fishing for G-Quadruplexes in Solution with a Perylene Diimide Derivative Labeled with Biotins <i>Chem Eur. J.</i>, 2018, 24, 11292-11296. 2. H. J. Lozano, N. Busto, G. Espino, A. Carbayo, J.M. Leal, J. A. Platts, B. García Interstrand DNA covalent binding of two dinuclear Ru(II) complexes. Influence of the extra ring of the bridging ligand on the DNA interaction and cytotoxic activity. <i>Dalton Trans.</i>, 2017, 46, 3611-3622. 3. C. Pérez-Arnaiz, N. Busto, J.M. Leal, B. García New microsecond Intramolecular Reactions of Human Telomeric DNA in Solution <i>RSC Adv.</i>, 2016, 6, 39204-39208. 4. T. Biver, N. Busto, B. García, J.M. Leal, L. Menichetti, F. Secco, M. Venturini Mg(II) and Ni(II) induce duplex poly(rA)poly(rU) aggregation to either tetra-aggregate or triplexforms depending on the metal ion concentration <i>J. Inorg. Biochem.</i> 2015, 151, 115-122. 5. J. Neissa, C. Pérez-Arnaiz, V. Porto, N. Busto, E. Borrajo, J. M. Leal, M.A. López-Quintela, B. García, F. Domínguez Interaction of silver metal clusters with living organisms: bactericidal effect of Ag₃ clusters mediated by disruption of topoisomerase-DNA complexes. <i>Chem. Sci.</i>, 2015, 6, 6717-6724. 6. D. Buceta, N. Busto, G. Barone, J. M. Leal, F.Domínguez, L.J. Giovanetti, F.G. Requejo, B. García and M.A. López-Quintela Ag₂ and Ag₃ Clusters: Synthesis, Characterization and Interaction with DNA <i>Angew. Chem. Int. Edit.</i>, 2015, 54, 7612-7616. 7. N. Busto, M. Martínez, J.M. Leal, A.M. Rodríguez, F. Dominguez, I. Acuña, B. García, Monomer-Dimer Divergent Behavior toward DNA in a Half sandwich Ru(II) Aqua-complex. Antiproliferative Biphasic Activity <i>Organometallics</i> 2015 34, 319-327. 8. M. Martínez, N. Busto, F. A. Jalón, B.R. Manzano, J. M. Leal, A.M. Rodríguez, G. Espino, B. García Derivation of Structure-Activity Relationships to modulate the anticancer potential of Ruthenium(II) Arene Complexes with 2-aryldiazole ligands <i>Inorg.Chem.</i> 2014, 53, 11274-11288 9. F.J. Hoyuelos, B. García, J. M. Leal, N. Busto; T. Biver, F. Secco, M. Venturini RNA Triplex-to-Duplex and Duplex-to-Triplex conversion Induced by Coralyne <i>Phys. Chem. Chem Phys.</i> 2014, 16, 6012-6016. 	

10. G. Barone, A.Terenzi, A. Lauria, A. Almerico, N. Buisto, J.M. Leal, B. García
 DNA-binding of nickel(II), copper(II) and zinc(II) complexes:structure-affinity relationships
Coord. Chem. Rev. **2013**, 257, 2848-2862.

Título del proyecto: Mecanismos de interacción entre complejos metálicos de Ru(II), Pt(II), Ir(III) y Rh(III) con proteínas y ácidos nucleicos en ausencia y en presencia de radiación UV-Vis.

Entidad financiadora: Ministerio de economía y Competitividad
 MINECO CTQ2014-58812-C2-2-R 55.000 €

Entidades participantes: 2

Duración, desde: 2015 hasta: 2017

Investigador responsable: Begoña García Número de investigadores participantes: 6

Título del proyecto: Interacción de ADN con complejos organometálicos de Ru(II) y Clústeres Cuánticos Atómicos (AQC's).

Entidad financiadora: Obra Social la Caixa OSLC-007-2012 1.172.080 €

Entidades participantes: Universidades de Burgos y Santiago de Compostela

Duración, desde: 2013 hasta: 2016

Investigador responsable: Begoña García - José M. Leal Número de investigadores participantes: 9

Título del proyecto: Síntesis, caracterización y estudio de las propiedades antitumorales de clústeres cuánticos atómicos (AQC's) y complejos organometálicos de Ru(II), Ir(III) y Rh(III).

Entidad financiadora: Obra Social la Caixa 879.060 €

Entidades participantes: Universidades de Burgos y Santiago de Compostela

Duración, desde: 2017 hasta: 2019

Investigador responsable: Begoña García-José M. Leal Número de investigadores participantes: 8

Transferencia de resultados y proyectos de colaboración con el sector productivo: patentes, productos con registro de propiedad intelectual,...(relativos a los 5 últimos años- máx. 5 ítems)

Movilidad: Estancias en centros de investigación u otras instituciones de educación superior (en los 5 últimos años)

Universitá di Pisa, Italia, 2012, 2013, 2014

FORMACIÓN ACADÉMICA

Becas, premios o títulos predoctorales

Becario FPI

Tesis doctoral

Año lectura

Universidad de Valladolid

1974

Otros méritos de formación académica

Becario Fulbright, Austin, Texas, USA, 1976-77

Becario DAAD, Bielefeld, Alemania, 1991, 1992

EXPERIENCIA EN GESTIÓN Y ADMINISTRACIÓN EDUCATIVA, CIENTÍFICA O TECNOLÓGICA

- Director del Colegio Universitario Integrado de Burgos
- Rector de la Universidad de Burgos
- Evaluación Agencia Calidad de las Islas Baleares
- Evaluación Agencia Calidad de la Xunta de Galicia
- Evaluador de la Comunidad de Madrid, Dirección General de Investigación
- Evaluación profesorado Emérito para Consejo de Universidades
- Evaluación Planes de Estudio Ciencias Experimentales, Consejo Universidades
- Evaluación Panel de Expertos, Programa ACADEMIA, ANECA

OTROS MÉRITOS

- Evaluador para Proyectos de Investigación, a propuesta de ANEP, DGICyT, CICYT, MICINN, MEC
- Evaluador Externo para Tesis Doctoral
 - Karnataka University, Dharward, India
 - Sundaran University, Tirunelveli, India
 - Kalyani University, Calcuta, India
 - Manonmanian University, Sunadanan India
- Censor de artículos científicos
 - Journal of Physical Organic Chemistry
 - Reactive and Functional Polymers
 - Chemical Reviews
 - International Journal of Chemical Kinetics
 - Bulletin of the Chemical Society Japan
 - Journal of Chemical and Engineering Data
 - Industrial & Engineering Chemistry Research
 - Chemical Engineering Communication
 - Journal of Physical Chemistry
 - Thermochemica Acta
 - Journal of Organic Chemistry
 - Biochemical Engineering Journal
 - Chemical Physics Letters
 - Molecules
 - Journal of Colloids and Interface Science



Carmen Barrientos Benito

Generado desde: Editor CVN de FECYT

Fecha del documento: 27/09/2018

v 1.4.0

7b05ad85411f6ae76858722e84b0afa6

Este fichero electrónico (PDF) contiene incrustada la tecnología CVN (CVN-XML). La tecnología CVN de este fichero permite exportar e importar los datos curriculares desde y hacia cualquier base de datos compatible. Listado de Bases de Datos adaptadas disponible en <http://cvn.fecyt.es/>



Indicadores generales de calidad de la producción científica

Descripción breve de los principales indicadores de calidad de la producción científica (sexenios de investigación, tesis doctorales dirigidas, citas totales, publicaciones en primer cuartil (Q1), índice h....). Incluye también otros aspectos o peculiaridades importantes.

Citas totales: 1697

Promedio citas/año: 87/2007, 152/2008, 87/2009, 84/2010, 54/2011, 107/2012, 76/2013, 84/2014, 62/2015, 73/2016, 57/2017, 35/2018

Índice h: 24.

Publicaciones totales en primer cuartil: 65.

Publicaciones totales: 135.

Número de sexenios de investigación: 5.

Tesis Doctorales dirigidas (últimos diez años): 2



Carmen Barrientos Benito

Apellidos: Barrientos Benito
Nombre: Carmen
DNI: 12361445A
Fecha de nacimiento: 02/11/1959
Sexo: Mujer
Nacionalidad: España
País de nacimiento: España
C. Autón./Reg. de nacimiento: Castilla y León
Provincia de contacto: Valladolid
Ciudad de nacimiento: Valladolid
Dirección de contacto: Departamento de Química Física y Química Inorgánica.
Facultad de Ciencias. Universidad de Valladolid
Resto de dirección contacto: Paseo de Belén, 7
Código postal: 47011
País de contacto: España
C. Autón./Reg. de contacto: Castilla y León
Ciudad de contacto: Valladolid
Teléfono fijo: (34) 983423205 - 3205
Correo electrónico: cbb@qf.uva.es

Situación profesional actual

Entidad empleadora: Universidad de Valladolid
Departamento: Química Física y Química Inorgánica, Facultad de Ciencias
Categoría profesional: Catedrática de Universidad
Fecha de inicio: 11/11/2011
Modalidad de contrato: Funcionario/a **Régimen de dedicación:** Tiempo completo
Primaria (Cód. Unesco): 230700 - Química física
Secundaria (Cód. Unesco): 230700 - Química física
Terciaria (Cód. Unesco): 230700 - Química física

Cargos y actividades desempeñados con anterioridad

	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
1	Universidad de Valladolid	Profesora Titular de Universidad	16/05/1995
2	Universidad de Oviedo	Profesora Titular de Universidad	03/04/1993
3	Universidad de Oviedo	Profesora Titular de Universidad Interina	01/10/1989
4	Universidad de Valladolid	Profesora Ayudante de Universidad	01/10/1983
5	University of Kent	Visiting Research Fellow y Becaria Postdoctoral del CSIC	01/01/1987



- 1 Entidad empleadora:** Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Profesora Titular de Universidad
Fecha de inicio-fin: 16/05/1995 - 10/11/2011 **Duración:** 16 años - 5 meses - 25 días
- 2 Entidad empleadora:** Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Profesora Titular de Universidad
Fecha de inicio-fin: 03/04/1993 - 15/05/1995 **Duración:** 2 años - 1 mes - 12 días
- 3 Entidad empleadora:** Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Profesora Titular de Universidad Interina
Fecha de inicio-fin: 01/10/1989 - 02/04/1993 **Duración:** 3 años - 6 meses - 1 día
- 4 Entidad empleadora:** Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Profesora Ayudante de Universidad
Fecha de inicio-fin: 01/10/1983 - 30/09/1989 **Duración:** 6 años
- 5 Entidad empleadora:** University of Kent **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Visiting Research Fellow y Becaria Postdoctoral del CSIC
Fecha de inicio-fin: 01/01/1987 - 31/12/1987 **Duración:** 1 año



Formación académica recibida

Titulación universitaria

Estudios de 1º y 2º ciclo, y antiguos ciclos (Licenciados, Diplomados, Ingenieros Superiores, Ingenieros Técnicos, Arquitectos)

Titulación universitaria: Titulado Superior

Nombre del título: Licenciada en Ciencias Químicas

Entidad de titulación: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Fecha de titulación: 01/06/1982

Doctorados

Programa de doctorado: Doctora en Ciencias Químicas

Entidad de titulación: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Fecha de titulación: 09/04/1986

Conocimiento de idiomas

Idioma	Comprensión auditiva	Comprensión de lectura	Interacción oral	Expresión oral	Expresión escrita
Francés		C1	A1	A1	A1
Inglés		C1	C1	C1	C1

Actividad docente

Formación académica impartida

- Tipo de docencia:** Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Química Física I

Titulación universitaria: Química

Fecha de inicio: 01/09/2011

Fecha de finalización: 31/07/2017

Entidad de realización: Universidad de Valladolid

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias

Fecha de finalización: 31/07/2014

Tipo de entidad: Universidad
- Nombre de la asignatura/curso:** Química Experimental II

Titulación universitaria: Química

Fecha de inicio: 01/09/2011

Fecha de finalización: 31/07/2017

Entidad de realización: Universidad de Valladolid

Fecha de finalización: 31/07/2014

Tipo de entidad: Universidad



Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias

3 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Físico-Química de la atmósfera

Tipo de programa: Máster oficial

Titulación universitaria: Master en Técnicas Avanzadas en Química

Fecha de inicio: 01/09/2010

Fecha de finalización: 31/07/2013

Fecha de finalización: 31/07/2017

Entidad de realización: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias

4 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Química de la atmósfera

Tipo de programa: Licenciatura

Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 01/09/2000

Fecha de finalización: 31/07/2013

Fecha de finalización: 31/07/2013

Entidad de realización: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias

5 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Introducción a la Experimentación Química y a las Técnicas Instrumentales II

Tipo de programa: Licenciatura

Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 01/09/2000

Fecha de finalización: 31/07/2012

Fecha de finalización: 31/07/2012

Entidad de realización: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias

6 Tipo de docencia: Docencia internacional

Nombre de la asignatura/curso: Computational Techniques and Numerical calculus

Tipo de programa: Máster oficial

Titulación universitaria: European Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling

Fecha de inicio: 01/09/2010

Fecha de finalización: 31/07/2011

Fecha de finalización: 31/07/2011

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias

Idioma de la asignatura: Inglés

7 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Química Física II

Tipo de programa: Licenciatura

Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 01/09/2000

Fecha de finalización: 31/07/2011

Fecha de finalización: 31/07/2011

Entidad de realización: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias



- 8** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Fundamentos y aplicaciones de la Química Computacional
Tipo de programa: Doctorado/a
Titulación universitaria: Doctorado en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 01/09/2008 **Fecha de finalización:** 31/07/2009
Fecha de finalización: 31/07/2009
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 9** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Métodos de la Química Cuántica
Tipo de programa: Doctorado/a
Titulación universitaria: Doctorado en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 01/09/2006 **Fecha de finalización:** 31/07/2008
Fecha de finalización: 31/07/2008
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 10** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Métodos de la Química Cuántica
Tipo de programa: Doctorado/a
Titulación universitaria: Doctorado en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 01/09/2006 **Fecha de finalización:** 31/07/2008
Fecha de finalización: 31/07/2008
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 11** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Técnicas Computacionales. Métodos Numéricos
Tipo de programa: Doctorado/a
Titulación universitaria: Doctorado en Ciencias Químicas (Doctorado Interuniversitario en Química Teórica y Computacional)
Fecha de inicio: 01/09/2005 **Fecha de finalización:** 31/07/2006
Fecha de finalización: 31/07/2006
Entidad de realización: Universitat Rovira i Virgili **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Química de Tarragona
- 12** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Técnicas Computacionales. Métodos Numéricos
Tipo de programa: Doctorado/a
Titulación universitaria: Doctorado en Ciencias Químicas (Doctorado Interuniversitario en Química Teórica y Computacional)
Fecha de inicio: 01/09/2004 **Fecha de finalización:** 31/07/2005
Fecha de finalización: 31/07/2005
Entidad de realización: Universidad de Extremadura **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 13** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Técnicas Computacionales. Métodos Numéricos
Tipo de programa: Doctorado/a



Titulación universitaria: Doctorado en Ciencias Químicas (Doctorado Interuniversitario en Química Teórica y Computacional)

Fecha de inicio: 01/09/2003

Fecha de finalización: 31/07/2004

Fecha de finalización: 31/07/2004

Entidad de realización: Universitat de Girona

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias

14 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Química Computacional

Tipo de programa: Licenciatura

Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 01/09/2000

Fecha de finalización: 31/07/2004

Fecha de finalización: 31/07/2004

Entidad de realización: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias

15 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Determinación Teórica de Parámetros Espectroscópicos Moleculares. Fundamentos

Tipo de programa: Doctorado/a

Titulación universitaria: Doctorado en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 01/09/2000

Fecha de finalización: 31/07/2003

Fecha de finalización: 31/07/2003

Entidad de realización: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias

16 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Determinación Teórica de Parámetros Espectroscópicos Moleculares. Fundamentos

Tipo de programa: Doctorado/a

Titulación universitaria: Doctorado en Ciencias Químicas-1

Fecha de inicio: 01/09/2000

Fecha de finalización: 31/07/2003

Fecha de finalización: 31/07/2003

Entidad de realización: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias

17 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Laboratorio Integrado II

Tipo de programa: Licenciatura

Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 01/09/1999

Fecha de finalización: 31/07/2000

Fecha de finalización: 31/07/2000

Entidad de realización: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias

18 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Cinética y Dinámica Molecular

Tipo de programa: Licenciatura

Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 01/09/1998

Fecha de finalización: 31/07/2000

Fecha de finalización: 31/07/2000



Entidad de realización: Universidad de Valladolid
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias

Tipo de entidad: Universidad

19 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Cinética y Mecanismos de Reacciones

Tipo de programa: Licenciatura

Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 01/09/1996

Fecha de finalización: 31/07/2000

Fecha de finalización: 31/07/2000

Entidad de realización: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias

20 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Métodos Numéricos y Programación en Química

Tipo de programa: Doctorado/a

Titulación universitaria: Doctorado en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 01/09/1995

Fecha de finalización: 31/07/2000

Fecha de finalización: 31/07/2000

Entidad de realización: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias

21 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Química Cuántica

Tipo de programa: Licenciatura

Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 01/09/1998

Fecha de finalización: 31/07/1999

Fecha de finalización: 31/07/1999

Entidad de realización: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias

22 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Ampliación de Química Física

Tipo de programa: Licenciatura

Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 01/09/1995

Fecha de finalización: 31/07/1998

Fecha de finalización: 31/07/1998

Entidad de realización: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias

23 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Ampliación de Química Física

Tipo de programa: Licenciatura

Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas-1

Fecha de inicio: 01/09/1995

Fecha de finalización: 31/07/1998

Fecha de finalización: 31/07/1998

Entidad de realización: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias

24 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Química Física

Tipo de programa: Licenciatura



Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 01/09/1995

Fecha de finalización: 31/07/1998

Fecha de finalización: 31/07/1998

Entidad de realización: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias

25 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Ampliación de Química Física

Tipo de programa: Licenciatura

Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 01/01/1994

Fecha de finalización: 31/07/1995

Fecha de finalización: 31/07/1995

Entidad de realización: Universidad de Oviedo

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Química

26 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Termodinámica Química

Tipo de programa: Licenciatura

Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 01/01/1994

Fecha de finalización: 31/07/1995

Fecha de finalización: 31/07/1995

Entidad de realización: Universidad de Oviedo

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Química

27 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Determinación teórica de parámetros espectroscopicos moleculares: Aplicaciones

Tipo de programa: Doctorado/a

Titulación universitaria: Doctorado en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 01/09/1991

Fecha de finalización: 31/07/1995

Fecha de finalización: 31/07/1995

Entidad de realización: Universidad de Oviedo

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Química

28 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Cinética Química

Tipo de programa: Licenciatura

Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 01/01/1991

Fecha de finalización: 31/07/1994

Fecha de finalización: 31/07/1994

Entidad de realización: Universidad de Oviedo

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Química

29 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Química Física

Tipo de programa: Licenciatura

Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 01/01/1991

Fecha de finalización: 31/07/1994

Fecha de finalización: 31/07/1994

Entidad de realización: Universidad de Oviedo

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Química



- 30** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Determinación teórica de parámetros espectroscopicos moleculares: Fundamentos
Tipo de programa: Doctorado/a
Titulación universitaria: Doctorado en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 01/09/1990 **Fecha de finalización:** 31/07/1994
Fecha de finalización: 31/07/1994
Entidad de realización: Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Química
- 31** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Cálculo y Programación en Química Física
Tipo de programa: Licenciatura
Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 01/01/1989 **Fecha de finalización:** 31/07/1991
Fecha de finalización: 31/07/1991
Entidad de realización: Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Biología
- 32** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Química General
Tipo de programa: Licenciatura
Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 01/01/1989 **Fecha de finalización:** 31/07/1991
Fecha de finalización: 31/07/1991
Entidad de realización: Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Química
- 33** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Química Cuántica y Espectroscopía
Tipo de programa: Licenciatura
Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 01/09/1986 **Fecha de finalización:** 31/07/1989
Fecha de finalización: 31/07/1989
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 34** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Ampliación de Química Física
Tipo de programa: Licenciatura
Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 01/09/1985 **Fecha de finalización:** 31/07/1989
Fecha de finalización: 31/07/1989
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 35** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Química General
Tipo de programa: Licenciatura
Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Físicas



Fecha de inicio: 01/09/1983

Fecha de finalización: 31/07/1989

Entidad de realización: Universidad de Valladolid

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias

Fecha de finalización: 31/07/1989

Tipo de entidad: Universidad

36 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Química General

Tipo de programa: Licenciatura

Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 01/09/1983

Fecha de finalización: 31/07/1989

Fecha de finalización: 31/07/1989

Entidad de realización: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias

Dirección de tesis doctorales y/o proyectos fin de carrera

- 1 Título del trabajo:** Síntesis de precursores de glicina en el medio interestelar: Estudio teórico

Tipo de proyecto: Tesis Doctoral

Codirector/a tesis: Pilar Redondo Cristóbal

Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

Alumno/a: Laura Largo Escudero

Calificación obtenida: Sobresaliente "Cum Laude" Numérica: 10

Fecha de defensa: 17/06/2011
- 2 Título del trabajo:** Estudio teórico de estructura y propiedades de especies TiCn (n=1-8)

Tipo de proyecto: Tesina

Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

Alumno/a: Laura Largo Escudero

Fecha de defensa: 2006
- 3 Título del trabajo:** Estudio teórico de procesos de interés en Química Atmosférica: reacciones de nitrógeno atómico con derivados halocarbonados

Tipo de proyecto: Tesis Doctoral

Codirector/a tesis: Antonio Largo Cabrerizo

Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

Alumno/a: Álvaro Cimas Samaniego

Calificación obtenida: Sobresaliente cum laude por unanimidad. Numérica: 10

Fecha de defensa: 14/07/2005
- 4 Título del trabajo:** Estudio teórico de las especies CnCl, CnCl+, CnCl- (n=1-7)

Tipo de proyecto: Tesina

Codirector/a tesis: Antonio Largo Cabrerizo

Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

Alumno/a: Álvaro Cimas Samaniego

Fecha de defensa: 2000
- 5 Título del trabajo:** Formación de compuestos policarbonados de fósforo en el medio interestelar: estudio teórico

Tipo de proyecto: Tesina

Codirector/a tesis: Antonio Largo Cabrerizo

Entidad de realización: Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad



Alumno/a: Emma del Río Redondo

Fecha de defensa: 1995

- 6 Título del trabajo:** Análisis de series espectrales principal y subordinadas en sistemas con dos electrones de valencia
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Francisco Javier Virumbrales Gutiérrez
Calificación obtenida: Apto Cum Laude
Fecha de defensa: 10/04/1992
- 7 Título del trabajo:** Análisis teórico de tendencias sistemáticas y efectos de polarización del core en fuerzas de oscilador
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Carmen Lavín Puente
Calificación obtenida: Apto Cum Laude
Fecha de defensa: 21/07/1989
- 8 Título del trabajo:** Estudio de regularidades en las transiciones electrónicas correspondientes a la serie isoelectrónica del MgI
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Inmaculada Gútiérrez Antolín
Fecha de defensa: 1988
- 9 Título del trabajo:** Formulaciones alternativas de la integral de transición y regularidades en series isoelectrónicas
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Elena Charro Huerga
Fecha de defensa: 1988
- 10 Título del trabajo:** Efectos de polarización del core en las transiciones electrónicas
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Jesús Mazón Nieto de Cossio
Fecha de defensa: 1986

Tutorías académicas de estudiantes

- 1 Nombre del programa:** Programa Orienta. Tutoría de alumnos Grado en Química
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Frecuencia de la actividad: 2.011
- 2 Nombre del programa:** Programa Orienta. Tutoría de alumnos Grado en Química
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Frecuencia de la actividad: 2.012



- 3** **Nombre del programa:** Programa Orienta. Tutoría de alumnos Grado en Química
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Frecuencia de la actividad: 2.013
- 4** **Nombre del programa:** Programa Orienta. Tutoría de alumnos Grado en Química
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Frecuencia de la actividad: 2.014
- 5** **Nombre del programa:** Programa Orienta. Tutoría de alumnos Grado en Química
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Frecuencia de la actividad: 2.015
- 6** **Nombre del programa:** Programa Orienta. Tutoría de alumnos Grado en Química
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Frecuencia de la actividad: 2.016
- 7** **Nombre del programa:** Programa Orienta. Tutoría de alumnos Grado en Química
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Frecuencia de la actividad: 2.017

Publicaciones docentes o de carácter pedagógico, libros, artículos, etc.

- 1** Juan J. Novoa Vide; Antonio Largo Cabrerizo; Carmen Barrientos Benito; Emili Besalú. Computational Techniques and Numerical calculus. Theoretical and Computational Chemistry: Foundations, Methods and techniques (ISBN: 978-84-8021-615-9). pp. 279 - 384. Universitat Jaume I Castellón,
Nombre del material: Capítulo de Libro para la docencia del Master Europeo en Theoretical Chemistry and Computational Modelling
Fecha de elaboración: 2007
Tipo de soporte: Capítulos de libros
- 2** Antonio Largo Cabrerizo; Carmen Barrientos Benito. Técnicas Computacionales. Química Teórica y Computacional (ISBN: 84-8021-312-4).. pp. 143 - 215. Universitat Jaume I Castellón,
Nombre del material: Capítulo de Libro para la docencia del Master Interuniversitario en Química Teórica y Computacional
Fecha de elaboración: 2000
Tipo de soporte: Capítulos de libros

Participación en proyectos de innovación docente

- 1** **Título del proyecto:** Desarrollo e implementación de nuevas metodologías docentes en la Química Física y Química Analítica dentro del marco de la convergencia europea
Tipo de participación: Miembro de equipo
Tipo duración relación laboral: Por tiempo determinado
Entidad financiadora: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio-fin: 01/10/2008 - 30/09/2017 **Duración:** 1 año
- 2** **Título del proyecto:** Ayuda para la elaboración de recursos de apoyo y experiencias innovadoras en torno a la Convergencia Europea: Desarrollo de competencias para el trabajo en grupo en el ámbito de la Química.
Tipo de participación: Otros



Tipo duración relación laboral: Por tiempo determinado

Entidad financiadora: Agencia para la Calidad del Sistema Universitario. Castilla y León

Fecha de inicio-fin: 08/10/2004 - 07/10/2005

Duración: 1 año

- 3 Título del proyecto:** Ayuda para la elaboración de recursos de apoyo y experiencias innovadoras en torno a la Convergencia Europea: Desarrollo de competencias para el trabajo en grupo en el ámbito de la Química.

Tipo de participación: Otros

Tipo duración relación laboral: Por tiempo determinado

Entidad financiadora: Consejería de Educación, Junta de Castilla y León

Fecha de inicio-fin: 08/10/2004 - 07/10/2005

Duración: 1 año

Participación en congresos con ponencias orientadas a la formación docente

- 1 Nombre del evento:** I Jornadas sobre Convergencia Europea en los estudios de Química

Tipo de evento: Jornada

Ciudad de celebración: Valencia, España

Fecha de presentación: 29/06/2005

Entidad organizadora: Universitat de València

Tipo de entidad: Universidad

Experiencias docentes sobre el desarrollo de competencias en el ámbito de la Química.

- 2 Nombre del evento:** Organización de las jornadas sobre: "Espacio Europeo de Educación Superior"

Tipo de evento: Jornada

Ciudad de celebración: Valladolid, España

Fecha de presentación: 05/2005

Entidad organizadora: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

- 3 Nombre del evento:** Jornada de Intercambio de Experiencias Innovadoras en Torno a la Convergencia Europea

Tipo de evento: Jornada

Ciudad de celebración: Valladolid, España

Fecha de presentación: 17/06/2005

Entidad organizadora: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Desarrollo de competencias para el trabajo en grupo en el ámbito de la Química.

Otras actividades/méritos no incluidos en la relación anterior

- 1 Descripción de la actividad:** Tramo Docente 6 desde 01/10/08 hasta 30/09/13

Entidad organizadora: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Fecha de finalización: 30/09/2013

- 2 Descripción de la actividad:** Tramo Docente 5 desde 01/10/03 hasta 30/09/08

Entidad organizadora: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Fecha de finalización: 30/09/2008

- 3 Descripción de la actividad:** Tramo Docente 4 desde 01/10/98 hasta 30/09/03

Entidad organizadora: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Fecha de finalización: 30/09/2003



- 4 Descripción de la actividad:** Tramo Docente 3 desde 01/10/93 hasta 30/09/98
Entidad organizadora: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de finalización: 30/09/1998
- 5 Descripción de la actividad:** Tramo Docente 2 desde 01/10/88 hasta 30/09/93
Entidad organizadora: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de finalización: 30/09/1993
- 6 Descripción de la actividad:** Tramo Docente 1 desde 01/10/83 hasta 30/09/88
Entidad organizadora: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de finalización: 30/09/1988

Experiencia científica y tecnológica

Grupos/equipos de investigación, desarrollo o innovación

Nombre del grupo: Química Teórica y Computacional (GIR reconocido)
Objeto del grupo: Investigación
Clase de colaboración: Coautoría de publicaciones
Entidad de afiliación: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio: 2003 **Duración:** 10 años

Actividad científica o tecnológica

Proyectos de I+D+i financiados en convocatorias competitivas de Administraciones o entidades públicas y privadas

- 1 Nombre del proyecto:** Astroquímica computacional: formación de moléculas prebióticas y predicción de parámetros espectroscópicos de nuevas moléculas (VA010G18)
Modalidad de proyecto: De investigación **Ámbito geográfico:** Autonómica
fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).
Grado de contribución: Coordinador del proyecto total, red o consorcio
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Valladolid, Castilla y León, España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carmen Barrientos Benito
Nº de investigadores/as: 7
Entidad/es financiadora/s:
Junta de Castilla y León **Tipo de entidad:** Autonómica
Ciudad entidad financiadora: Valladolid, Castilla y León, España
Tipo de participación: Coordinador
Cód. según financiadora: VA010G18
Fecha de inicio-fin: 01/09/2018 - 31/08/2021 **Duración:** 3 años
Cuantía total: 12.000 €
Régimen de dedicación: Tiempo completo



- 2** **Nombre del proyecto:** Astroquímica Computacional: formación de moléculas prebióticas y predicción de parámetros espectroscópicos de moléculas relevantes(VA077U13).
Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Nacional
Grado de contribución: Investigador/a
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Valladolid, Castilla y León, España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo Cabrerizo; Carmen Barrientos Benito; Pilar Redondo Cristóbal; Víctor Manuel Rayón Rico; Henar Martínez García
Nº de investigadores/as: 5
Entidad/es financiadora/s: Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades **Tipo de entidad:** Agencia Estatal
Ciudad entidad financiadora: Madrid, España
Tipo de participación: Miembro de equipo
Cód. según financiadora: AYA2017-87515-P
Fecha de inicio-fin: 01/01/2018 - 31/12/2020 **Duración:** 3 años
Cuantía total: 30.000 € **Cuantía subproyecto:** 30.000 €
Régimen de dedicación: Tiempo completo
- 3** **Nombre del proyecto:** Procesos ion-molécula en fase gas: síntesis interestelar de biomoléculas y reactividad de derivados halocarbonados (VA077U13).
Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Autonómica
Grado de contribución: Coordinador del proyecto total, red o consorcio
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Valladolid, Castilla y León, España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carmen Barrientos Benito
Nº de investigadores/as: 7
Entidad/es financiadora/s: Junta de Castilla y León **Tipo de entidad:** Autonómica
Ciudad entidad financiadora: Valladolid, Castilla y León, España
Tipo de participación: Coordinador
Cód. según financiadora: VA077U13
Fecha de inicio-fin: 03/09/2013 - 02/09/2016 **Duración:** 3 años
Cuantía total: 30.000 €
Régimen de dedicación: Tiempo completo
- 4** **Nombre del proyecto:** Estudio mecano-cuántico y cinético de sistemas y procesos ion-molécula de interés en Astroquímica y química sintética (CTQ2010-16864).
Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Nacional
Grado de contribución: Coordinador del proyecto total, red o consorcio
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Valladolid, Castilla y León, España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carmen Barrientos Benito
Entidad/es financiadora/s: Ministerio de Ciencia e Innovación.
Tipo de participación: Coordinador



Cód. según financiadora: CTQ2010-16864
Fecha de inicio-fin: 01/01/2011 - 01/01/2014
Cuantía total: 71.390 €
Régimen de dedicación: Tiempo completo

Duración: 3 años

5 Nombre del proyecto: Reacciones ion-molécula en fase gas. Implicaciones en Química sintética y Astroquímica (VA040A09)

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Coordinador del proyecto total, red o consorcio

Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: Valladolid, Castilla y León, España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carmen Barrientos Benito

Entidad/es financiadora/s:

Junta de Castilla y León

Tipo de entidad: Autonómica

Ciudad entidad financiadora: Valladolid, Castilla y León, España

Tipo de participación: Coordinador

Cód. según financiadora: VA040A09

Fecha de inicio-fin: 01/01/2009 - 01/01/2012

Duración: 3 años

Cuantía total: 42.100 €

Régimen de dedicación: Tiempo completo

6 Nombre del proyecto: Reactividad en fase gas de cationes metálicos con CH₃X (X=H,F,Cl). La importancia de la formación de intermediatos en reactividad química (CTQ2007-67234-C02-02).

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Nacional

Grado de contribución: Coordinador del proyecto total, red o consorcio

Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: Valladolid, Castilla y León, España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carmen Barrientos Benito

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Educación y Ciencia. Dirección General de Investigación.

Tipo de participación: Coordinador

Cód. según financiadora: CTQ2007-67234-C02-02

Fecha de inicio-fin: 13/12/2007 - 12/12/2010

Duración: 3 años

Cuantía total: 77.440 €

Régimen de dedicación: Tiempo completo

7 Nombre del proyecto: Estudio de la estructura y síntesis de compuestos de interés en química atmosférica y en el medio interestelar (VA077A06)

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Coordinador del proyecto total, red o consorcio

Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: Valladolid, Castilla y León, España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carmen Barrientos Benito

Entidad/es financiadora/s:

Junta de Castilla y León

Tipo de entidad: Autonómico



Ciudad entidad financiadora: Valladolid, Castilla y León, España

Tipo de participación: Coordinador

Cód. según financiadora: VA077A06

Fecha de inicio-fin: 01/01/2006 - 01/01/2009

Duración: 3 años

Cuantía total: 13.300 €

Régimen de dedicación: Tiempo completo

8 Nombre del proyecto: Estudio mecanístico de reacciones de interés en química atmosférica y astroquímica (CTQ2004-07405-C02-01).

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Nacional

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: Valladolid, Castilla y León, España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo Cabrerizo; Carmen Barrientos Benito

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Educación y Ciencia. Dirección General de Investigación.

Tipo de participación: Otros

Cód. según financiadora: CTQ2004-07405-C02-01

Fecha de inicio-fin: 13/12/2004 - 13/12/2007

Duración: 3 años

Cuantía total: 52.000 €

Régimen de dedicación: Tiempo completo

9 Nombre del proyecto: Estructura y procesos de síntesis de compuestos policarbonados: estudio teórico (VA085/03)

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Coordinador del proyecto total, red o consorcio

Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: Valladolid, Castilla y León, España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carmen Barrientos Benito

Entidad/es financiadora/s:

Junta de Castilla y León

Tipo de entidad: Autonómico

Ciudad entidad financiadora: Valladolid, Castilla y León, España

Tipo de participación: Coordinador

Cód. según financiadora: VA085/03

Fecha de inicio-fin: 01/01/2003 - 01/01/2006

Duración: 3 años

Entidad/es participante/s: Universidad de Valladolid

Cuantía total: 13.500 €

Régimen de dedicación: Tiempo completo

10 Nombre del proyecto: Reacciones de interés en química medioambiental e interestelar: importancia de los procesos prohibidos por el spin . Acción Integrada Hispano-Italiana (HI2002-0025)

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Unión Europea

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad de Valladolid - Università di L'Aquila (Italia)



Ciudad entidad realización: Valladolid, Castilla y León, España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo Cabrerizo; Carmen Barrientos Benito
Entidad/es financiadora/s:
Ministerio de Ciencia y Tecnología

Tipo de participación: Otros
Nombre del programa: Acción Integrada Hispano - Italiana
Cód. según financiadora: HI2002-0025
Fecha de inicio-fin: 01/01/2003 - 01/01/2005 **Duración:** 2 años
Entidad/es participante/s: Universidad de Valladolid-Universitá de L'Aquila (Italia)
Cuantía total: 10.400 €
Régimen de dedicación: Tiempo completo

- 11** **Nombre del proyecto:** Red de Excelencia en Química Teórica y Computacional (BQU2001-5037-E)
Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Unión Europea
Grado de contribución: Investigador/a
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Valladolid, Castilla y León, España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Manuel Yáñez Montero (Universidad Autónoma de Madrid) - IP
Nº de investigadores/as: 18
Entidad/es financiadora/s:
Ministerio de Ciencia y Tecnología
Tipo de participación: Otros
Cód. según financiadora: BQU2001-5037-E)
Fecha de inicio-fin: 01/01/2003 - 01/01/2005 **Duración:** 2 años
Entidad/es participante/s: Distintos grupos de investigación de 18 Universidades
Régimen de dedicación: Tiempo completo

- 12** **Nombre del proyecto:** Reacciones de interés en química medioambiental, atmosférica e interestelar: importancia del cruce entre sistemas y de los complejos pre-reactivos (BQU2001-3660-C02-02).
Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Nacional
Grado de contribución: Investigador/a
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Valladolid, Castilla y León, España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo Cabrerizo
Entidad/es financiadora/s:
Ministerio de Ciencia y Tecnología. Dirección General de Investigación.
Tipo de participación: Otros
Cód. según financiadora: BQU2001-3660-C02-02
Fecha de inicio-fin: 01/01/2002 - 31/12/2004 **Duración:** 3 años
Cuantía total: 43.873,88 €
Régimen de dedicación: Tiempo completo

- 13** **Nombre del proyecto:** Equipamento multidisciplinar en estructura molecular. Proyecto de adquisición de infraestructura científica (Fondos FEDER) Subvención concedida: 48.6 Mptas. (Petición conjunta de cuatro grupos de investigación del Departamento de Química Física).



Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Nacional

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: Valladolid, Castilla y León, España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo Cabrerizo, José L. Alonso, Inmaculada Martín (IPs)

Tipo de participación: Otros

Fecha de inicio-fin: 01/01/2000 - 01/01/2003

Duración: 3 años

Régimen de dedicación: Tiempo completo

- 14 Nombre del proyecto:** Estudio teórico de reacciones ion-molécula en fase gas. Aplicaciones en Química Interestelar (VA 18/00B)

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: Valladolid, Castilla y León, España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo Cabrerizo

Entidad/es financiadora/s:

Junta de Castilla y León

Tipo de entidad: Autonómico

Ciudad entidad financiadora: Valladolid, Castilla y León, España

Tipo de participación: Otros

Cód. según financiadora: VA 18/00B

Fecha de inicio-fin: 01/01/2000 - 01/01/2003

Duración: 3 años

Entidad/es participante/s: Universidad de Valladolid

Régimen de dedicación: Tiempo completo

- 15 Nombre del proyecto:** Estudio teórico de la estructura, reactividad y espectroscopía de especies atómicas y moleculares de interés en astroquímica.(PB97-0399-C03-01)

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Nacional

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: Oviedo, Principado de Asturias, España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Inmaculada Martín García (IP)

Entidad/es financiadora/s:

DGICYT

Tipo de participación: Otros

Cód. según financiadora: PB97-0399-C03-01

Fecha de inicio-fin: 01/07/1998 - 01/07/2001

Duración: 3 años

Entidad/es participante/s: Universidad de Oviedo; Universidad de Valladolid

Régimen de dedicación: Tiempo completo

16 Nombre del proyecto: Medio ambiente y fuentes de energía alternativas. Efectos de las impurezas en la fusión nuclear termocontrolada.

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: Valladolid, Castilla y León, España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Inmaculada Martín García

Entidad/es financiadora/s:

Junta de Castilla y León

Tipo de entidad: Autonómico

Ciudad entidad financiadora: Valladolid, Castilla y León, España

Tipo de participación: Otros

Cód. según financiadora: VA 21/97

Fecha de inicio-fin: 01/01/1997 - 01/01/2000

Duración: 3 años

Entidad/es participante/s: Universidad de Valladolid

Régimen de dedicación: Tiempo completo

17 Nombre del proyecto: Estudio teórico ab initio y semiempírico de la química interestelar y de las llamas.(PB94-1314-C03-02)

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Nacional

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: Oviedo, Principado de Asturias, España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo Cabrerizo

Entidad/es financiadora/s:

DGICYT

Tipo de participación: Otros

Cód. según financiadora: PB94-1314-C03-02

Fecha de inicio-fin: 01/07/1995 - 01/07/1998

Duración: 3 años

Entidad/es participante/s: Universidad de Oviedo; Universidad de Valladolid

Régimen de dedicación: Tiempo completo

18 Nombre del proyecto: Estudio teórico mediante métodos ab initio y semiempíricos, de propiedades espectrales y químicas de interés astrofísico. (PB91-0207-C02-02)

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Nacional

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: Oviedo, Principado de Asturias, España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo Cabrerizo

Entidad/es financiadora/s:

DGICYT

Tipo de participación: Otros

Cód. según financiadora: PB91-0207-C02-02)

Fecha de inicio-fin: 15/06/1992 - 15/06/1995

Duración: 3 años

Entidad/es participante/s: Universidad de Oviedo; Universidad de Valladolid



Régimen de dedicación: Tiempo completo

19 Nombre del proyecto: Estudio teórico de moléculas y procesos químicos interestelares. Acción Integrada Hispano-Francesa (Conv 1991 HF-304)

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Unión Europea

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad de Oviedo - Ecole Normale Supérieure (Paris)

Ciudad entidad realización: Oviedo, Principado de Asturias, España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo Cabrerizo

Entidad/es financiadora/s:

DGICYT (Subdirec. Gener. Coop. Inter.).

Tipo de participación: Otros

Nombre del programa: Acción Integrada Hispano - Francesa

Cód. según financiadora: 1991 HF-304

Fecha de inicio-fin: 01/01/1992 - 01/01/1993

Duración: 1 año

Entidad/es participante/s: Universidad de Oviedo-Ecole Normale Supérieure (Paris)

Régimen de dedicación: Tiempo completo

20 Nombre del proyecto: Estudio teórico de procesos físicos y químicos en el medio interestelar (PB88-0343).

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Nacional

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: Valladolid, Castilla y León, España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Inmaculada Martín García (IP)

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Educación y Ciencia. DGICYT

Tipo de participación: Otros

Cód. según financiadora: PB88-0343

Fecha de inicio-fin: 22/09/1989 - 22/09/1992

Duración: 3 años

Entidad/es participante/s: Universidad de Valladolid

Régimen de dedicación: Tiempo completo

21 Nombre del proyecto: Estudio teórico de moléculas y procesos químicos interestelares. Acción Integrada Hispano-Francesa (Conv 1990 HF-316)

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Unión Europea

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad de Oviedo - Ecole Normale Supérieure (Paris)

Ciudad entidad realización: Oviedo, Principado de Asturias, España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo Cabrerizo

Entidad/es financiadora/s:

DGICYT (Subdirec. Gener. Coop. Inter.).

Tipo de participación: Otros

Nombre del programa: Acción Integrada Hispano - Francesa

Cód. según financiadora: 1990 HF-316



Fecha de inicio-fin: 01/01/1991 - 01/01/1992

Duración: 1 año

Entidad/es participante/s: Universidad de Oviedo-Ecole Normale Superieure (Paris)

Régimen de dedicación: Tiempo completo

22 Nombre del proyecto: Estudio teórico de moléculas y procesos químicos de interés en Astrofísica.(DF90/2194)

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad de Oviedo

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: Oviedo, Principado de Asturias, España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo Cabrerizo (IP)

Entidad/es financiadora/s:

Universidad de Oviedo

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad financiadora: Oviedo, Principado de Asturias, España

Tipo de participación: Otros

Cód. según financiadora: DF90/2194

Fecha de inicio-fin: 01/01/1990 - 01/01/1991

Duración: 1 año

Entidad/es participante/s: Universidad de Oviedo

Régimen de dedicación: Tiempo completo

23 Nombre del proyecto: Estudio teórico de moléculas y procesos químicos interestelares. Acción Integrada Hispano-Francesa (Conv 1989 HF-236)

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Unión Europea

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad de Oviedo - Ecole Normale Superieure (Paris)

Ciudad entidad realización: Oviedo, Principado de Asturias, España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo Cabrerizo

Entidad/es financiadora/s:

DGICYT (Subdirec. Gener. Coop. Inter.).

Tipo de participación: Otros

Nombre del programa: Acción Integrada Hispano - Francesa

Cód. según financiadora: 1989 HF-236

Fecha de inicio-fin: 01/01/1990 - 01/01/1991

Duración: 1 año

Entidad/es participante/s: Universidad de Oviedo-Ecole Normale Superieure (Paris)

Régimen de dedicación: Tiempo completo



Actividades científicas y tecnológicas

Producción científica

Índice H: 23

Fecha de aplicación: 31/03/2016

Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1 Pilar Redondo; Antonio Largo; Carmen Barrientos. Structure and spectroscopic properties of imine acetaldehyde: a possible interstellar molecule. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. 478 - 3, pp. 3042 - 3048. 04/05/2018. ISSN 0004-6361
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 2 Pilar Redondo; Henar Martínez; Antonio Largo; Carmen Barrientos. Prebiotic molecules formation through the gas-phase reaction between azanone and protonated vinyl alcohol. ASTRONOMY & ASTROPHYSICS. 603, 13/06/2017. ISSN 0004-6361
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 3 Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Complex Organic Molecules Formation in Space Through Gas Phase Reactions: A Theoretical Approach. THE ASTROPHYSICAL JOURNAL. 836 - 240, pp. 240-1 - 240-8. 10/04/2017.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 4 Alvaro Vega-Vega; Antonio Largo; Pilar Redondo; Carmen Barrientos. Structure and Spectroscopic Properties of [Mg,C,N,O] Isomers: Plausible Astronomical Molecules. ACS EARTH AND SPACE CHEMISTRY. 1, pp. 158 - 167. 10/04/2017.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 5 Alvaro Vega-Vega; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Metallic Monoboronyl Compounds: Prediction of Their Structure and Comparison with the Cyanide Analogues. JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. 1, pp. 158 - 167. 10/01/2017.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 6 Carlos Cabezas; Carmen Barrientos; Antonio Largo; Jean-Claude Guillemin; José Luis Alonso. Metallic cyanoacetylides of copper, silver and gold: generation and structural characterization. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 18, pp. 28538 - 28547. 19/09/2016.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 7 Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. PREDICTION OF THE SPECTROSCOPIC PARAMETERS OF NEW IRON COMPOUNDS: HYDRIDE OF IRON CYANIDE/ISOCYANIDE, HFeCN/HFeNC. ASTROPHYSICAL JOURNAL. 828 - 45, pp. 45-1 - 45-9. 26/08/2016.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 8 Germán Molpeceres; Víctor Manuel Rayón; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Molecular Structure and Bonding in Plutonium Carbides: A 2 Theoretical Study of PuC₃. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 29/03/2016.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 9** Pilar Redondo; Antonio Largo; Carmen Barrientos. Is the reaction between formic acid and protonated aminomethanol a possible source of glycine precursors in the interstellar medium?. Astronomy and Astrophysics. 579 - A125, pp. 1 - 6. 15/07/2015.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 10** Pilar Redondo; Antonio Largo; Álvaro Vega-Vega; Carmen Barrientos. Structure and spectroscopic properties of neutral and cationic tetratomic [C,H,N,Zn] isomers: A theoretical study. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 142, pp. 104301-1 - 104305-11. 08/05/2015.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 11** Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. PEPTIDE BOND FORMATION THROUGH GAS-PHASE REACTIONS IN THE INTERSTELLAR MEDIUM:. ASTROPHYSICAL JOURNAL. 793, pp. 32-1 - 32-8. 09/2014.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 12** Carlos Cabezas; Carmen Barrientos; Antonio Largo; Jean-Claude Guillemin; José Cernicharo; Isabel Peña; José L. Alonso. Generation and structural characterization of aluminum cyanoacetylide. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 141, pp. 104305-1 - 104305-7. 08/2014.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 13** Carmen Barrientos; Pilar Redondo; Henar Martínez; Antonio Largo. COMPUTATIONAL PREDICTION OF THE SPECTROSCOPIC PARAMETERS OF METHANEDIOL, AN ELUSIVE MOLECULE FOR INTERSTELLAR DETECTION. ASTROPHYSICAL JOURNAL. 784, pp. 132-1 - 132-7. 04/2014.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 14** Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. SOME INSIGHTS INTO FORMAMIDE FORMATION THROUGH GAS-PHASE REACTIONS IN THE INTERSTELLAR MEDIUM. ASTROPHYSICAL JOURNAL. 780, pp. 181-1 - 181-7. 01/2014. ISSN 0004-637X
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 15** Pilar Redondo; Antonio Largo; Victor M. Rayon; Germán Molpeceres; José Ángel Sordo; Carmen Barrientos. Halogen-abstraction reactions from chloromethane and bromomethane molecules by alkaline-earth monocations. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 16, pp. 16121 - 16136. 2014. ISSN 1463-9076
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 16** Carmen Barrientos; Víctor Manuel Rayón; Antonio Largo; José Ángel Sordo; Pilar Redondo. Kinetics Studies of the Reactions of Main Fourth-Period Monocations (Ga⁺, Ge⁺, As⁺, and Se⁺) with Methyl Fluoride. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 117 - 33, pp. 7742 - 7753. 22/08/2013.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 17** Pilar Redondo; Adrián Varela-Álvarez; Víctor Manuel Rayón; Antonio Largo; José Ángel Sordo; Carmen Barrientos. Reactivity of First-Row Transition Metal Monocations (Sc⁺, Ti⁺, V⁺, Zn⁺) with Methyl Fluoride: A Computational Study (DOI: 10.1021/jp400366k). JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 117 - 14, pp. 2932 - 2943. 11/04/2013.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 18** Pilar Redondo; Henar Martínez; Álvaro Cimas; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Computational study of peptide bond formation in the gas phase through ion-molecule reactions. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 15 - 31, pp. 13005 - 13012. 2013. ISSN 1463-9076
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 19** Carmen Barrientos; Pilar Redondo; Laura Largo; Victor M. Rayon; Antonio Largo. GAS-PHASE SYNTHESIS OF PRECURSORS OF INTERSTELLAR GLYCINE: A COMPUTATIONAL STUDY OF THE REACTIONS OF ACETIC ACID WITH HYDROXYLAMINE AND ITS IONIZED AND PROTONATED DERIVATIVES. ASTROPHYSICAL JOURNAL. 748 - 2, pp. 99-1 - 99-7. 04/2012. ISSN 0004-637X
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 20** Estefania F. Villanueva; Pilar Redondo; Victor M. Rayon; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Small carbides of third-row main group elements: structure and bonding in C3X compounds (X = K-Br). PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 14 - 43, pp. 14923 - 14932. 2012. ISSN 1463-9076
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 21** Carmen Barrientos; Pilar Redondo; Victor M. Rayon; Antonio Largo. Structure and stability of neutral cyanide complexes of copper and zinc. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 504 - 4-6, pp. 125 - 129. 03/2011. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 22** Adrian Varela-Alvarez; Jose Angel Sordo; Pilar Redondo; Antonio Largo; Carmen Barrientos; Victor M. Rayon. Theoretical study of the C-F bond activation in methyl fluoride by alkaline-earth metal monocations. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS. 128 - 4-6, pp. 609 - 618. 03/2011. ISSN 1432-881X
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 23** Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo; Victor M. Rayon. Neutral cyanide complexes of iron: Structure and stability. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 500 - 1-3, pp. 9 - 13. 11/2010. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 24** Victor M. Rayon; Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Structure and bonding in third-row main group dicarbides C2X (X=K-Br). JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 133 - 12, pp. 124306-1 - 124306-8. 09/2010. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 25** Laura Largo; Carmen Barrientos; Victor M. Rayon; Antonio Largo; Pilar Redondo. Could the reactions of formic acid with CH₃NH₂⁺/CH₃NH₃⁺ produce protonated glycine?. INTERNATIONAL JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY. 295 - 1-2, pp. 21 - 25. 07/2010. ISSN 1387-3806
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 26** L. Largo; P. Redondo; V. M. Rayon; A. Largo; C. Barrientos. The reaction between NH₃⁺ and CH₃COOH: a possible process for the formation of glycine precursors in the interstellar medium. ASTRONOMY & ASTROPHYSICS. 516, 06/2010. ISSN 0004-6361
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 27** Victor M. Rayon; Carmen Barrientos; Pilar Redondo; Antonio Largo. A computational study of arsenic dicarbide (C₂As). CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 485 - 4-6, pp. 286 - 289. 01/2010. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 28** Pilar Redondo; Laura Largo; Carmen Barrientos. Charged FeC_n clusters: A comparison with TMC_n⁺/TMC_n⁻ (TM = Sc, Ti, V, Co and Zn, n=1-8) systems. CHEMICAL PHYSICS. 364 - 1-3, pp. 1 - 13. 10/2009. ISSN 0301-0104
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 29** Adrian Varela-Alvarez; V. M. Rayon; P. Redondo; C. Barrientos; Jose A. Sordo. Gas-phase reaction between calcium monocation and fluoromethane: Analysis of the potential energy hypersurface and kinetics calculations. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 131 - 14, pp. 134309-1 - 134309-11. 10/2009. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 30** Victor M. Rayon; Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Cyanide complexes of Ti(IV): A computational study. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 131 - 9, pp. 094507-1 - 094507-8. 09/2009. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 31** Laura Largo; Victor M. Rayon; Carmen Barrientos; Antonio Largo; Pilar Redondo. Stability of protonated and ionized hydroxylamine in the interstellar medium. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 476 - 4-6, pp. 174 - 177. 07/2009. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 32** Laura Largo; Carmen Barrientos; Pilar Redondo. Small iron doped carbon clusters: A comparison with early and late first-row transition metal doped clusters. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 130 - 13, pp. 134304-1 - 134304-10. 04/2009. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 33** Victor M. Rayon; Pilar Redondo; Haydee Valdes; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Polyisocyanides of Titanium. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 113 - 8, pp. 1574 - 1577. 02/2009. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 34** Laura Largo; Victor M. Rayon; Carmen Barrientos; Antonio Largo; Pilar Redondo. Gas-Phase Reaction of NH₂(+)
with Acetic Acid: Implications in Astrochemistry. JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION. 4 -
12, pp. 2085 - 2093. 12/2008. ISSN 1549-9618
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 35** Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. A density functional study of CoC_n (n=1-8) clusters: Structures
and stabilities. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 108 - 10, pp. 1684 - 1695. 08/2008.
ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 36** Carmen Barrientos; Pilar Redondo; Antonio Largo. Structural and electronic properties of ZnC_n^{+/-} clusters.
INTERNATIONAL JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY. 273 - 3, pp. 87 - 94. 06/2008. ISSN 1387-3806
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 37** Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Structures and stabilities of charged cobalt-doped carbon
clusters. INTERNATIONAL JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY. 272 - 2-3, pp. 187 - 198. 05/2008. ISSN
1387-3806
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 38** Laura Largo; Alvaro Cimas; Pilar Redondo; Victor M. Rayon; Carmen Barrientos. Charged titanium-doped carbon
clusters: Structures and energetics. INTERNATIONAL JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY. 266 - 1-3, pp. 50 -
61. 10/2007. ISSN 1387-3806
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 39** C. Barrientos; J. A. Sordo. On the application of the counterpoise correction for the basis set superposition error in
geometry optimization calculations of molecular systems: some inconsistent results. THEORETICAL CHEMISTRY
ACCOUNTS. 118 - 3, pp. 733 - 738. 09/2007. ISSN 1432-881X
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 40** Pilar Redondo; Victor M. Rayon; Haydee Valdes; Carmen Barrientos; Antonio Largo. {A theoretical study of the
{[FeCN]⁺} system: Cyanide-isocyanide competition and isomerization barrier}. CHEMICAL PHYSICS LETTERS.
445 - 1-3, pp. 22 - 27. 09/2007. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 41** Victor M. Rayon; Pilar Redondo; Haydee Valdes; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Cyanides and isocyanides of first-row transition metals: Molecular structure, bonding, and isomerization barriers. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 111 - 28, pp. 6334 - 6344. 07/2007. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 42** Victor M. Rayon; Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Structure and bonding in first-row transition metal dicarbide cations MC_2^+ . JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 111 - 28, pp. 6345 - 6353. 07/2007. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 43** Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Structures and stabilities of non-linear $VC_n^{+/-}$ ($n=1-8$) clusters. INTERNATIONAL JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY. 263 - 1, pp. 101 - 112. 05/2007. ISSN 1387-3806
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 44** Carmen Barrientos; Pilar Redondo; Antonio Largo. Structure and stability of small ZnC_n clusters. JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION. 3 - 2, pp. 657 - 664. 03/2007. ISSN 1549-9618
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 45** Laura Largo; Alvaro Cimas; Pilar Redondo; Victor M. Rayon; Carmen Barrientos. Structure of small TiC_n clusters: A theoretical study. CHEMICAL PHYSICS. 330 - 3, pp. 431 - 440. 11/2006. ISSN 0301-0104
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 46** Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Ionization potential and electron affinity of VC_n ($n=1-8$) open-chain clusters: A theoretical study. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM. 769 - 1-3, pp. 225 - 236. 09/2006. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 47** A. Cimas; V. M. Rayon; C. Barrientos; M. Aschi; J. A. Sordo; A. Largo. Reaction of $N(D-2)$ atoms with bromomethyl radicals: A theoretical study. CHEMICAL PHYSICS. 328 - 1-3, pp. 45 - 52. 09/2006. ISSN 0301-0104
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 48** Victor M. Rayon; Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Structure and bonding in first-row transition-metal dicarbides: Are they related to the stability of met-cars?. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 12 - 26, pp. 6963 - 6975. 09/2006. ISSN 0947-6539
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 49** Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Small carbon clusters doped with vanadium metal: A density functional study of VC_n ($n=1-8$). JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION. 2 - 3, pp. 885 - 893. 05/2006. ISSN 1549-9618
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 50** A Cimas; VM Rayon; C Barrientos; M Aschi; JA Sordo; A Largo. A computational study on the reaction of $N(D-2)$ atoms with CH_2Cl radicals. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 422 - 1-3, pp. 276 - 281. 04/2006. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 51** VM Rayon; P Redondo; C Barrientos; A Largo. Structure of binary titanium-carbon ions: A theoretical study of TiC_2^+ and $Ti_2C_4^+$. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 422 - 1-3, pp. 289 - 293. 04/2006. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 52** A Cimas; VM Rayon; M Aschi; C Barrientos; JA Sordo; A Largo. On the reaction of ground-state nitrogen atoms with bromomethyl radicals: A computational study. INTERNATIONAL JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY. 249, pp. 451 - 461. 03/2006. ISSN 1387-3806
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 53** P Redondo; C Barrientos; A Largo. Small ScCn cyclic clusters: A density functional study of their structure and stability. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 110 - 11, pp. 4057 - 4064. 03/2006. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 54** A Cimas; VM Rayon; M Aschi; C Barrientos; JA Sordo; A Largo. Computational study of the reaction of N(D-2) atoms with CH₂F radicals: An example of a barrier-free reaction involving very high internal energies. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 123 - 11, pp. 114312-1 - 114312-11. 09/2005. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 55** P Redondo; C Barrientos; A Largo. Small carbon clusters doped with early transition metals: A theoretical study of ScCn, ScCn⁺, and ScCn⁻ (n=1-8) open-chain clusters. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 109 - 38, pp. 8594 - 8603. 09/2005. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 56** A Cimas; VM Rayon; M Aschi; C Barrientos; JA Sordo; A Largo. A computational study of the reaction of ground-state nitrogen atoms with chloromethyl radicals. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 109 - 29, pp. 6540 - 6548. 07/2005. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 57** P Redondo; C Barrientos; A Largo. Theoretical study of the structures and stabilities of small CaCn, CaCn⁺, and CaCn⁻ (n=1-8) cyclic clusters. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 108 - 50, pp. 11132 - 11140. 12/2004. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 58** A Largo; P Redondo; C Barrientos. On the competition between linear and cyclic isomers in second-row dicarbides. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 126 - 44, pp. 14611 - 14619. 11/2004. ISSN 0002-7863
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 59** P Redondo; C Barrientos; A Largo. Structures and stabilities of CaC₃⁺ and CaC₃H⁺ isomers. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM. 709 - 1-3, pp. 143 - 155. 11/2004. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 60** A Largo; P Redondo; C Barrientos. Structure and properties of the open-chain calcium-doped carbon clusters CaCn, CaCn⁺, and CaCn⁻ (n=1-8). JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 108 - 30, pp. 6421 - 6429. 07/2004. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 61** A Largo; P Redondo; C Barrientos. Theoretical study of possible ion-molecule reactions leading to precursors of glycine in the interstellar medium. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 98 - 4, pp. 355 - 360. 06/2004. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 62** P Redondo; C Barrientos; A Largo. Theoretical study of the structures and stabilities of AlCn, AlCn⁺, and AlCn⁻ (n=1-7) monocyclic clusters. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 96 - 6, pp. 615 - 626. 02/2004. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 63** P Redondo; C Barrientos; A Cimas; A Largo. Structure and stability of small NaCn, NaCn⁺, and NaCn⁻, clusters: A theoretical study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 108 - 1, pp. 212 - 224. 01/2004. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 64** P Redondo; C Barrientos; A Largo. Structure and stability of binary calcium-carbon compounds: a comparative ab initio and DFT study of CaC₂. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 382 - 1-2, pp. 150 - 159. 11/2003. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 65** A Cimas; C Barrientos; A Largo. Structure and stability of BC₂P isomers: a theoretical study. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM. 633 - 1, pp. 57 - 65. 08/2003. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 66** P Redondo; C Barrientos; A Cimas; A Largo. Theoretical study of small MgC_n, MgC_n⁺, and MgC_n⁻ cyclic clusters. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 107 - 32, pp. 6317 - 6325. 08/2003. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 67** P Redondo; C Barrientos; A Largo. Ionization and protonation of NaC₃: a theoretical study. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM. 630 - SI, pp. 59 - 73. 07/2003. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 68** A Cimas; M Aschi; C Barrientos; VM Rayon; JA Sordo; A Largo. Computational study on the kinetics of the reaction of N(S-4) with CH₂F. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 374 - 5-6, pp. 594 - 600. 06/2003. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 69** P Redondo; C Barrientos; A Cimas; A Largo. Theoretical study of MgC_n, MgC_n⁺, MgC_n⁻ (n=1-7) open-chain clusters. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 107 - 23, pp. 4676 - 4682. 06/2003. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 70** A Largo; P Redondo; C Barrientos; LM Ziurys. Structures and stabilities of CaC₃ isomers. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 355 - 5-6, pp. 509 - 516. 04/2002. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 71** A Largo; P Redondo; C Barrientos. Theoretical study of AlC_n, AlC_n⁺, and AlC_n⁻ (n=1-7) clusters. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 106 - 16, pp. 4217 - 4225. 04/2002. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 72** C Barrientos; P Redondo; A Largo. Ionization and protonation of MgC₃: A theoretical study. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 86 - 1, pp. 114 - 121. 01/2002. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 73** B Menendez; VM Rayon; JA Sordo; A Cimas; C Barrientos; A Largo. The reaction of N(S-4) with CH₂F: A comparative ab initio and DFT study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 105 - 43, pp. 9917 - 9925. 11/2001. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 74** B Menendez; VM Rayon; JA Sordo; A Cimas; C Barrientos; A Largo. The reaction of N(S-4) with CH₂F: A comparative ab initio and DFT study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 105 - 43, pp. 23A - 24A. 11/2001. ISSN 1089-5647
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 75** P Redondo; A Largo; F Garcia; C Barrientos. Theoretical study of AlC₃⁺. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 84 - 6, pp. 660 - 669. 09/2001. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 76** C Barrientos; P Redondo; A Largo. Theoretical study of the structures and stabilities of NaC₃ isomers. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 343 - 5-6, pp. 563 - 570. 08/2001. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 77** C Barrientos; A Cimas; A Largo. Structure and stability of AlC₂N isomers: A comparative ab initio and DFT study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 105 - 27, pp. 6724 - 6728. 07/2001. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 78** A Largo; A Cimas; P Redondo; C Barrientos. Theoretical study of C_nCl, C_nCl⁺, C_nCl⁻ (n=1-7) clusters. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 84 - 1, pp. 127 - 135. 07/2001. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 79** P Redondo; C Barrientos; A Largo. Structures and stabilities of MgC₃ isomers: a theoretical study. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 335 - 1-2, pp. 64 - 70. 02/2001. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 80** C Barrientos; P Redondo; A Largo. Reaction of C₃H₂⁺ with atomic nitrogen: A theoretical study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 104 - 49, pp. 11541 - 11548. 12/2000. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 81** P Redondo; JR Redondo; C Barrientos; A Largo. Theoretical study of the reaction of Cl⁺ with C₃H₂. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 104 - 43, pp. 9733 - 9739. 11/2000. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 82** P Redondo; MJ Ruiz; R Boronat; C Barrientos; A Largo. Theoretical study of the reaction of CN with C₂H₂⁺. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS. 104 - 3-4, pp. 199 - 202. 07/2000. ISSN 1432-881X
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 83** C Barrientos; P Redondo; A Largo. Theoretical study of AlC₃: linear or cyclic ground state?. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 320 - 5-6, pp. 481 - 486. 04/2000. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 84** P Redondo; JR Redondo; C Barrientos; A Largo. Theoretical study of the C₃Cl radical and its cation. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 315 - 3-4, pp. 224 - 232. 12/1999. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 85** P Redondo; E Calleja; C Barrientos; A Largo. Theoretical study of the reaction of S⁺ with C₃H₂. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 103 - 45, pp. 9125 - 9131. 11/1999. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 86** C Barrientos; P Redondo; A Largo. Theoretical study of the reaction of S⁺ with acetylene. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 306 - 3-4, pp. 168 - 178. 06/1999. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 87** P Redondo; A Saguillo; C Barrientos; A Largo. Theoretical study of the reaction of Si⁺ with C₃H₂. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 103 - 17, pp. 3310 - 3320. 04/1999. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 88** VM Rayon; C Barrientos; A Largo. Theoretical study of possible interstellar processes for the production of C₂Cl precursors. THEOCHEM-JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. 432 - 1, pp. 75 - 88. 05/1998. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 89** E delRio; C Barrientos; A Largo. Theoretical studies of possible processes for the interstellar production of phosphorus compounds: The reaction of P⁺ with C₃H₂. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 100 - 35, pp. 14643 - 14650. 08/1996. ISSN 0022-3654
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 90** VM Rayon; C Barrientos; A Largo. Reaction of carbon atoms with H₂Cl⁺: An ab initio study of a possible interstellar process. THEOCHEM-JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. 363 - 3, pp. 319 - 331. 04/1996. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 91** A Largo; C Barrientos. Theoretical studies of simple organoboron compounds: Structures and stabilities of BC₂H₄ isomers. APPLIED ORGANOMETALLIC CHEMISTRY. 10 - 3-4, pp. 283 - 295. 04/1996. ISSN 0268-2605
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 92** E delRio; C Barrientos; A Largo. Theoretical study of the C₃P radical and its cation. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 100 - 2, pp. 585 - 593. 01/1996. ISSN 0022-3654
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 93** C BARRIENTOS; A LARGO. IONIZATION AND PROTONATION OF (MGCN) - AN AB-INITIO STUDY OF SOME GAS-PHASE PROPERTIES OF THE FIRST MAGNESIUM COMPOUND IN-SPACE. THEOCHEM-JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. 336 - 1, pp. 29 - 37. 06/1995. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 94** A LARGO; C BARRIENTOS; X LOPEZ; FP COSSIO; JM UGALDE. THEORETICAL-STUDIES OF POSSIBLE PROCESSES FOR THE INTERSTELLAR PRODUCTION OF PHOSPHORUS-COMPOUNDS - THE REACTION OF P⁺ WITH ACETYLENE. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 99 - 17, pp. 6432 - 6440. 04/1995. ISSN 0022-3654
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 95** FJ VIRUMBRALES; I MARTIN; C BARRIENTOS. ISOELECTRONIC SMOOTHING OF ENERGY-LEVELS AND CALCULATIONS ON THE 2S_NS-1-]2SMP P-1(0) TRANSITIONS IN THE BERYLLIUM ISOELECTRONIC SEQUENCE. ZEITSCHRIFT FUR PHYSIK D-ATOMS MOLECULES AND CLUSTERS. 32 - 3, pp. 179 - 185. 12/1994. ISSN 0178-7683
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 96** C LAVIN; C BARRIENTOS; I MARTIN. RELATIVISTIC QUANTUM-DEFECT CALCULATIONS ON THE COPPER ISOELECTRONIC SEQUENCE. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 50 - 6, pp. 411 - 428. 06/1994. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 97** A LARGO; C BARRIENTOS; X LOPEZ; JM UGALDE. THEORETICAL-STUDY OF THE C₂P RADICAL AND (C₂P)⁺ SPECIES. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 98 - 15, pp. 3985 - 3988. 04/1994. ISSN 0022-3654
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 98** A LARGO; C BARRIENTOS. THEORETICAL-STUDY OF THE STRUCTURES AND STABILITIES OF (SiC₂H₂)⁺ SPECIES - THE REACTION OF Si⁺ WITH ACETYLENE. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 98 - 15, pp. 3978 - 3984. 04/1994. ISSN 0022-3654
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 99** X LOPEZ; FP COSSIO; JM UGALDE; C BARRIENTOS; A LARGO. AB-INITIO CHARACTERIZATION OF GASEOUS (CO₂P)⁺ SPECIES. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 98 - 9, pp. 2294 - 2297. 03/1994. ISSN 0022-3654



Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 100** X LOPEZ; JM UGALDE; FP COSSIO; A LARGO; C BARRIENTOS. TOPOLOGICAL ANALYSIS OF THE CHARGE-DENSITY FOR PHOSPHORUS ION-MOLECULE COMPLEXES BOUND TO WATER AND AMMONIA MOLECULES. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 98 - 12, pp. 3148 - 3153. 03/1994. ISSN 0022-3654

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 101** JR FLORES; C BARRIENTOS; A LARGO. REACTIONS OF CH₃⁺ WITH 2ND-ROW ATOMS - AN AB-INITIO STUDY. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 98 - 4, pp. 1090 - 1099. 01/1994. ISSN 0022-3654

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 102** X LOPEZ; JM UGALDE; FP COSSIO; B LECEA; A LARGO; C BARRIENTOS. AB-INITIO STUDY OF PHOSPHORUS ION COMPLEXES OF AMMONIA AND WATER. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 97 - 37, pp. 9337 - 9340. 09/1993. ISSN 0022-3654

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 103** I MARTIN; J KARWOWSKI; GHF DIERCKSEN; C BARRIENTOS. TRANSITION-PROBABILITIES IN THE LITHIUM SEQUENCE. ASTRONOMY & ASTROPHYSICS SUPPLEMENT SERIES. 100 - 3, pp. 595 - 605. 09/1993. ISSN 0365-0138

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 104** C SARASOLA; X LOPEZ; A ARRIETA; C BARRIENTOS; A LARGO; JM UGALDE. ABINITIO CHARACTERIZATION OF NOVEL GASEOUS (PO)₂⁺ SPECIES. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 97 - 22, pp. 5860 - 5863. 06/1993. ISSN 0022-3654

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 105** X LOPEZ; C SARASOLA; B LECEA; A LARGO; C BARRIENTOS; JM UGALDE. ABINITIO CHARACTERIZATION OF GASEOUS P₂O₂. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 97 - 16, pp. 4078 - 4079. 04/1993. ISSN 0022-3654

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 106** X LOPEZ; JM UGALDE; C BARRIENTOS; A LARGO; P REDONDO. THEORETICAL-STUDY OF POSSIBLE PROCESSES FOR THE INTERSTELLAR PRODUCTION OF PHOSPHORUS-COMPOUNDS - REACTION OF P⁺ WITH SH₂. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 97 - 8, pp. 1521 - 1525. 02/1993. ISSN 0022-3654

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 107** C BARRIENTOS; A LARGO; P REDONDO; F PAUZAT; Y ELLINGER. THEORETICAL-STUDY OF A BASIC PROCESS IN INTERSTELLAR CHLORINE CHEMISTRY - REACTION OF C⁺ WITH HCL. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 97 - 1, pp. 173 - 176. 01/1993. ISSN 0022-3654

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 108** C BARRIENTOS; I MARTIN. QUANTUM-DEFECT STUDIES OF SYSTEMATIC TRENDS OF F-VALUES - TRANSITIONS IN SUBORDINATE SPECTRAL SERIES. JOURNAL OF QUANTITATIVE SPECTROSCOPY & RADIATIVE TRANSFER. 48 - 3, pp. 287 - 293. 09/1992. ISSN 0022-4073

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 109** C BARRIENTOS; A LARGO. A THEORETICAL-STUDY OF THE STRUCTURES AND STABILITIES OF SC₂H₂⁺ SPECIES - THE REACTION OF S⁺ WITH ACETYLENE. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 96 - 14, pp. 5808 - 5814. 07/1992. ISSN 0022-3654

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista



- 110** C LAVIN; C BARRIENTOS; I MARTIN. QUANTUM-DEFECT STUDIES OF TRANSITIONS IN THE DIFFUSE SPECTRAL SERIES OF THE POTASSIUM ISOELECTRONIC SEQUENCE. JOURNAL OF QUANTITATIVE SPECTROSCOPY & RADIATIVE TRANSFER. 47 - 5, pp. 411 - 419. 05/1992. ISSN 0022-4073
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 111** I MARTIN; C LAVIN; C BARRIENTOS. FINE-STRUCTURE OSCILLATOR-STRENGTHS FOR EXCITED-STATE TRANSITIONS IN CU-LIKE IONS. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 26, pp. 465 - 474. 1992. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 112** A LARGO; C BARRIENTOS. THEORETICAL-STUDIES OF POSSIBLE PROCESSES FOR THE INTERSTELLAR PRODUCTION OF PHOSPHORUS-COMPOUNDS - REACTION OF P+ WITH HCN AND PROTONATION OF CNP COMPOUNDS. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 95 - 24, pp. 9864 - 9868. 11/1991. ISSN 0022-3654
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 113** I MARTIN; C LAVIN; C BARRIENTOS. SYSTEMATIC TRENDS ALONG THE POTASSIUM SEQUENCE - STUDY OF NS₂S-MP₂P₀ TRANSITIONS. CANADIAN JOURNAL OF PHYSICS. 69 - 10, pp. 1273 - 1283. 10/1991. ISSN 0008-4204
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 114** C BARRIENTOS; A LARGO. AN ABINITIO STUDY OF C₂S PROTONATION. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 184 - 1-3, pp. 168 - 174. 09/1991. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 115** A LARGO; JR FLORES; C BARRIENTOS; JM UGALDE. THEORETICAL-STUDIES OF POSSIBLE PROCESSES FOR INTERSTELLAR PRODUCTION OF PHOSPHORUS-COMPOUNDS - REACTION OF P+ WITH METHANE. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 95 - 17, pp. 6553 - 6557. 08/1991. ISSN 0022-3654
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 116** A LARGO; P REDONDO; C BARRIENTOS; JM UGALDE. THEORETICAL-STUDIES OF POSSIBLE PROCESSES FOR THE INTERSTELLAR PRODUCTION OF PHOSPHORUS-COMPOUNDS - REACTION OF P+ WITH WATER. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 95 - 14, pp. 5443 - 5445. 07/1991. ISSN 0022-3654
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 117** P REDONDO; A LARGO; C BARRIENTOS; JM UGALDE. A THEORETICAL-STUDY OF THE STRUCTURES AND STABILITIES OF (H₂PO)⁺ SPECIES AND THE PROTON AFFINITIES OF HPO AND POH. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 95 - 11, pp. 4318 - 4323. 05/1991. ISSN 0022-3654
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 118** I MARTIN; C BARRIENTOS. ANALYTICAL WAVE-FUNCTIONS FOR ATOMIC QUANTUM-DEFECT THEORY - COMMENT. PHYSICAL REVIEW A. 43 - 7, pp. 4061 - 4062. 04/1991. ISSN 1050-2947
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 119** A LARGO; JR FLORES; C BARRIENTOS; JM UGALDE. THEORETICAL-STUDIES OF POSSIBLE PROCESSES FOR THE INTERSTELLAR PRODUCTION OF PHOSPHORUS-COMPOUNDS - REACTION OF P+ WITH AMMONIA. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 95 - 1, pp. 170 - 175. 01/1991. ISSN 0022-3654
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 120** C BARRIENTOS; I MARTIN. QUANTUM-DEFECT STUDIES OF SYSTEMATIC TRENDS OF F VALUES. PHYSICAL REVIEW A. 42 - 1, pp. 432 - 439. 07/1990. ISSN 1050-2947
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 121** I MARTIN; C BARRIENTOS; I GUTIEZ. THEORETICAL-STUDY OF TRANSITIONS INVOLVING 3 RYDBERG SERIES IN 2-VALENCE ELECTRON-SYSTEMS - MGI AND ITS ELECTRONIC SEQUENCE. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 37 - 3, pp. 221 - 240. 03/1990. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 122** A LARGO; C BARRIENTOS. A THEORETICAL-STUDY OF THE C₂H, C₂F AND C₂CL RADICALS AND THEIR POSITIVE-IONS. CHEMICAL PHYSICS. 138 - 2-3, pp. 291 - 301. 11/1989. ISSN 0301-0104
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 123** C BARRIENTOS; I MARTIN. CORE-POLARIZATION EFFECTS IN SUBORDINATE SERIES OF THE ALKALI ATOMS. CANADIAN JOURNAL OF PHYSICS. 67 - 10, pp. 996 - 1001. 10/1989. ISSN 0008-4204
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 124** A LARGOCABRERIZO; C BARRIENTOS. THEORETICAL-STUDIES OF POTENTIAL ASTROPHYSICAL MOLECULES - THE CLCC AND SC₂H RADICALS. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 155 - 6, pp. 550 - 556. 03/1989. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 125** A LARGOCABRERIZO; C BARRIENTOS. AN ABINITIO STUDY OF THE HBS⁺, FBS⁺, CLBS⁺ CATIONS. THEOCHEM-JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. 52, pp. 183 - 189. 01/1989. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 126** A LARGOCABRERIZO; C BARRIENTOS. A COMPARATIVE THEORETICAL-STUDY OF THE C₂N⁺ AND SiCN⁺ IONS AND THEIR FORMATION PROCESSES. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 148 - 1, pp. 79 - 85. 07/1988. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 127** C BARRIENTOS; I MARTIN. OSCILLATOR STRENGTH DISTRIBUTION IN THE ALKALINE-EARTH ELEMENTS. CANADIAN JOURNAL OF PHYSICS. 66 - 1, pp. 29 - 33. 01/1988. ISSN 0008-4204
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 128** C BARRIENTOS; I MARTIN; J MAZON. CORE POLARIZATION EFFECTS IN ELECTRON TRANSITIONS - OSCILLATOR-STRENGTHS FOR THE NA ISOELECTRONIC SEQUENCE. JOURNAL DE CHIMIE PHYSIQUE ET DE PHYSICO-CHIMIE BIOLOGIQUE. 84 - 5, pp. 715 - 718. 05/1987. ISSN 0021-7689
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 129** C BARRIENTOS; I MARTIN. INTERACTION BETWEEN 2 RYDBERG SERIES IN THE ABSORPTION-SPECTRA OF CA, SR AND BA. JOURNAL DE CHIMIE PHYSIQUE ET DE PHYSICO-CHIMIE BIOLOGIQUE. 84 - 5, pp. 719 - 724. 05/1987. ISSN 0021-7689
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 130** C BARRIENTOS; I MARTIN. OSCILLATOR-STRENGTH DISTRIBUTION IN THE DISCRETE AND CONTINUOUS SPECTRA OF THE ALKALI ELEMENTS. CANADIAN JOURNAL OF PHYSICS. 65 - 4, pp. 435 - 437. 04/1987. ISSN 0008-4204
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 131** Carmen Barrientos; Inmaculada Martín. Photoionisation cross sections of one-valence electron atomic species through the Quantum defect Orbital Method. Anales de Química. 83, pp. 514 - 521. 1987.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 132** I MARTIN; C BARRIENTOS. CORE-POLARIZATION EFFECTS IN THE ALKALI ATOMS - OSCILLATOR-STRENGTH CALCULATIONS. CANADIAN JOURNAL OF PHYSICS. 64 - 8, pp. 867 - 871. 08/1986. ISSN 0008-4204



Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 133** C BARRIENTOS; I MARTIN. QUANTUM DEFECT ORBITAL CALCULATIONS ON THE ALKALINE-EARTH ELEMENTS - OSCILLATOR-STRENGTHS AND PHOTOIONIZATION CROSS-SECTIONS. CANADIAN JOURNAL OF PHYSICS. 63 - 11, pp. 1441 - 1445. 1985. ISSN 0008-4204

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 134** J.J. Novoa; A. Largo; C. Barrientos; E. Besalú. Computational Techniques: Computer Programming and Numerical Calculus. LIBRO: Theoretical and Computational Chemistry: Foundations, Methods and techniques, p. 279-384; (eds.: J. Andrés, J. Bertrán), Universidad Jaume I, Castellón, 2007 (. ISBN 978-84-8021-615-9)

- 135** A. Largo; E. Del Río; C. Barrientos. Interstellar Chemistry of Binary Phosphorus-Carbon Compounds. LIBRO: Electronic Structure: Predictions and Applications, p.111-150; (eds. A. Irigoras, J.M. Ugalde), Donostia ,1996 (.

- 136** J.J. Novoa y A. Largo. Técnicas Computacionales. LIBRO: Química Teórica y Computacional, p. 143-215; (eds.: J. Andrés, J. Bertrán), Universidad Jaume I, Castellón, 2000 (. ISBN 84-8021-312-4)

Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

- 1** **Título del trabajo:** Formation of Peptide Bond in Space through Gas-phase Reactions: Formamide and Acetamide

Nombre del congreso: WATOC-2014. Internacional The World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Santiago de Chile, Chile

Fecha de celebración: 05/10/2014

Fecha de finalización: 10/10/2014

P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo.

- 2** **Título del trabajo:** Possible Ion-Molecule Reactions Leading to Interstellar Glycine

Nombre del congreso: WATOC-2014. Internacional The World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote

Ciudad de celebración: Santiago de Chile, Chile

Fecha de celebración: 05/10/2014

Fecha de finalización: 10/10/2014

A. Largo; Henar Martínez; P. Redondo; C. Barrientos.

- 3** **Título del trabajo:** Reactivity of Alkaline-Earth Monocations with Halomethane Molecules: A Computational Kinetic Study

Nombre del congreso: WATOC-2014. Internacional The World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Santiago de Chile, Chile

Fecha de celebración: 05/10/2014

Fecha de finalización: 10/10/2014

C. Barrientos; P. Redondo; A. Largo; Víctor M. Rayón; Germán Molpeceres; José A. Sordo.



- 4** **Título del trabajo:** Gas-Phase Reactions of Metal Monocations with CH₃X (X= Cl, Br): Mechanism for the C-X Bond Activation
Nombre del congreso: 9th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2014. Internacional.
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Badajoz, España
Fecha de celebración: 01/07/2014
Fecha de finalización: 04/07/2014
C. Barrientos; P. Redondo; A. Largo; Víctor M. Rayón; Germán Molpeceres; José A. Sordo.
- 5** **Título del trabajo:** Molecular Structure of Plutonium Tricarbide: a Computational Study
Nombre del congreso: 9th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2014. Internacional.
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Badajoz, España
Fecha de celebración: 01/07/2014
Fecha de finalización: 04/07/2014
A. Largo; Germán Molpeceres; C. Barrientos; Víctor M. Rayón; P. Redondo.
- 6** **Título del trabajo:** Structure and Spectroscopic Properties of Neutral and Cationic Tetratomic [C,H,N,Zn] Isomers: A Theoretical Study
Nombre del congreso: 9th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2014. Internacional.
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Badajoz, España
Fecha de celebración: 01/07/2014
Fecha de finalización: 04/07/2014
P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo.
- 7** **Título del trabajo:** Study of ion-molecule reactions leading to interstellar glycine
Nombre del congreso: 9th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2014. Internacional.
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Badajoz, España
Fecha de celebración: 01/07/2014
Fecha de finalización: 04/07/2014
Henar Martínez; A. Largo; P. Redondo; C. Barrientos.
- 8** **Título del trabajo:** Reactivity of first-row transition metal monocations with methyl fluoride: a computational kinetic study
Nombre del congreso: The VIIIth Congress of the International Society of Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VIII). Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Budapest, Hungría
Fecha de celebración: 29/08/2013
Fecha de finalización: 31/08/2013



C. Barrientos; P. Redondo; V. M. Rayón; A. Largo; J. A. Sordo.

- 9** **Título del trabajo:** Theoretical studies of possible routes for synthesis of amino acids in space
Nombre del congreso: The VIIIth Congress of the International Society of Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VIII). Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Budapest, Hungría
Fecha de celebración: 29/08/2013
Fecha de finalización: 31/08/2013
A. Largo; C. Barrientos; P. Redondo; H. Martínez.
- 10** **Título del trabajo:** C-F Bond Activation by Main-Fourth-Period Mono-Cations(Ga⁺, Ge⁺, As⁺, and Se⁺)
Nombre del congreso: XXXIXth Congress of theoretical Chemists of Latin Expression QUITEL 2012. Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Granada, España
Fecha de celebración: 01/07/2013
Fecha de finalización: 05/07/2013
P. Redondo; C. Barrientos; V. M. Rayón; A. Largo; J. A. Sordo.
- 11** **Título del trabajo:** Peptide bond formation in the gas phase: on the mechanism of the reaction of protonated glycine with neutral glycine
Nombre del congreso: XXXIXth Congress of theoretical Chemists of Latin Expression QUITEL 2012. Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Granada, España
Fecha de celebración: 01/07/2013
Fecha de finalización: 05/07/2013
H. Martínez; P. Redondo; A. Cimas; C. Barrientos; A. Largo.
- 12** **Título del trabajo:** Small carbides of third-row main group elements: Structure and bonding
Nombre del congreso: Theoretical Chemistry in Spain told by women A symposium in Honour of Rosa Caballol. Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote **Intervención por:** Por invitación
Ciudad de celebración: Tarragona, España
Fecha de celebración: 30/01/2013
Fecha de finalización: 31/01/2013
P. Redondo; E.F. Villanueva; V.M. Rayón; A. Largo; C.Barrientos.
- 13** **Título del trabajo:** Exploration of Different Routes for the Formation of Formamide in Space
Nombre del congreso: XXVIIIth Congress of theoretical Chemists of Latin Expression QUITEL 2012. Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Natal-RN,
Fecha de celebración: 02/12/2012
Fecha de finalización: 07/12/2012
P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 02/2007.



- 14 Título del trabajo:** Peptide bond formation through gas-phase ion-molecule reactions: A Computational study
Nombre del congreso: XXVIIIth Congress of theoretical Chemists of Latin Expression QUITEL 2012. Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Natal-RN,
Fecha de celebración: 02/12/2012
Fecha de finalización: 07/12/2012
A. Largo; H. Martínez; A. Cimas; P. Redondo; C. Barrientos. 12/2012.
- 15 Título del trabajo:** Structure and bonding in small carbides
Nombre del congreso: XXVIIIth Congress of theoretical Chemists of Latin Expression QUITEL 2012. Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Natal-RN,
Fecha de celebración: 02/12/2012
Fecha de finalización: 07/12/2012
C. Barrientos; P. Redondo; V.M. Rayón; E. Fernández; A. Largo.
- 16 Título del trabajo:** Applications of Computational Chemistry in Astrochemistry: possible ion-molecule routes toward interstellar glycine
Nombre del congreso: Theory and Applications of Computational Chemistry TACC 2012. Internacional.
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote **Intervención por:** Por invitación
Ciudad de celebración: Pavia, Italia
Fecha de celebración: 02/09/2012
Fecha de finalización: 07/09/2012
C. Barrientos; P. Redondo; A. Largo.
- 17 Título del trabajo:** Searching for the Origin of Biomolecules in Space
Nombre del congreso: VIIIth Congress on Electronic Structure: Principles and Applications ESPA 2012. Internacional.
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Barcelona, España
Fecha de celebración: 26/06/2012
Fecha de finalización: 29/06/2012
P. Redondo; A. Largo; C. Barrientos.
- 18 Título del trabajo:** Structure and bonding in third-row main group tricarbides
Nombre del congreso: VIIIth Congress on Electronic Structure: Principles and Applications ESPA 2012. Internacional.
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Barcelona, España
Fecha de celebración: 26/06/2012
Fecha de finalización: 29/06/2012
P. Redondo; E. Fernández; V.M. Rayón; A. Largo; C. Barrientos.



- 19 Título del trabajo:** Gas phase reactions between fluoremethane and third-row monocations
Nombre del congreso: QUITEL 2011. Internacional.
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Riviera Maya, México
Fecha de celebración: 04/12/2011
Fecha de finalización: 09/12/2011
P. Redondo; C. Barrientos; V.M. Rayón; A. Largo; J.A. Sordo.
- 20 Título del trabajo:** On the search for synthetic routes leading to interstellar glycine.
Nombre del congreso: QUITEL 2011. Internacional.
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Riviera Maya, México
Fecha de celebración: 04/12/2011
Fecha de finalización: 09/11/2012
C. Barrientos; P. Redondo; L. Largo; V.M. Rayón; A. Largo.
- 21 Título del trabajo:** Competitive kinetical study of the C-F bond activation in methyl fluoride by third-row cations in gas phase
Nombre del congreso: WATOC-2011. Internacional. The World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 17/07/2011
Fecha de finalización: 22/07/2011
P. Redondo; J.A. Sordo; C. Barrientos; V.M. Rayón; A. Largo.
- 22 Título del trabajo:** Computational Astrochemistry: Ion-molecule processes in the synthesis of interstellar glycine.
Nombre del congreso: WATOC-2011. Internacional The World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 17/07/2011
Fecha de finalización: 22/07/2011
A. Largo; P. Redondo; C. Barrientos; L. Largo; V.M. Rayón. 07/2011.
- 23 Título del trabajo:** Neutral polycyanides of Transition metals
Nombre del congreso: WATOC-2011. Internacional The World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 17/07/2011
Fecha de finalización: 22/07/2011
C. Barrientos; P. Redondo; V.M. Rayón; A. Largo.



- 24** **Título del trabajo:** Reactions of $\text{NH}_2\text{OH}^+/\text{NH}_3\text{OH}^+$ with acetic acid.
Nombre del congreso: WATOC-2011. Internacional The World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 17/07/2011
Fecha de finalización: 22/07/2011
L. Largo; P. Redondo; V.M. Rayón; C. Barrientos; A. Largo.07/2011.
- 25** **Título del trabajo:** Could the reactions of acetic acid with hydroxylamine-derived ions produce glycine precursors?
Nombre del congreso: The Molecular Universe (IAU SYMPOSIUM "280
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Toledo, España
Fecha de celebración: 30/05/2011
P. Redondo; L. Largo; C. Barrientos; V.M. Rayón; A. Largo. 30/05/2003.
- 26** **Título del trabajo:** C-F bond activation in methyl fluoride by alkaline-earth metal cations: analysis of the potential energy hypersurface and kinetics calculations
Nombre del congreso: 36ème CHITEL. Internacional.
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Anglet, Francia
Fecha de celebración: 29/07/2010
Fecha de finalización: 04/10/2010
P. Redondo; A. Varela; J. A. Sordo; C. Barrientos; V. M. Rayón; A. Largo. 2004.
- 27** **Título del trabajo:** C-F bond activation by bare metal cations: kinetics and mechanism
Nombre del congreso: 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications ESPA2010. Internacional.
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Oviedo, España
Fecha de celebración: 29/06/2010
Fecha de finalización: 02/07/2010
V. M. Rayón; A. Largo; A. Varela. C. Barrientos; P. Redondo; J. A. Sordo.
- 28** **Título del trabajo:** Reactions of formic acid with $\text{CH}_3\text{NH}_2^+/\text{CH}_3\text{NH}_3^+$: astrochemical implications
Nombre del congreso: 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications ESPA2010. Internacional.
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Oviedo, España
Fecha de celebración: 29/06/2010
Fecha de finalización: 02/07/2010
P. Redondo; L. Largo; C. Barrientos; V. M. Rayón; A. Largo.
- 29** **Título del trabajo:** Structure and bonding in third-row main group dicarbides C_2X ($\text{X}=\text{K}-\text{Br}$)
Nombre del congreso: 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications ESPA2010. Internacional.
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Oviedo, España
Fecha de celebración: 29/06/2010
Fecha de finalización: 02/07/2010
C. Barrientos; V. M. Rayón; P. Redondo; A. Largo.

30 Título del trabajo: Structure and stability of neutral cyanide complexes of iron
Nombre del congreso: 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications ESPA2010. Internacional.

Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Oviedo, España
Fecha de celebración: 29/06/2010
Fecha de finalización: 02/07/2010
A. Largo; V. M. Rayón; P. Redondo; C. Barrientos.

31 Título del trabajo: Complejos de Ti(IV) con Ligandos CN-: Un Estudio Teórico
Nombre del congreso: XXXV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina-QUITEL09. Internacional

Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: San Andrés, Colombia
Fecha de celebración: 18/09/2009
Fecha de finalización: 22/09/2009
P. Redondo; V.M. Rayón; C. Barrientos; A. Largo.

32 Título del trabajo: Estructura y propiedades de FeCn, FeCn⁺ y FeCn⁻ (n = 1-8)
Nombre del congreso: XXXV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina-QUITEL09. Internacional

Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: San Andrés, Colombia
Fecha de celebración: 18/09/2009
Fecha de finalización: 22/09/2009
L. Largo; C. Barrientos; P. Redondo.

33 Título del trabajo: Estudio Teórico de Reacciones Ion-Molécula de Posible Relevancia en la Síntesis Interestelar de Glicina

Nombre del congreso: XXXV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina-QUITEL09. Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: San Andrés, Colombia
Fecha de celebración: 18/09/2009
Fecha de finalización: 22/09/2009
A. Largo; P. Redondo; L. Largo; V.M. Rayón; C. Barrientos.

34 Título del trabajo: Estudio termodinámico y cinético de la reacción entre fluorometano y el monocatión calcio

Nombre del congreso: XXXV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina-QUITEL09. Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: San Andrés, Colombia

Fecha de celebración: 18/09/2009

Fecha de finalización: 22/09/2009

A. Varela-Álvarez; V.M. Rayón; P. Redondo; C. Barrientos; J.A. Sordo.

35 Título del trabajo: Some Ion-Molecule Reactions Related to the Interstellar Formation of Glycine

Nombre del congreso: "13th ICQC". Internacional

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Helsinki, Finlandia

Fecha de celebración: 22/06/2009

Fecha de finalización: 26/06/2009

P. Redondo; L. Largo; V.M. Rayón; C. Barrientos; A. Largo. 06/2009.

36 Título del trabajo: Theoretical study of Neutral $Ti[CN]_n$ complexes

Nombre del congreso: "13th ICQC". Internacional

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Helsinki, Finlandia

Fecha de celebración: 22/06/2009

Fecha de finalización: 26/06/2009

C. Barrientos; V.M. Rayón; P. Redondo; H. Valdés; A. Largo. 06/2009.

37 Título del trabajo: Computational study of the reactivity of metal cations with methyl fluoride

Nombre del congreso: WATOC 2008. Eighth triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists. Internacional

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Sydney, Australia

Fecha de celebración: 14/09/2008

Fecha de finalización: 19/09/2008

C. Barrientos; A. Varela; V.M. Rayón; P. Redondo; L. Largo; A. Cimas; J.A. Sordo. 09/2008.

38 Título del trabajo: Cyanide vs. isocyanide competition in transition metal complexes

Nombre del congreso: WATOC 2008. Eighth triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists. Internacional

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

Ciudad de celebración: Sydney,

Fecha de celebración: 14/09/2008

Fecha de finalización: 19/09/2008

A. Largo; V.M. Rayón; H. Valdés; P. Redondo; C. Barrientos. 09/2008.

39 Título del trabajo: Small carbon clusters doped with first-row transition metals: structures and stabilities

Nombre del congreso: WATOC 2008. Eighth triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists. Internacional

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Sydney, Australia

Fecha de celebración: 14/09/2008

Fecha de finalización: 19/09/2008



P. Redondo; C. Barrientos; L. Largo; A. Largo. 09/2008.

- 40** **Título del trabajo:** A possible ion-molecule reaction leading to precursor of glycine in the interstellar medium
Nombre del congreso: 6th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications: ESPA2008. Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 02/09/2008
Fecha de finalización: 05/09/2008
L. Largo; P. Redondo; V.M. Rayón; C. Barrientos; A. Largo. 09/2008.
- 41** **Título del trabajo:** Gas-phase reactivity of bare metal cations with CH₃F: the importance of formation of intermediates in chemical reactivity
Nombre del congreso: 6th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications: ESPA2008. Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 02/09/2008
Fecha de finalización: 05/09/2008
C. Barrientos; A. Varela; V.M. Rayón; P. Redondo; L. Largo; A. Cimas; J.A. Sordo. 09/2008.
- 42** **Título del trabajo:** Stability trends on small first-row transition metal carbides TMC_n (n = 1-8)
Nombre del congreso: 6th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications: ESPA2008. Internacional
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 02/09/2008
Fecha de finalización: 05/09/2008
P. Redondo; C. Barrientos; L. Largo; A. Largo. 09/2008.
- 43** **Título del trabajo:** Transition metal cyanide complexes: an ab initio study on the cyanide-isocyanide competition
Nombre del congreso: 6th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications: ESPA2008. Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 02/09/2008
Fecha de finalización: 05/09/2008
V.M. Rayón; P. Redondo; H. Valdés; C. Barrientos; A. Largo. 09/2008.
- 44** **Título del trabajo:** Complejos de metales de transición con el ion cianuro: un análisis de la competencia cianuro isocianuro
Nombre del congreso: "CHITEL 08". Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote **Intervención por:** Por invitación
Ciudad de celebración: Cetraro, Italia
Fecha de celebración: 03/07/2008
Fecha de finalización: 08/07/2008



A. Largo; V.M. Rayón; H. Valdés; P. Redondo; C. Barrientos. 07/2008.

45 Título del trabajo: A systematic study of cyanides and isocyanides of first-row transition metals

Nombre del congreso: "ICCMSE 2007". Internacional

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Corfu, Grecia

Fecha de celebración: 25/09/2007

Fecha de finalización: 30/09/2007

P. Redondo; V.M. Rayón; H. Valdés; C. Barrientos; A. Largo. 09/2007.

46 Título del trabajo: Complexes of Fe+2 with CN- ligands: A theoretical Study of cyanide vs. isocyanide competition

Nombre del congreso: "ICCMSE 2007". Internacional

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Corfu, Grecia

Fecha de celebración: 25/09/2007

Fecha de finalización: 30/09/2007

V.M. Rayón; H. Valdés; P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2007.

47 Título del trabajo: Theoretical study of the reaction between NH₂⁺ and CH₃COOH

Nombre del congreso: "ICCMSE 2007". Internacional

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Corfu, Grecia

Fecha de celebración: 25/09/2007

Fecha de finalización: 30/09/2007

L. Largo; P. Redondo; C. Barrientos; V. M. Rayón; A. Largo. 09/2007.

48 Título del trabajo: Complejos de Fe+2 con ligandos CN-: Estudio teórico de la competencia entre la formación de cianuros e isocianuros

Nombre del congreso: "XXXIII QUITEL". Internacional

Ciudad de celebración: La Habana, Cuba

Fecha de celebración: 09/2007

V.M. Rayón; H. Valdés; P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2007.

49 Título del trabajo: Estructura molecular, enlace y barreras de isomerización de cianuros e isocianuros de metales de transición

Nombre del congreso: "XXXIII QUITEL". Internacional

Ciudad de celebración: La Habana, Cuba

Fecha de celebración: 09/2007

A. Largo; P. Redondo; V.M. Rayón; H. Valdés; C. Barrientos. 09/2007.

50 Título del trabajo: Estudio comparativo de la estructura y estabilidad en pequeños clusters de carbono monosustituidos por V y Co

Nombre del congreso: "XXXIII QUITEL". Internacional

Ciudad de celebración: La Habana, Cuba

Fecha de celebración: 09/2007

P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2007.



- 51 Título del trabajo:** Estudio teórico de la reacción entre el catión NH_2^+ y el ácido acético
Nombre del congreso: “XXXIII QUITEL”. Internacional
Ciudad de celebración: La Habana, Cuba
Fecha de celebración: 09/2007
L. Largo; P. Redondo; C. Barrientos; V.M. Rayón; A. Largo. 09/2007.
- 52 Título del trabajo:** Cyanides and isocyanides of first-row transition metals: molecular structure, bonding and isomerization barriers
Nombre del congreso: “Molecular Quantum Mechanics Conference - Analytic Gradients and Beyond”. Internacional
Ciudad de celebración: Budapest, Hungría
Fecha de celebración: 06/2007
V.M. Rayón; P. Redondo; H. Valdés; C. Barrientos; A. Largo. 06/2007.
- 53 Título del trabajo:** Molecular structure and stability of the first-row transition metal cyanides and isocyanides
Nombre del congreso: “Molecules in Space & Laboratory”. Internacional
Ciudad de celebración: París, Francia
Fecha de celebración: 05/2007
P. Redondo; V.M. Rayón; H. Valdés; C. Barrientos; A. Largo. 05/2007.
- 54 Título del trabajo:** Molecular structure and reactivity of small carbon radicals
Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2006)
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela,
Fecha de celebración: 07/2006
A. Largo; C. Barrientos. 2021.
- 55 Título del trabajo:** Structure and bonding in first-row transition metal dicarbide cations
Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2006)
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 07/2006
C. Barrientos; V.M. Rayón; P. Redondo; A. Largo. 07/2006.
- 56 Título del trabajo:** Structure and stabilities of XC_2^+ and X_2C_4^+ ($\text{X}=\text{Ti}, \text{V}$) ions: A theoretical study
Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2006)
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 07/2006
P. Redondo; V.M. Rayón; C. Barrientos; A. Largo. 07/2006.
- 57 Título del trabajo:** Structure and stability of TiC_n ($n=2-8$) clusters
Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2006)
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 07/2006
L. Largo; A. Cimas; P. Redondo; V.M. Rayón; C. Barrientos; A. Largo. 07/2006.
- 58 Título del trabajo:** The reaction of ground-state nitrogen atoms with bromomethyl radicals
Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2006)
Ámbito geográfico: Internacional no UE



Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha de celebración: 07/2006

A. Cimas; M. Aschii; C. Barrientos; V.M. Rayón; J. A. Sordo; A. Largo. 07/2006.

- 59 Título del trabajo:** Estudio teórico de la estructura y propiedades electrónicas de clusters lineales VC_n (n=1-8)
Nombre del congreso: "XXXI QUITEL". Internacional
Ciudad de celebración: Isla Margarita, Venezuela
Fecha de celebración: 10/2005
P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 10/2005.
- 60 Título del trabajo:** Molecular structure and bonding in first-row transition metal dicarbides
Nombre del congreso: "28th International Symposium on Free Radicals". Internacional
Ciudad de celebración: Leysin, Suiza
Fecha de celebración: 09/2005
V.M. Rayón; P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2005.
- 61 Título del trabajo:** Radical-radical reactions involving very high internal energies: a computational study of N(2D)+CH₂F
Nombre del congreso: "28th International Symposium on Free Radicals". Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Leysin, Suiza
Fecha de celebración: 09/2005
A. Cimas; V.M. Rayón; M. Aschii; J. A. Sordo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2005.
- 62 Título del trabajo:** Estudio teórico de la competencia entre isómeros cíclicos y lineales en compuestos XC₂ (X=Na-Cl)
Nombre del congreso: "XXX QUITEL". Internacional
Ciudad de celebración: Oporto, Portugal
Fecha de celebración: 09/2004
P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2004.
- 63 Título del trabajo:** On the competition between cyclic and linear isomers in second-row dicarbides
Nombre del congreso: "ESPA-2004". Internacional
Ciudad de celebración: Valladolid, España
Fecha de celebración: 09/2004
A. Largo; P. Redondo; C. Barrientos. 09/2004.
- 64 Título del trabajo:** Small carbon clusters doped with early transition metals: a theoretical study of ScC_n (n=1-8) compounds
Nombre del congreso: "ESPA-2004". Internacional
Ciudad de celebración: Valladolid, España
Fecha de celebración: 09/2004
P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2004.
- 65 Título del trabajo:** Structure and properties of open-chain and monocyclic calcium-doped carbon clusters CaC_n, CaC_n⁺, and CaC_n⁻ (n=1-8)
Nombre del congreso: "ESPA-2004". Internacional
Ciudad de celebración: Valladolid, España



Fecha de celebración: 09/2004

C. Barrientos; P. Redondo; A. Largo. 09/2004.

66 Título del trabajo: Theoretical investigation of the $N(4S, 2D) + CH_2X$ ($X=Cl, Br$) reactions: a comparative ab initio and DFT study

Nombre del congreso: "ESPA-2004". Internacional

Ciudad de celebración: Valladolid, España

Fecha de celebración: 09/2004

A. Cimas; V. M. Rayón; J. A. Sordo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2004.

67 Título del trabajo: Theoretical study on the kinetics of the $N(4S)+CH_2F$ reaction

Nombre del congreso: "ESPA-2004". Internacional

Ciudad de celebración: Valladolid, España

Fecha de celebración: 09/2004

A. Cimas; M. Aschii; C. Barrientos; V. M. Rayón; J. A. Sordo; A. Largo. 09/2004.

68 Título del trabajo: "Compuestos binarios policarbonados de Calcio: un estudio teórico"

Nombre del congreso: "29ème Congrès International des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine". Internacional

Ciudad de celebración: Marrakech, Marruecos

Fecha de celebración: 09/2003

P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2003.

69 Título del trabajo: "Theoretical studies of small carbon clusters doped with alkaline and alkaline-earth elements"

Nombre del congreso: "XIth International Congress of Quantum Chemistry 2003". Internacional

Ciudad de celebración: Bonn, Alemania

Fecha de celebración: 07/2003

P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 07/2003.

70 Título del trabajo: Estudio teórico de moléculas de interés en Astrofísica: Compuestos binarios policarbonados

Nombre del congreso: Primer Congreso Nacional de Astrofísica Molecular

Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote **Intervención por:** Por invitación

Ciudad de celebración: Ciudad Real,

Fecha de celebración: 07/2003

A. Largo; C. Barrientos; P. Redondo; A. Cimas. 07/2003.

71 Título del trabajo: Structure and synthesis of small heteroatom-doped carbon clusters. A theoretical study

Nombre del congreso: XIX Reunión de la Xarxa de Química Teórica.

Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote

Ciudad de celebración: Gerona,

Fecha de celebración: 07/2003

A. Largo; C. Barrientos; P. Redondo; A. Cimas. 07/2003.

72 Título del trabajo: "DFT study of small Magnesium-doped carbon clusters"

Nombre del congreso: "ESPA2002. Electronic Structure: Principles and Applications". Internacional

Ciudad de celebración: Sevilla, España

Fecha de celebración: 09/2002

P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2002.



- 73 Título del trabajo:** "Theoretical study of AlC_n , AlC_n^+ and AlC_n^- ($n=1-7$) clusters. Open-chain and monocyclic structures"
Nombre del congreso: "Fourth European Conference on Computational Chemistry (EUCCO-CC4)". Internacional
Ciudad de celebración: Assisi, Italia
Fecha de celebración: 09/2002
P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2002.
- 74 Título del trabajo:** "Theoretical study of the reaction of HCl with $C_3H_2^+$: A possible source of carbon-chlorine compounds in space"
Nombre del congreso: "ESPA2002. Electronic Structure: Principles and Applications". Internacional
Ciudad de celebración: Sevilla, España
Fecha de celebración: 09/2002
P. Redondo; J.R. Redondo; A. Largo. 09/2002.
- 75 Título del trabajo:** "Ionization and protonation of NaC_3 : a theoretical study"
Nombre del congreso: "6th World Congress of Theoretically Oriented Chemists (WATOC02)". Internacional
Ciudad de celebración: Lugano, Suiza
Fecha de celebración: 08/2002
P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 08/2002.
- 76 Título del trabajo:** "Etapas prohibidas por el espín en procesos globalmente permitidos por el espín. Aplicaciones en Química Interestelar"
Nombre del congreso: "27ème Congrès des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine". Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote **Intervención por:** Por invitación
Ciudad de celebración: Toulouse, Francia
Fecha de celebración: 09/2001
A. Largo; M. Aschi; C. Barrientos; P. Redondo. 09/2001.
- 77 Título del trabajo:** "Procesos ion-molécula para la formación de compuestos cloro-carbonados"
Nombre del congreso: "27ème Congrès des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine". Internacional
Ciudad de celebración: Toulouse, Francia
Fecha de celebración: 09/2001
J.R. Redondo; P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2001.
- 78 Título del trabajo:** "The role of spin-forbidden steps in globally spin-allowed processes. The $S^+ + C_2H_2$ reaction as a test case"
Nombre del congreso: "Electronic Structure and Chemical Reactivity. An International Symposium in Honor of Prof. Juan Bertran". Internacional
Ciudad de celebración: Bellaterra, España
Fecha de celebración: 09/2001
A. Largo; M. Aschi; C. Barrientos; P. Redondo. 09/2001.
- 79 Título del trabajo:** Estudio comparativo ab initio y DFT de la reacción $N(4S) + CH_2F$ "
Nombre del congreso: "27ème Congrès des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine". Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote **Intervención por:** Por invitación



Ciudad de celebración: Toulouse, Francia

Fecha de celebración: 09/2001

A. Cimas; C. Barrientos; A. Largo; B. Menéndez; J. A. Sordo. 09/2001.

80 Título del trabajo: "Theoretical study of C_nCl , C_nCl^+ , C_nCl^- ($n=1-7$) Clusters"

Nombre del congreso: "Electronic Structure: Prediction and Applications"

Ciudad de celebración: San Sebastián, España

Fecha de celebración: 10/2000

A. Cimas; P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 10/2000.

81 Título del trabajo: "Theoretical study of MgC_3 and its cationic and protonated derivatives"

Nombre del congreso: "Electronic Structure: Prediction and Applications". Internacional

Ciudad de celebración: San Sebastián, España

Fecha de celebración: 10/2000

P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 10/2000.

82 Título del trabajo: "Theoretical study of C_nCl , C_nCl^+ , C_nCl^- ($n=1-7$) Clusters"

Nombre del congreso: "Third European Conference on Computational Chemistry, EUCCO-CC3". Internacional

Ciudad de celebración: Budapest, Hungría

Fecha de celebración: 09/2000

A. Cimas; P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2000.

83 Título del trabajo: "Experiencias del laboratorio de Química con apoyo audiovisual e informático"

Nombre del congreso: "III Congreso Internacional de Formación y Medios Audiovisuales". Internacional

Ciudad de celebración: Valladolid, España

Fecha de celebración: 07/2000

M.J. Insausti; P. Redondo; E. Charro. 07/2000.

84 Título del trabajo: "Theoretical study of Aluminum-Carbon compounds: structure and synthesis of AlC_3 "

Nombre del congreso: "Xth International Congress of Quantum Chemistry". Internacional

Ciudad de celebración: Menton, Francia

Fecha de celebración: 06/2000

F. García; P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 06/2000.

85 Título del trabajo: "Estudio teórico de la reacción $S^+ + C_3H_2$ "

Nombre del congreso: "XXV Congreso Internazionale dei Chimici Teorici di Espressione Latina"

Ciudad de celebración: Nápoles, Italia

Fecha de celebración: 09/1999

P. Redondo; E. Calleja; C. Barrientos; A. Largo. 09/1999.

86 Título del trabajo: "Procesos ion-molécula en la formación de cianopoliacetilenos: estudio teórico de la reacción $C_2H_2^+ + CN$ "

Nombre del congreso: "XXV Congreso Internazionale dei Chimici Teorici di Espressione Latina". Internacional

Ciudad de celebración: Napoles, Italia

Fecha de celebración: 09/1999

P. Redondo; R. Boronat; C. Barrientos; A. Largo. 1999.



- 87** **Título del trabajo:** "Theoretical studies of interstellar molecules: structure and synthesis"
Nombre del congreso: "Workshop on Computational Chemistry". Internacional
Ciudad de celebración: Miraflores de la Sierra, España
Fecha de celebración: 06/1998
C. Barrientos; P. Redondo; A. Largo. 06/1998.
- 88** **Título del trabajo:** "Theoretical studies of possible processes for the interstellar production of silicon-carbon compounds"
Nombre del congreso: "Second European Conference on Computational Chemistry". Internacional
Ciudad de celebración: Lisboa, Portugal
Fecha de celebración: 1997
P. Redondo; A. Sagüillo; C. Barrientos; A. Largo. 1997.
- 89** **Título del trabajo:** Síntesis de compuestos clorocarbonados en el medio interestelar"
Nombre del congreso: "XXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina". Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Cáceres, España
Fecha de celebración: 09/1996
V. M. Rayón; C. Barrientos; A. Largo. 1999.
- 90** **Título del trabajo:** Theoretical study of the C2P radical
Nombre del congreso: 22nd International Symposium on Free Radicals. Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Doorwerth, Holanda
Fecha de celebración: 09/1993
A. Largo; C. Barrientos; X. López; J.M. Ugalde. 09/1993.
- 91** **Título del trabajo:** "Reactions of CH₃⁺ with free second-row atoms: an ab initio study
Nombre del congreso: IAU Colloquium146: Molecular Opacities in the Stellar Environment
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Copenhagen, Dinamarca
Fecha de celebración: 1993
J. R. Flores; A. Largo; C. Barrientos.
- 92** **Título del trabajo:** "Theoretical study of the C2P radical"
Nombre del congreso: 22nd International Symposium on Free Radicals
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Doorwerth, Holanda
Fecha de celebración: 1993
A. Largo; C. Barrientos; X. López; J. M. Ugalde.
- 93** **Título del trabajo:** "Relativistic Quantum Defect Orbital study of electron transitions in highly ionized atomic systems
Nombre del congreso: Sanibel Symposia
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Gainesville, Florida, Estados Unidos de América
Fecha de celebración: 1992

I. Martín; C. Lavín; C. Barrientos.

- 94** **Título del trabajo:** Relativistic Quantum defect calculations of transition probabilities from excited levels"
Nombre del congreso: 7th International Congress of Quantum Chemistry
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Menton, Francia
Fecha de celebración: 1991
C. Lavín; C. Barrientos; I. Martín.
- 95** **Título del trabajo:** "A basic process of interstellar chemistry: $C^+ + HCl \rightarrow CCl^+ + H$
Nombre del congreso: 7th International Congress of Quantum Chemistry
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Menton, Francia
Fecha de celebración: 1991
A. Largo; C. Barrientos; F. Pauzat; Ellinger.
- 96** **Título del trabajo:** "Systematic trends of oscillator strengths for $\Delta n=0$ transitions in the Cu isoelectronic sequence
Nombre del congreso: 7th International Congress of Quantum Chemistry
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Menton, Francia
Fecha de celebración: 1991
C. Barrientos; C. Lavín; I. Martín.
- 97** **Título del trabajo:** "Theoretical studies of the interstellar chemistry of sulfur compounds. The C₂S radical.
Nombre del congreso: 7th International Congress of Quantum Chemistry
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Menton, Francia
Fecha de celebración: 1991
A. Largo; C. Barrientos.
- 98** **Título del trabajo:** " Estudio teórico de transiciones electrónicas en átomos con dos electrones de valencia"
Nombre del congreso: XII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 1989
I. Martín; C. Barrientos.
- 99** **Título del trabajo:** "Regularities in transitions involving levels of the principal spectral series of Potassium-like systems"
Nombre del congreso: Third European Conference on Atomic and Molecular Physics
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Burdeos, Francia
Fecha de celebración: 1989
C. Lavín; C. Barrientos; I. Martín.



- 100 Título del trabajo:** Influencia de la polarización del core atómico por el electrón activo en las transiciones electrónicas"
Nombre del congreso: XII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 1989
C. Lavín; I. Martín; C. Barrientos.
- 101 Título del trabajo:** Systematic trends of oscillator strengths involving subordinate series"
Nombre del congreso: Third European Conference on Atomic and Molecular Physics
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Burdeos, Francia
Fecha de celebración: 1989
C. Barrientos; I. Martín.
- 102 Título del trabajo:** An ab initio study of the formation processes of C₂N⁺ and SiCN⁺"
Nombre del congreso: NATO Advanced Study Institute on New Theoretical Concepts for Understanding Organic Reactions
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: San Feliú de Guixols, España
Fecha de celebración: 1988
C. Barrientos; A. Largo.
- 103 Título del trabajo:** Regularities in transition probabilities from excited states: sharp series in the Potassium isoelectronic sequence"
Nombre del congreso: Workshop on Quantum Chemistry
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Girona, España
Fecha de celebración: 1988
C. Lavín; I. Martín; C. Barrientos.
- 104 Título del trabajo:** Trends of oscillator strengths in the lithium isoelectronic sequence"
Nombre del congreso: Sixth International Congress on Quantum Chemistry
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Jerusalem, Israel
Fecha de celebración: 1988
C. Barrientos; I. Martín; I. Charro.
- 105 Título del trabajo:** "Fractal Orbitals"
Nombre del congreso: 20th Quantum Theory Conference
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote **Intervención por:** Por invitación
Ciudad de celebración: Edimburgo, Reino Unido
Fecha de celebración: 1987



C. Barrientos; L. L. Boyle.

- 106 Título del trabajo:** Fuerzas de oscilador para Mg y su serie isoelectrónica"
Nombre del congreso: XVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Peñíscola, España
Fecha de celebración: 1987
I. Martín; I. Gútiez; C. Barrientos.
- 107 Título del trabajo:** Tendencias sistemáticas en series isoelectrónicas. Cálculos relativos a la serie del potasio"
Nombre del congreso: XVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Peñíscola, España
Fecha de celebración: 1987
C. Lavín; I. Martín; C. Barrientos.
- 108 Título del trabajo:** Transiciones electrónicas desde estados excitados. Regularidades en átomos análogos"
Nombre del congreso: XVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Peñíscola, España
Fecha de celebración: 1987
C. Barrientos; I. Martín.
- 109 Título del trabajo:** "Aplicación de los orbitales de Defecto Cuántico al estudio teórico del espectro de absorción de los elementos alcalinotérreos"
Nombre del congreso: XVIe Congrès des Chimistes theoriciciens d'expression Latine
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Lyon, Francia
Fecha de celebración: 1986
C. Barrientos; I. Martín.
- 110 Título del trabajo:** "Efectos de la polarización del core atómico en las transiciones electrónicas: fuerzas de oscilador de la serie isoelectrónica del sodio"
Nombre del congreso: XVIe Congrès des Chimistes theoriciciens d'expression Latine
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Lyon, Francia
Fecha de celebración: 1986
C. Barrientos; I. Martín; J. Mazón.



Otras actividades de divulgación

Título del trabajo: Colaboración en Revista de divulgación científica

Nombre del evento: ALKAID

Intervención por: Por invitación

Fecha de celebración: 2008

"Química Interestelar". 1, pp. 16 - 21. (España): Alkaid Ediciones, ISSN 1888-8860

Gestión de I+D+i y participación en comités científicos

Organización de actividades de I+D+i

Título de la actividad: International Conference on Electronic Structure : Principles and Applications (ESPA-2004)

Tipo de actividad: Organización de Congreso

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Ciudad entidad convocante: Valladolid, España

Modo de participación: Organizador

Fecha de inicio-fin: 15/09/2004 - 17/09/2004

Gestión de I+D+i

- Nombre de la actividad:** IP del Proyecto: Procesos ion-molécula en fase gas: síntesis interestelar de biomoléculas y reactividad de derivados halocarbonados

Tipología de la gestión: Gestión de acciones y proyectos de I+D+i

Funciones desempeñadas: Investigadora Principal, Gestora y Coordinadora del Proyecto total

Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

Fecha de inicio: 03/09/2013 **Duración:** 3 años

Promedio presupuesto anual: 10 **Nº de personas:** 7

Ámbito geográfico: Autonómica
- Nombre de la actividad:** IP del Proyecto: Estudio mecano-cuántico y cinético de sistemas y procesos ion-molécula de

Tipología de la gestión: Gestión de acciones y proyectos de I+D+i

Funciones desempeñadas: Investigadora Principal, Gestora y Coordinadora del Proyecto total

Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

Fecha de inicio: 01/01/2011 **Duración:** 3 años - 6 meses

Promedio presupuesto anual: 25
- Nombre de la actividad:** IP del Proyecto: Reacciones ion-molécula en fase gas. Implicaciones en Química sintética y

Tipología de la gestión: Gestión de acciones y proyectos de I+D+i

Funciones desempeñadas: Investigadora Principal, Gestora y Coordinadora del Proyecto total

Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

Fecha de inicio: 01/01/2009 **Duración:** 3 años

Promedio presupuesto anual: 15



- 4** **Nombre de la actividad:** IP del Proyecto: Reactividad en fase gas de cationes metálicos con CH₃X (X=H,F,Cl). La
Tipología de la gestión: Gestión de acciones y proyectos de I+D+I
Funciones desempeñadas: Investigadora Principal, Gestora y Coordinadora del Proyecto
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio: 13/12/2007 **Duración:** 3 años
Promedio presupuesto anual: 25
- 5** **Nombre de la actividad:** IP del Proyecto: Estudio de la estructura y síntesis de compuestos de interés en química
Tipología de la gestión: Gestión de acciones y proyectos de I+D+I
Funciones desempeñadas: Investigadora Principal, Gestora y Coordinadora del Proyecto total
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio: 01/01/2006 **Duración:** 3 años
Promedio presupuesto anual: 5
- 6** **Nombre de la actividad:** IP del Proyecto: Estructura y procesos de síntesis de compuestos policarbonados: estudio teórico (VA085/03)
Tipología de la gestión: Gestión de acciones y proyectos de I+D+I
Funciones desempeñadas: Investigadora Principal, Gestora y Coordinadora del Proyecto total
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio: 01/01/2003 **Duración:** 3 años
Promedio presupuesto anual: 15

Evaluación y revisión de proyectos y artículos de I+D+i

- 1** **Funciones desempeñadas:** Evaluador de Proyectos de Investigación
Entidad de realización: Ministerio de Educación y Ciencia (Ministerio de Ciencia y Tecnología, etc.)
Ciudad entidad realización: España
Fecha de inicio: 2010
- 2** **Funciones desempeñadas:** Evaluador de Proyectos de Investigación
Entidad de realización: Ministerio de Educación y Ciencia (Ministerio de Ciencia y Tecnología, etc.)
Ciudad entidad realización: España
Fecha de inicio: 2009
- 3** **Funciones desempeñadas:** Evaluador de Proyectos de Investigación
Entidad de realización: Ministerio de Educación y Ciencia (Ministerio de Ciencia y Tecnología, etc.)
Ciudad entidad realización: España
Fecha de inicio: 2008
- 4** **Funciones desempeñadas:** Evaluador de Proyectos de Investigación
Entidad de realización: Ministerio de Educación y Ciencia (Ministerio de Ciencia y Tecnología, etc.)
Ciudad entidad realización: España
Fecha de inicio: 1997



Otros méritos

Estancias en centros de I+D+i públicos o privados

- 1** **Entidad de realización:** Università di L'Aquila **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Dipartimento di Chimica e Materiali
Ciudad entidad realización: L'Aquila, Italia
Fecha de inicio-fin: 26/03/2005 - 31/03/2005 **Duración:** 6 días
Objetivos de la estancia: Invitado/a
Tareas contrastables: Acción Integrada Hispano-Italiana HI2002-0025
- 2** **Entidad de realización:** Ecole Normale Superieure **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Laboratorio de Radioastronomía
Ciudad entidad realización: París, Francia
Fecha de inicio-fin: 11/07/1992 - 24/07/1992 **Duración:** 14 días
Objetivos de la estancia: Invitado/a
Tareas contrastables: Acción Integrada Hispano-Francesa HF-304
- 3** **Entidad de realización:** Ecole Normale Superieure **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Laboratorio de Radioastronomía
Ciudad entidad realización: París, Francia
Fecha de inicio-fin: 10/12/1990 - 20/12/1990 **Duración:** 13 días
Objetivos de la estancia: Invitado/a
Tareas contrastables: Acción Integrada Hispano-Francesa HF-316
- 4** **Entidad de realización:** Ecole Normale Superieure **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Laboratorio de Radioastronomía
Ciudad entidad realización: París, Francia
Fecha de inicio-fin: 15/07/1990 - 30/07/1990 **Duración:** 15 días
Objetivos de la estancia: Invitado/a
Tareas contrastables: Acción Integrada Hispano-Francesa HF-236
- 5** **Entidad de realización:** University of Kent **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Canterbury, Reino Unido
Fecha de inicio-fin: 01/01/1987 - 31/12/1987 **Duración:** 1 año
Objetivos de la estancia: Posdoctoral

Ayudas y becas obtenidas

Nombre de la ayuda: Beca Postdoctoral del CSIC
Finalidad: Posdoctoral
Entidad concesionaria: Consejo Superior de Investigaciones Científicas **Tipo de entidad:** Agencia Estatal
Fecha de concesión: 01/01/1987 **Duración:** 1 año
Fecha de finalización: 31/12/1987
Entidad de realización: University of Kent, Canterbury (UK)



Premios, menciones y distinciones

Descripción: Premio Extraordinario de Doctorado
Entidad concesionaria: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad concesionaria: Valladolid, Castilla y León, España
Fecha de concesión: 01/09/1986

Períodos de actividad investigadora

- Nº de tramos reconocidos:** 5
Entidad acreditante: Comisión Nacional Evaluadora de la Actividad Investigadora
Fecha de obtención: 31/12/2014
- Nº de tramos reconocidos:** 4
Entidad acreditante: Comisión Nacional Evaluadora de la Actividad Investigadora
Fecha de obtención: 31/12/2008
- Nº de tramos reconocidos:** 3
Entidad acreditante: Comisión Nacional Evaluadora de la Actividad Investigadora
Fecha de obtención: 31/12/2002
- Nº de tramos reconocidos:** 2
Entidad acreditante: Comisión Nacional Evaluadora de la Actividad Investigadora
Fecha de obtención: 31/12/1996
- Nº de tramos reconocidos:** 1
Entidad acreditante: Comisión Nacional Evaluadora **Tipo de entidad:** Agencia Estatal de la Actividad Investigadora
Fecha de obtención: 31/12/1990

Acreditaciones/reconocimientos obtenidos

- Descripción:** Evaluación excelente Programa Docencia
Entidad acreditante: Universidad de Valladolid
Fecha del reconocimiento: 04/02/2013
- Descripción:** Evaluación positiva de seis tramos docentes (quinquenios)
Entidad acreditante: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha del reconocimiento: 2013



Resumen de otros méritos

- 1 Descripción del mérito:** Miembro de la Comisión de Reclamaciones de la Universidad de Valladolid
Entidad acreditante: Universidad de Valladolid **Tipo entidad:** Universidad
Fecha de concesión: 01/06/2016
- 2 Descripción del mérito:** Miembro del Claustro de la Universidad de Valladolid. Elegida en representación del colectivo de Profesores Titulares de Universidad.
Entidad acreditante: Universidad de Valladolid **Tipo entidad:** Universidad
Fecha de concesión: 01/10/2010
- 3 Descripción del mérito:** Secretaria del Departamento de Química Física. Universidad de Valladolid.
Entidad acreditante: Universidad de Valladolid **Tipo entidad:** Universidad
Fecha de concesión: 03/03/1997



Saturnino Ibeas Cortés

Generado desde: Editor CVN de FECYT

Fecha del documento: 10/10/2018

v 1.4.0

c1511beded5273dd2b7df2f3c12e4ce1

Este fichero electrónico (PDF) contiene incrustada la tecnología CVN (CVN-XML). La tecnología CVN de este fichero permite exportar e importar los datos curriculares desde y hacia cualquier base de datos compatible. Listado de Bases de Datos adaptadas disponible en <http://cvn.fecyt.es/>



Saturnino Ibeas Cortés

Apellidos: **Ibeas Cortés**
 Nombre: **Saturnino**
 DNI: **13127484G**
 Fecha de nacimiento: **14/08/1966**
 Sexo: **Hombre**
 Teléfono fijo: **947258820**
 Correo electrónico: **sibeas@ubu.es**

Situación profesional actual

Entidad empleadora: Universidad de Burgos
Departamento: QUÍMICA, Facultad de Ciencias
Categoría profesional: Titular de Universidad
Ciudad entidad empleadora: PLAZA MISSAEL BAÑUELOS Nº SN. 09001. BURGOS.,
Teléfono: 947258820 **Correo electrónico:** sibeas@ubu.es
Fecha de inicio: 07/05/2003
Modalidad de contrato: Plantilla **Régimen de dedicación:** Tiempo completo
Primaria (Cód. Unesco): 221002 - Equilibrio químico y de fase; 221003 - Cinética química; 221010 - Reacciones rápidas y explosivos

Cargos y actividades desempeñados con anterioridad

	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
1	Universidad de Burgos	PTUN interino	01/10/2000
2	Universidad de Burgos	Pras tipo 3 TC	01/10/1998
3	Universidad de Burgos	Ayudante	01/10/1994
4	Universidad de Valladolid	Ayudante	27/10/1993
5	Universidad de Valladolid	Ayudante de escuela universitaria	09/03/1992

1 Entidad empleadora: Universidad de Burgos
Categoría profesional: PTUN interino
Fecha de inicio-fin: 01/10/2000 - 06/05/2003

2 Entidad empleadora: Universidad de Burgos
Categoría profesional: Pras tipo 3 TC
Fecha de inicio-fin: 01/10/1998 - 30/09/2000

3 Entidad empleadora: Universidad de Burgos
Categoría profesional: Ayudante
Fecha de inicio-fin: 01/10/1994 - 30/09/1998



- 4** Entidad empleadora: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Ayudante
Fecha de inicio-fin: 27/10/1993 - 30/09/1994

- 5** Entidad empleadora: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Ayudante de escuela universitaria
Fecha de inicio-fin: 09/03/1992 - 19/04/1992



Formación académica recibida

Titulación universitaria

Estudios de 1º y 2º ciclo, y antiguos ciclos (Licenciados, Diplomados, Ingenieros Superiores, Ingenieros Técnicos, Arquitectos)

Nombre del título: Licenciado en Ciencias Químicas

Entidad de titulación: Universidad de Valladolid

Fecha de titulación: 06/1989

Doctorados

Programa de doctorado: Doctor en química

Entidad de titulación: Universidad de Valladolid

Fecha de titulación: 25/03/1994

Conocimiento de idiomas

Idioma	Comprensión auditiva	Comprensión de lectura	Interacción oral	Expresión oral	Expresión escrita
Inglés		A1	A1	A1	A1

Actividad docente

Dirección de tesis doctorales y/o proyectos fin de carrera

- Título del trabajo:** Estudio termodinámico y cinético del complejo de Pd (II) con el ligando 2-Acetilpiridina-fenilhidrazona, $[Pd(CNN)P(OCH_3)_3]BF_4$

Tipo de proyecto: Tesis Doctoral

Codirector/a tesis: Begoña García Ruiz

Entidad de realización: Universidad de Burgos **Tipo de entidad:** Universidad

Alumno/a: MARIA SOLEDAD MUÑOZ CERDAN

Fecha de defensa: 18/12/2002
- Título del trabajo:** Physico-chemical properties of hydrophobic solid particle formulations: influence of the dispersant agent structure on suspension stability

Tipo de proyecto: Tesina

Entidad de realización: Universidad de Burgos **Tipo de entidad:** Universidad

Alumno/a: Cesar del Río Miguel

Fecha de defensa: 2002



- 3 Título del trabajo:** Estudio cinético y termodinámico de la interacción de ácidos ribonucleicos con agentes intercalantes
Tipo de proyecto: Trabajo conducente a obtención de DEA
Codirector/a tesis: Begoña García Ruiz
Entidad de realización: Universidad de Burgos **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Vittorio Paiotta
Fecha de defensa: 2002
- 4 Título del trabajo:** Mecanismo de la hidrólisis ácida del ligando 2-acetilpiridinafenilhidrazona
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Universidad de Burgos **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: María Soledad Muñoz
Fecha de defensa: 1998

Experiencia científica y tecnológica

Actividad científica o tecnológica

Proyectos de I+D+i financiados en convocatorias competitivas de Administraciones o entidades públicas y privadas

- 1 Nombre del proyecto:** Mecanismos de interacción entre complejos metálicos de Ru(II), Pt(II), Ir(III) y Rh(III) con proteínas y ácidos nucleicos, en ausencia y presencia de radiación UV-Vis
Ámbito geográfico: Nacional
Grado de contribución: Investigador/a
Entidad de realización: Universidad de Burgos **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Burgos, Castilla y León, España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): GARCIA RUIZ, BEGOÑA; LEAL VILLALBA, JOSE MARIA
Nº de investigadores/as: 7
Entidad/es financiadora/s:
Ministerio de Economía y Competitividad **Tipo de entidad:** Agencia Estatal
Fecha de inicio-fin: 01/01/2015 - 31/08/2018
Cuantía total: 66.550 €
- 2 Nombre del proyecto:** Interacción de ADN y proteínas con Clústeres Cuánticos Atómicos de plata y de cobre de distinta atomicidad y con complejos metalorgánicos de Ru(II), Ir(III) y Rh(III). Interés biológico.
Entidad de realización: Universidad de Burgos **Tipo de entidad:** Universidad
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): BEGOÑA GARCIA RUIZ
Nº de investigadores/as: 7
Entidad/es financiadora/s:
Junta de Castilla y León **Tipo de entidad:** Agencia Regional
Ciudad entidad financiadora: Valladolid, Castilla y León, España
Fecha de inicio-fin: 22/03/2016 - 30/06/2018
Cuantía total: 120.000 €



3 Nombre del proyecto: Interacción de ADN con complejos organometálicos de Ru(II) y Clústeres Cuánticos Atómicos (AQC's)

Entidad de realización: Universidad de Burgos **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: Burgos, Castilla y León, España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Begoña García Ruiz; Manuel Arturo López Quintela; Jose María Leal Villalba; Fernando Dominguez Puente

Nº de investigadores/as: 10

Entidad/es financiadora/s:

Obra Social Fundación la Caixa

Tipo de entidad: Fundación

Ciudad entidad financiadora: Barcelona, Cataluña, España

Cód. según financiadora: OSLC-2012-007

Fecha de inicio-fin: 01/01/2013 - 31/12/2016

Entidad/es participante/s: Universidad de Burgos; Universidad de Santiago de Compostela

Cuantía total: 807.875 €

4 Nombre del proyecto: Síntesis de complejos de Ru(II) con bases de Schiff y Terpiridinas. Interacción con ácidos nucleicos (ADN y ARN) en doble, triple y cuádruple hélice.

Entidad de realización: Universidad de Burgos **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Begoña García Ruiz

Nº de investigadores/as: 7

Entidad/es financiadora/s:

Junta de Castilla y León. (BU299A12-1)

Tipo de entidad: Agencia regional

Fecha de inicio-fin: 01/01/2012 - 31/12/2014

Duración: 2 años - 8 meses - 29 días

Cuantía total: 30.000 €

5 Nombre del proyecto: Aspectos químico-físicos y biológicos de las interacciones de ADN levógiro (Z-ADN) y dextrógiro (B-ADN) con drogas intercalantes y complejos metálicos. Reacciones de intercalación

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Begoña García Ruiz

Nº de investigadores/as: 5

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio CTQ2009-13051

Fecha de inicio: 01/01/2010

Duración: 2 años - 11 meses - 30 días

6 Nombre del proyecto: Interacción de complejos metalísticos de trans-platino (ii) y oro (i) con polinucleótidos y ácidos nucleicos.

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Begoña García Ruiz

Nº de investigadores/as: 7

Entidad/es financiadora/s:

Junta de Castilla y León (GR257)

Fecha de inicio: 01/01/2009

Duración: 2 años - 11 meses - 30 días

7 Nombre del proyecto: Propiedades químico físicas de la interacción de ADN con ligandos intercalantes y complejos metálicos. Reactividad y citotoxicidad.

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José M. Leal Villalba

Nº de investigadores/as: 8

Entidad/es financiadora/s:

Junta de Castilla y León (2009/00058/001)

Fecha de inicio: 01/01/2009

Duración: 2 años - 11 meses - 30 días



- 8** **Nombre del proyecto:** Correlaciones Estructura-Reactividad en la Interacción de ADN con Drogas Intercalantes y no Intercalantes.
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José M. Leal Villalba
Nº de investigadores/as: 7
Entidad/es financiadora/s:
Junta de Castilla y Leon. BU-001A-006
Fecha de inicio: 2006 **Duración:** 3 años
Entidad/es participante/s: CONSEJERIA DE INTERIOR Y JUSTICIA; Junta de Castilla y León
Cuantía total: 13.300 €
- 9** **Nombre del proyecto:** Correlaciones Estructura-Reactividad en la Interacción de ADN con Drogas Intercalantes y no Intercalantes.
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José M. Leal Villalba
Nº de investigadores/as: 7
Entidad/es financiadora/s:
CTQ2006-14734/BQU
Fecha de inicio: 2006 **Duración:** 3 años
Entidad/es participante/s: MINISTERIO DE CIENCIA Y TECNOLOGIA
Cuantía total: 85.000 €
- 10** **Nombre del proyecto:** Interacción de ácidos nucleicos con albúminas en presencia de intercalantes y polielectrolitos
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José M. Leal Villalba
Nº de investigadores/as: 5
Entidad/es financiadora/s:
MINISTERIO DE CIENCIA Y TECNOLOGIA
Fecha de inicio: 01/01/2002 **Duración:** 3 años - 5 meses
Cuantía total: 75.000 €
- 11** **Nombre del proyecto:** Interacción de ácidos nucleicos con albúminas en presencia de intercalantes y polielectrolitos
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José M. Leal Villalba
Nº de investigadores/as: 5
Entidad/es financiadora/s:
CONSEJERIA DE INTERIOR Y JUSTICIA
Junta de Castilla y León
Fecha de inicio: 01/01/2001 **Duración:** 3 años - 11 meses - 30 días
Cuantía total: 30.785 €
- 12** **Nombre del proyecto:** ESTUDIO DE COMPLEJOS DE PALADIO CON LIGANDO N DADORES
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Begoña García Ruiz
Entidad/es financiadora/s:
JUNTA DE CASTILLA Y LEON. BU16/99
Fecha de inicio: 1998 **Duración:** 3 años
- 13** **Nombre del proyecto:** REACTIVIDAD DE ANTIINFLAMATORIOS. INHIBICION DE PROCESOS DE HIDRÓLISIS EN MICROEMULSIONES
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Begoña García Ruiz
Nº de investigadores/as: 4

**Entidad/es financiadora/s:**

DGICYT PM 97-0153

Fecha de inicio: 1998**Duración:** 3 años**14 Nombre del proyecto:** INHIBICIÓN DE PROCESOS DE HIDRÓLISIS Y DE OXIDACIÓN EN MICROEMULSIÓN**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** JOSE MARIA LEAL VILLALBA**Entidad/es financiadora/s:**

DGICYT HA95-118 B(Acción integrada Hispano Alemana)

Fecha de inicio: 1995**15 Nombre del proyecto:** DESARROLLO DE TÉCNICAS DE FLUJO Y DE RELAJACIÓN PARA REACCIONES RÁPIDAS. APLICACIÓN A LA OXIDACIÓN DE LA VITAMINA C EN MICROEMULSIONES COMO DISOLVENTES**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** JOSE MARIA LEAL VILLALBA**Entidad/es financiadora/s:**

DGICYT (PB92/105.9)

Fecha de inicio: 1993**Duración:** 2 años**Contratos, convenios o proyectos de I+D+i no competitivos con Administraciones o entidades públicas o privadas****1 Nombre del proyecto:** ESTUDIO DEL COMPORTAMIENTO ÁCIDO-BASE DE COMPLEJOS DE LOS METALES DEL GRUPO DEL PLATINO CON LIGANDOS NITRÓGENO DADORES**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** BEGOÑA GARCIA RUIZ; GABRIEL GARCIA HERBOSA**Entidad/es financiadora/s:**

FUNDACION CAJA DE BURGOS

Fecha de inicio: 1995**Duración:** 1 año**2 Nombre del proyecto:** OXIDACIÓN DE SUBSTRATOS ORGÁNICOS POR COMPLEJOS INORGÁNICOS DE ESFERA EXTERNA**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** JOSE MARIA LEAL VILLALBA**Entidad/es financiadora/s:**

CAJA DE AHORROS MUNICIPAL DE BURGOS

Fecha de inicio: 1993**Duración:** 1 año**3 Nombre del proyecto:** PROPIEDADES ÁCIDO-BASE DE COMPLEJOS ORTOMETALA-DOS DE PALADIO**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** BEGOÑA GARCIA RUIZ; GABRIEL GARCIA HERBOSA**Entidad/es financiadora/s:**

CAJA DE AHORROS MUNICIPAL DE BURGOS

Fecha de inicio: 1992**Duración:** 2 años



Resultados

Propiedad industrial e intelectual

- 1 Título propiedad industrial registrada:** Sensor fluorogénico de humedad y de agua en disolventes orgánicos
Inventores/autores/obtenedores: Trigo López, Miriam; Vallejos Calzada, Saúl; Estévez Bolívar, Pedro Antonio; Ibeas Cortés, Saturnino; Muñoz Santamaría, María Asunción; García García, Félix Clemente; Serna Arena, Felipe; De La Peña Albillos, José Luis; García Pérez, José Miguel
Entidad titular de derechos: Universidad de Burgos
Nº de solicitud: P201201139
Fecha de registro: 16/11/2012
- 2 Título propiedad industrial registrada:** Monómeros vinílicos y membranas poliméricas densas como sensores fluorogénicos de cationes pesados y de moléculas biológicas.
Inventores/autores/obtenedores: FELIPE JOSE SERNA ARENAS; JOSE LUIS DE LA PEÑA ALBILLOS; JOSE MIGUEL GARCIA PEREZ; PEDRO ANTONIO ESTEVEZ BOLIVAR; HAMID EL KADUTIT; SAUL VALLEJOS CALZADA; MIRIAM TRIGO LÓPEZ; SATURNINO IBEAS CORTES; MARIA ASUNCION MUÑOZ SANTAMARIA; FELIX CLEMENTE GARCIA GARCIA
Entidad titular de derechos: Universidad de Burgos
Nº de solicitud: P201100041
Fecha de registro: 14/01/2011

Actividades científicas y tecnológicas

Producción científica

Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1** Miriam Trigo-López; Asunción Muñoz; Aránzazu Mendía; Saturnino Ibeas; Felipe Serna; Félix Clemente García; José Miguel García. Palladium-containing polymers as hybrid sensory materials (water-soluble polymers, films and smart textiles) for the colorimetric detection of cyanide in aqueous and gas phases. *Sensors and Actuators B: Chemical*. 255, pp. 2750 - 2755. Elsevier B.V., 2018.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 2** Garcia-Calvo, Jose; Ibeas, Saturnino; Anton-Garcia, Eva-Clara; Torroba, Tomas; Gonzalez-Aguilar, Gerardo; Antunes, Wilson; Gonzalez-Lavado, Eloisa; Fanarraga, Monica L. Potassium-Ion-Selective Fluorescent Sensors To Detect Cereulide, the Emetic Toxin of *B-cereus*, in Food Samples and HeLa Cells. *CHEMISTRYOPEN*. 6 - 4, pp. 562 - 570. WILEY-VCH VERLAG GMBH, POSTFACH 101161, 69451 WEINHEIM, GERMANY, 2017.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 3** Miriam Trigo-López; Asunción Muñoz; Saturnino Ibeas; Felipe Serna; Félix Clemente García; José Miguel García. Colorimetric detection and determination of Fe(III), Co(II), Cu(II) and Sn(II) in aqueous media by acrylic polymers with pendant terpyridine motifs. *Sensors and Actuators B: Chemical*. 226, pp. 118 - 126. Elsevier B.V., 2016. ISSN 0925-4005
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 4** Jesus L. Pablos; Saul Vallejos; Saturnino Ibeas; Asunción Muñoz; Felipe Serna; Felix C. García; José M. García. Acrylic Polymers with Pendant Phenylboronic Acid Moieties as “Turn-Off” and “Turn-On” Fluorescence Solid Sensors for Detection of Dopamine, Glucose, and Fructose in Water. ACS Macro Letters. 4, pp. 979 - 983. American Chemical Society, 2015. ISSN 2161-1653
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 5** Trigo-Lopez, Miriam; Luis Pablos, Jesus; Munoz, Asuncion; Ibeas, Saturnino; Serna, Felipe; Clemente Garcia, Felix; Miguel Garcia, Jose. Aromatic polyamides and acrylic polymers as solid sensory materials and smart coated fibres for high acidity colorimetric sensing. POLYMER CHEMISTRY. 6 - 16, pp. 3110 - 3120. ROYAL SOC CHEMISTRY, 2015. ISSN 1759-9954
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 6** Diaz de Grenu, Borja; Garcia-Calvo, Jose; Cuevas, Jose; Garcia-Herbosa, Gabriel; Garcia, Begona; Busto, Natalia; Ibeas, Saturnino; Torroba, Tomas; Torroba, Blanca; Herrera, Antonio; Pons, Sebastian. Chemical speciation of MeHg⁺ and Hg²⁺ in aqueous solution and HEK cells nuclei by means of DNA interacting fluorogenic probes. CHEMICAL SCIENCE. 6 - 7, pp. 3757 - 3764. ROYAL SOC CHEMISTRY, 2015. ISSN 2041-6520
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 7** Vallejos, Saul; Munoz, Asuncion; Ibeas, Saturnino; Serna, Felipe; Clemente Garcia, Felix; Miguel Garcia, Jose. Forced Solid-State Interactions for the Selective "Turn-On" Fluorescence Sensing of Aluminum Ions in Water Using a Sensory Polymer Substrate. ACS APPLIED MATERIALS & INTERFACES. 7 - 1, pp. 921 - 928. AMER CHEMICAL SOC, 2015. ISSN 1944-8244
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 8** Luis Pablos, Jesus; Estevez, Pedro; Munoz, Asuncion; Ibeas, Saturnino; Serna, Felipe; Clemente Garcia, Felix; Miguel Garcia, Jose. Polymer chemosensors as solid films and coated fibres for extreme acidity colorimetric sensing. JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY A. 3 - 6, pp. 2833 - 2843. ROYAL SOC CHEMISTRY, 2015. ISSN 2050-7488
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 9** Lari, Matteo; Lozano, Hector J; Busto, Natalia; Leal, Jose M; Ibeas, Saturnino; Platts, James A; Secco, Fernando; Garcia, Begoña. Stabilization of Al(iii) solutions by complexation with cacodylic acid: speciation and binding features. Physical chemistry chemical physics. 17 - 44, pp. 29803 - 29813. ROYAL SOC CHEMISTRY, 2015. ISSN 1463-9076
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 10** Saúl Vallejos; Asunción Muñoz; Saturnino Ibeas; Felipe Serna; Félix Clemente García; José Miguel García. Selective and sensitive detection of aluminium ions in water viafluorescence “turn-on” with both solid and water soluble sensorypolymer substrates. Journal of Hazardous Materials. 276, pp. 52 - 57. ELSEVIER, 2014. ISSN 0304-3894
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 11** Jesús L. Pablos; Saturnino Ibeas; Asunción Muñoz; Felipe Serna; Félix C. García; José M. García. Solid polymer and metallogel networks based on a fluorene derivative as fluorescent and colourimetric chemosensors for Hg(II). Reactive & Functional Polymers. 79, pp. 14 - 23. ELSEVIER SCIENCE BV, 2014. ISSN 1381-5148
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 12** Trigo-Lopez, M; Munoz, A; Ibeas, S; Garcia, FC; Serna, F; Garcia, JM. Solid sensory polymer kit for the easy and rapid determination of the concentration of water in organic solvents and ambient humidity. SENSORS AND ACTUATORS B-CHEMICAL. 191, pp. 233 - 238. ELSEVIER SCIENCE SA, 2014. ISSN 0925-4005
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 13** El Kaoutit, H; Estevez, P; Ibeas, S; Garcia, FC; Serna, F; Benabdelouahab, FB; Garcia, JM. Chromogenic and fluorogenic detection of cations in aqueous media by means of an acrylic polymer chemosensor with pendant Rhodamine-based dyes. *DYES AND PIGMENTS*. 96 - 2, pp. 414 - 422. 2013.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 14** Ana M. Navarro; Begoña García; Saturnino Ibeas; Francisco J. Hoyuelos; Indalecio A. Peñacoba; José M. Leal. Microwave Dielectric Relaxation Spectroscopy Study of Alkan-1-ol/ Alkylbenzoate Binary Solvents. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B*. 117 - 39, pp. 11765 - 11771. 2013.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 15** Saúl Vallejos; Asunción Muñoz; Saturnino Ibeas; Felipe Serna; Félix Clemente García; José Miguel García. Solid sensory polymer substrates for the quantification of iron in blood, wine and water by a scalable RGB technique. *J. Mater. Chem. A*. 1, pp. 15435 - 15441. 2013.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 16** BORJA DIAZ DE GREÑU PUERTAS; DANIEL MORENO MEDIAVILLA; TOMAS TORROBA PEREZ; BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES. A turn-on fluorogenic probe for detection of MDMA from ecstasy tablets. *Chemical Communications*. 48 - 24, pp. 2994 - 2996. 2012.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 17** Vallejos, S; Estévez, P; Ibeas, S; García, FC; Serna, F; García, JM. An Organic/Inorganic Hybrid Membrane as a Solid "Turn-On" Fluorescent Chemosensor for Coenzyme A (CoA), Cysteine (Cys), and Glutathione (GSH) in Aqueous Media. *SENSORS*. 12 - 3, pp. 2969 - 2982. 2012.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 18** Navarro, AM; Garcia, B; Hoyuelos, FJ; Peñacoba, IA; Ibeas, S; Leal, JM. Heat Capacity Behavior and Structure of Alkan-1-ol/Alkylbenzoate Binary Solvents. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B*. 116 - 32, pp. 9768 - 9775. 2012.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 19** Vallejos, S; Muñoz, A; García, FC; Serna, F; Ibeas, S; García, JM. Methacrylate copolymers with pendant piperazinedione-sensing motifs as fluorescent chemosensory materials for the detection of Cr(VI) in aqueous media. *JOURNAL OF HAZARDOUS MATERIALS*. 227, pp. 480 - 483. 2012.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 20** SAUL VALLEJOS CALZADA; PEDRO ANTONIO ESTEVEZ BOLIVAR; SATURNINO IBEAS CORTES; MARIA ASUNCION MUÑOZ SANTAMARIA; FELIX CLEMENTE GARCIA GARCIA; FELIPE JOSE SERNA ARENAS; JOSE MIGUEL GARCIA PEREZ. A selective and highly sensitive fluorescent probe of Hg(2+) in organic and aqueous media: The role of a polymer network in extending the sensing phenomena to water environments. *SENSORS AND ACTUATORS B-CHEMICAL*. 157 - 2, pp. 686 - 690. 2011.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 21** ANA GOMEZ VALDEMORO; MIRIAM TRIGO LOPEZ; SATURNINO IBEAS CORTES; FELIX CLEMENTE GARCIA GARCIA; FELIPE JOSE SERNA ARENAS; JOSE MIGUEL GARCIA PEREZ. Acrylic Copolymers with Pendant 1,2,4-Triazole Moieties as Colorimetric Sensory Materials and Solid Phases for the Removal and Sensing of Cations from Aqueous Media. *JOURNAL OF POLYMER SCIENCE PART A-POLYMER CHEMISTRY*. 49 - 17, pp. 3817 - 3825. 2011.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 22** REBECA RUIZ DIEZ; BEGOÑA GARCIA RUIZ; JAVIER GARCIA TOJAL; NATALIA BUSTO VAZQUEZ; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; CÉLIA MARTINS; JORGE GASPAR; RUBEN GIL GARCIA; JOAQUÍN BORRÁS; MARTA GONZÁLEZ-ÁLVAREZ. Biological assays and noncovalent interactions of Pyridine-2-carbaldehyde thiosemicarbazonecopper(II) drugs with [Poly(dA-dT)]₂, [Poly(dG-dC)]₂ and CT-DNA. *Journal of Biological Inorganic Chemistry*. 15 - 4, pp. 515 - 532. 2010.



Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 23** NOELIA SAN JOSE PASCUAL; ANA GOMEZ VALDEMORO; SATURNINO IBEAS CORTES; FELIX CLEMENTE GARCIA GARCIA; FELIPE JOSE SERNA ARENAS; JOSE MIGUEL GARCIA PEREZ. Colorimetric anion sensing by polyamide models containing urea-binding sites. SUPRAMOL CHEM. 22 - 6, pp. 325 - 338. 2010.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 24** BEGOÑA GARCIA RUIZ; FRANCISCO JAVIER HOYUELOS ALVARO; SATURNINO IBEAS CORTES; MARIA SOLEDAD MUÑOZ CERDAN; ANA MARTA NAVARRO CUÑADO; INDALECIO ANTONIO PEÑACOBAMAESTRE; JOSE MARIA LEAL VILLALBA. Phosphine and Thiophene Cyclopalladated Complexes: Hydrolysis Reactions in Strong Acidic Media. Chemistry an Asian Journal. 5 - 12, pp. 2530 - 2540. 2010.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 25** BEGOÑA GARCIA RUIZ; FRANCISCO JAVIER HOYUELOS ALVARO; SATURNINO IBEAS CORTES; MARIA SOLEDAD MUÑOZ CERDAN; INDALECIO ANTONIO PEÑACOBAMAESTRE; JOSE MARIA LEAL VILLALBA. Hydrolysis Mechanisms for the Organopalladium Complex [Pd(CNN)P(OMe)₃]BF₄ in Sulfuric Acid. J PHYS CHEM A. 113 - 32, pp. 9115 - 9123. 2009.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 26** BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; REBECA RUIZ DIEZ; TARITA BIVER; A. Boggioni; FERNANDO SECCO; MARCELLA VENTURINI. Solvent Effects on the Thermodynamics and Kinetics of Coraline Self-Aggregation. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 113 - 1, pp. 188 - 196. 2009.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 27** BEGOÑA GARCIA RUIZ; JAVIER GARCIA TOJAL; REBECA RUIZ DIEZ; RUBEN GIL GARCIA; SATURNINO IBEAS CORTES; BRUNO DONNADIEU; JOSE MARIA LEAL VILLALBA. Interaction of the DNA bases and their mononucleotides with pyridine-2-carbaldehyde thiosemicarbazonecopper(II) complexes. Structure of the cytosine derivative. Journal of Inorganic Biochemistry. 102 - 10, pp. 1892 - 1900. 2008.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 28** BEGOÑA GARCIA RUIZ; FERNANDO SECCO; SATURNINO IBEAS CORTES; MARIA ASUNCION MUÑOZ SANTAMARIA; FRANCISCO JAVIER HOYUELOS ALVARO; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; MARCELLA VENTURINI. Structural NMR and ab initio Study of Salicylhydroxamic and p-Hydroxybenzohydroxamic acids: Evidence for an Extended Aggregation. JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY. 72 - 21, pp. 7832 - 7840. 2007.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 29** BEGOÑA GARCIA RUIZ; Sheila González; FRANCISCO JAVIER HOYUELOS ALVARO; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; FERNANDO SECCO; MARCELLA VENTURINI. Thermodynamics and Kinetics of the Nickel(II)-Salicylhydroxamic Acid System. Phenol Rotation Induced by Metal Ion Binding. Inorganic Chemistry. 46 - 9, pp. 3680 - 3687. 2007.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 30** BEGOÑA GARCIA RUIZ; FRANCISCO JAVIER HOYUELOS ALVARO; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA. Hydrolysis Mechanisms for Indomethacin and Acemethacin in Perchloric Acid. JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY. 71, pp. 3718 - 3726. 2006.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 31** BEGOÑA GARCIA RUIZ; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; VITTORIO PAIOTTA CASELLA; SATURNINO IBEAS CORTES; REBECA RUIZ DIEZ; FERNANDO SECCO; MARCELLA VENTURINI. Intercalation of Ethidium into Triple-Strand Poly(rA).2Poly(rU): A Thermodynamic and Kinetic Study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 110, pp. 16131 - 16138. 2006.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 32** BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; FERNANDO SECCO; MARCELLA VENTURINI; M.L. SENENT; A. NIÑO; C. MUÑOZ. Conformations, Protonation Sites, and Metal Complexation of Benzohydroxamic Acid. A Theoretical and Experimental Study. *Inorganic Chemistry*. 44, pp. 2908 - 2919. 2005.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 33** FRANCISCO JAVIER HOYUELOS ALVARO; BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES; MARIA SOLEDAD MUÑOZ CERDAN; ANA MARTA NAVARRO CUÑADO; INDALECIO ANTONIO PEÑACOBAMAESTRE; JOSE MARIA LEAL VILLALBA. Protonation Sites of Indoles and Benzoylindoles. *EUROPEAN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY*. pp. 1161 - 1171. 2005.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 34** MARIA SOLEDAD MUÑOZ CERDAN; BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES; FRANCISCO JAVIER HOYUELOS ALVARO; INDALECIO ANTONIO PEÑACOBAMAESTRE; ANA MARTA NAVARRO CUÑADO; JOSE MARIA LEAL VILLALBA. Acid-base behaviour of organopalladium complexes [Pd(CNN)R]BF₄. *NEW JOURNAL OF CHEMISTRY*. 28, pp. 1450 - 1456. 2004.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 35** M.L. SENENT; CAMELIA MUÑOZ; A. NIÑO; SATURNINO IBEAS CORTES; BEGOÑA GARCIA RUIZ; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; FERNANDO SECCO; MARCELLA VENTURINI. Deprotonation Sites of Acetohydroxamic Acid Isomers. A Theoretical and Experimental Study. *JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY*. 68, pp. 6535 - 6542. 2003.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 36** BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES; A. MUÑOZ; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; CHIARA GHINAMI; FERNANDO SECCO; MARCELLA VENTURINI. NMR Studies of Phenylbenzohydroxamic Acid and Kinetics of Complex Formation with Nickel(II). *Inorganic Chemistry*. 42, pp. 5434 - 5441. 2003.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 37** BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES; FRANCISCO JAVIER HOYUELOS ALVARO; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; FERNANDO SECCO; MARCELLA VENTURINI. Hydroxamic Acids as Weak Base Indicators: Protonation in Strong Acid Media. *JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY*. 66, pp. 7986 - 7993. 2001.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 38** BEGOÑA GARCIA RUIZ; MARIA SOLEDAD MUÑOZ CERDAN; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA. Hydrolysis mechanisms for the acetylpyridinephenylhydrazone ligand in sulfuric acid. *JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY*. 65, pp. 3781 - 3787. 2000.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 39** C. MUÑOZ CARO; A. NIÑO; M.L. SENENT; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; SATURNINO IBEAS CORTES. Modelling of protonation processes in the acetohydroxamic acid. *JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY*. 65, pp. 405 - 410. 2000.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 40** BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; María Luisa Senent; Alfonso Niño; Camelio Muñoz. Theoretical and experimental analysis of the acetohydroxamic acid and protonation. The solvent effects. *Chemistry a European Journal*. 6 - 14, pp. 2644 - 2652. 2000.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 41** J.L. DÍEZ; BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; GABRIEL GARCIA HERBOSA; MARIA ASUNCION MUÑOZ SANTAMARIA. Acid-base behaviour of some orthopalladated complexes. *Reactive and Functional Polymers*. 36, pp. 223 - 227. 1998.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 42** FRANCISCO JAVIER HOYUELOS ALVARO; BEGOÑA GARCIA RUIZ; RAFAEL TEODORO ALCALDE GARCIA; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA. Shear Viscosities of the Binary Mixtures 2-Pyrrolidinone with C6 &- C10 Alkanols. J. CHEM. SOC., FADARAY TRANS.92, pp. 219 - 225. 1996.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 43** BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA. Zwitterionic pyridine carboxylic acids. J PHYS ORG CHEM. 9, pp. 593. 1996.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 44** JOSE MARIA LEAL VILLALBA; P.L. DOMINGO; BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES. Kinetics and mechanism of the hexacyanoferrate(III) oxidation of substituted anilines in basic media. NEW JOURNAL OF CHEMISTRY. 18, pp. 1233. 1994.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 45** BEGOÑA GARCIA RUIZ; R.M. CASADO; J. CASTILLO; SATURNINO IBEAS CORTES; I. DOMINGO; JOSE MARIA LEAL VILLALBA. Acidity constants of benzamide and some ortho-substituted derivatives. J PHYS ORG CHEM. 6, pp. 101 - 106. 1993.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 46** JOSE MARIA LEAL VILLALBA; P.L. DOMINGO; BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES. Alkali-metal ion catalysis of the oxidation of l-ascorbic acid by hexacyanoferrate(III) in strongly acidic media. J CHEM SOC FARADAY T. 89, pp. 3571 - 3577. 1993.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista

Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

- 1** **Título del trabajo:** Estudio de la estequiometría y de las constantes de equilibrio de modelos de poliamidas con grupos urea como receptores colorimétricos de aniones
Nombre del congreso: VI Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ-Sigma Aldrich
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: GRANADA,
Fecha de celebración: 22/11/2009
NOELIA SAN JOSE PASCUAL; ANA GOMEZ VALDEMORO; SATURNINO IBEAS CORTES; FELIX CLEMENTE GARCIA GARCIA; JOSE MIGUEL GARCIA PEREZ; FELIPE JOSE SERNA ARENAS; JOSE LUIS DE LA PEÑA ALBILLOS.
- 2** **Título del trabajo:** Poliamidas y modelos de poliamidas con grupos urea laterales como receptores colorimétricos de aniones. Determinación de la estequiometría y cálculo de las constantes de equilibrio
Nombre del congreso: Ciencia de Polímeros: retos globales-nuevas estrategias. XI Reunión del Grupo Especializado en Polímeros de las Reales Sociedades de Física y Química.
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: VALLADOLID,
Fecha de celebración: 20/09/2009
NOELIA SAN JOSE PASCUAL; SATURNINO IBEAS CORTES; FELIX CLEMENTE GARCIA GARCIA; JOSE MIGUEL GARCIA PEREZ; FELIPE JOSE SERNA ARENAS; JOSE LUIS DE LA PEÑA ALBILLOS.
- 3** **Título del trabajo:** Hydrolysis mechanism for the organometallic complex $[Pd(CNN)O(OMe)_3]BF_4$ in sulphuric acid
Nombre del congreso: XX International Congress on Thermodynamics of Metal Complexes
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Tirrenia, Italia



Fecha de celebración: 07/06/2009

BEGOÑA GARCIA RUIZ; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; SATURNINO IBEAS CORTES; FRANCISCO JAVIER HOYUELOS ALVARO; INDALECIO ANTONIO PEÑACOBIA MAESTRE.

- 4** **Título del trabajo:** Evidence for formation of a dinuclear complex in the interaction of Iron(III) with salicylhydroxamic acid
Nombre del congreso: XIX International Congress on Thermodynamics of Metal Complexes
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: BAEZA,
Fecha de celebración: 09/06/2008
BEGOÑA GARCIA RUIZ; M. R. BECCIA; TARITA BIVER; FERNANDO SECCO; MARCELLA VENTURINI; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; SATURNINO IBEAS CORTES.
- 5** **Título del trabajo:** Pyridine-2-carbaldehyde thiosemicarbazonecopper(II) complexes. Binding to nucleobases and nucleotides
Nombre del congreso: XIX International Congress on Thermodynamics of Metal Complexes
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: BAEZA,
Fecha de celebración: 09/06/2008
BEGOÑA GARCIA RUIZ; JAVIER GARCIA TOJAL; REBECA RUIZ DIEZ; RUBEN GIL GARCIA; SATURNINO IBEAS CORTES; B. DONNADIEU; JOSE MARIA LEAL VILLALBA.
- 6** **Título del trabajo:** Intercalation of Proflavine into [Poly(dA-dT)]₂ and [Poly(dG-dC)]₂ in Ethanol/Water Mixtures. A Thermodynamic and Kinetic Study
Nombre del congreso: Isolated Biomolecules and Biomolecular Interactions
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: VALLADOLID,
Fecha de celebración: 13/04/2008
BEGOÑA GARCIA RUIZ; REBECA RUIZ DIEZ; SATURNINO IBEAS CORTES; FERNANDO SECCO; MARCELLA VENTURINI; TARITA BIVER; JOSE MARIA LEAL VILLALBA.
- 7** **Título del trabajo:** Stability of DNA in different ethanol/water mixtures. Interaction of proflavine with DNA.
Nombre del congreso: Medicta 2007
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Palermo, Italia
Fecha de celebración: 25/09/2007
REBECA RUIZ DIEZ; BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA. 25/09/2007.
- 8** **Título del trabajo:** Structural NMR Study of Salicylhydroxamic and p-Hydroxybenzohydroxamic acids: Evidence for an Extended Aggregation
Nombre del congreso: Ismec 2007
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Cagliari, Italia
Fecha de celebración: 05/06/2007
BEGOÑA GARCIA RUIZ; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; SATURNINO IBEAS CORTES; FRANCISCO JAVIER HOYUELOS ALVARO; MARIA ASUNCION MUÑOZ SANTAMARIA; FERNANDO SECCO; MARCELLA VENTURINI.
- 9** **Título del trabajo:** Intercalation of proflavine into [poly(dA-dT)]₂ in ethanol-water mixtures. A thermodynamic and kinetic study.
Nombre del congreso: XXII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana



Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Florencia, Italia

Fecha de celebración: 09/2006

REBECA RUIZ DIEZ; FERNANDO SECCO; MARCELLA VENTURINI; T. BIVER; BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA.

- 10 Título del trabajo:** Intercalation of proflavine and poly(dg-dc).poly(dg-dc) in ethanol-water mixtures. A thermodynamic and kinetic study.

Nombre del congreso: Italian-Spanish congress on the thermodynamics of metal complexes

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: SEVILLA,

Fecha de celebración: 05/06/2006

REBECA RUIZ DIEZ; FERNANDO SECCO; MARCELLA VENTURINI; TARITA BIVER; BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA.

- 11 Título del trabajo:** Thermodynamic properties of the poly (dA-dT)₂ and poly (dG-dC)₂ intercalation to pyridine-2-carbaldehydethio-semicarbazoncopper(II) in aqueous solution.

Nombre del congreso: Italian-Spanish congress on the thermodynamics of metal complexes

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: SEVILLA,

Fecha de celebración: 05/06/2006

REBECA RUIZ DIEZ; BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES; RUBEN GIL GARCIA; JAVIER GARCIA TOJAL; TARITA BIVER; JOSE MARIA LEAL VILLALBA.

- 12 Título del trabajo:** Experimental and theoretical study of salicylhydroxamic acid deprotonation process.

Nombre del congreso: Italian-Spanish congress on the thermodynamics of metal complexes

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: UDINE, Italia

Fecha de celebración: 21/06/2005

BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; M.L. SENENT; MARCELLA VENTURINI; FERNANDO SECCO.

- 13 Título del trabajo:** Thermodynamics and Kinetics of the Nickel(II) & -p-Hydroxybenzohydroxamic acid complex formation

Nombre del congreso: XVI Italian-Spanish Congress on Thermodynamics of Metal Complexes. XXXII Annual Congress of the "Gruppo Di Termodinamica Dei Complessi"

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: UDINE, Italia

Fecha de celebración: 21/06/2005

FRANCISCO JAVIER HOYUELOS ALVARO; SATURNINO IBEAS CORTES; BEGOÑA GARCIA RUIZ; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; MARCELLA VENTURINI; FERNANDO SECCO.

- 14 Título del trabajo:** A Thermodynamic Study on the stability of poly(dA-dT).poly(dA-dT) in Alcohol-Water mixtures

Nombre del congreso: XXII Annual Congress Of The "Gruppo di Termodinamica dei Complessi"

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Udine, Italia

Fecha de celebración: 06/2005

REBECA RUIZ DIEZ; BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; MARCELLA VENTURINI; FERNANDO SECCO.



- 15 Título del trabajo:** Mechanism of intercalation into RNA triple helix by acridines and fenantridines.
Nombre del congreso: Fast Reactions in solution. Annual Meeting
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: BURGOS,
Fecha de celebración: 05/09/2004
VITTORIO PAIOTTA CASELLA; SATURNINO IBEAS CORTES; BEGOÑA GARCIA RUIZ; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; MARCELLA VENTURINI; FERNANDO SECCO.
- 16 Título del trabajo:** Kinetic and thermodynamic study of the interaction of ribonucleic acids in triple helical form with dyes
Nombre del congreso: Fast Reactions in solution. Annual Meeting
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: HALLE, Alemania
Fecha de celebración: 09/2003
VITTORIO PAIOTTA CASELLA; BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; MARCELLA VENTURINI; FERNANDO SECCO.
- 17 Título del trabajo:** Time-resolved fluorescence study of the acid hydrolysis of the [Pd(CNN)P(OCH)₃]BF₄ complex
Nombre del congreso: Meeting in inorganic chemistry
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Lisboa, Portugal
Fecha de celebración: 11/06/2003
MARIA SOLEDAD MUÑOZ CERDAN; BEGOÑA GARCIA RUIZ; FRANCISCO JAVIER HOYUELOS ALVARO; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; INDALECIO ANTONIO PEÑACOBIA MAESTRE; ANA MARTA NAVARRO CUÑADO; Angel González Ureña.
- 18 Título del trabajo:** Equilibria of Benzohydroxamic acid and interacion with Gallium(III) : NMR and complex formation
Nombre del congreso: Fast Reactions in solution. Annual Meeting
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: ESTAMBUL, Turquía
Fecha de celebración: 09/2002
L. MORRONI; FERNANDO SECCO; MARCELLA VENTURINI; BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA; M.L. SENENT.
- 19 Título del trabajo:** Equilibria of Phenylbenzohydroxamic acid and interacion with Gallium(III) : NMR and complex formation
Nombre del congreso: Spanish-Italian congress on thermodynamics of metal complex
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: SANTIAGO DE COMPOSTELA,
Fecha de celebración: 06/2002
L. MORRONI; FERNANDO SECCO; MARCELLA VENTURINI; BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA.
- 20 Título del trabajo:** Kinetics and mechanism of the acid hydrolysis of the [Pd(CNN)P(OMe)₃]BF₄ complex
Nombre del congreso: Fast Reactions in solution. Annual Meeting
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: VERSAILLES, Francia
Fecha de celebración: 07/2001
MARIA SOLEDAD MUÑOZ CERDAN; FRANCISCO JAVIER HOYUELOS ALVARO; SATURNINO IBEAS CORTES; BEGOÑA GARCIA RUIZ; JOSE MARIA LEAL VILLALBA.



- 21 Título del trabajo:** Theoretical and Experimental study of the Acetohydroxamic acid protonation. The solvent effect
Nombre del congreso: Theoretical and Experimental study of the Acetohydroxamic acid protonation. The solvent effect
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: UPPSALA, Suecia
Fecha de celebración: 2000
M.L. SENENT; C. MUÑOZ CARO; A. NIÑO; BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA.
- 22 Título del trabajo:** Theoretical and experimental study of the acid-base
Nombre del congreso: IBER 2000, IV Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: SAN LORENZO DE EL ESCORIAL,
Fecha de celebración: 2000
A. NIÑO; C. MUÑOZ CARO; M.L. SENENT; BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA.
- 23 Título del trabajo:** Modelling of protonation processes in the acetohydroxamic acid
Nombre del congreso: Quantum Systems in Chemistry and Physics
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: GRANADA,
Fecha de celebración: 1998
C. MUÑOZ; A. NIÑO; M.L. SENENT; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA.
- 24 Título del trabajo:** Hidrólisis de Acemetacina y de algunos derivados del Indol. Estudio Cinético
Nombre del congreso: XXVI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: CADIZ,
Fecha de celebración: 1997
BEGOÑA GARCIA RUIZ; FRANCISCO JAVIER HOYUELOS ALVARO; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA.
- 25 Título del trabajo:** The copper(II) catalyzed oxidation of thiols by hexacyanoferrate(III)
Nombre del congreso: Fast Reactions in solution. Annual Meeting
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: NORWICH, Reino Unido
Fecha de celebración: 06/09/1995
BEGOÑA GARCIA RUIZ; P.L. DOMINGO; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA.
- 26 Título del trabajo:** Hydrolysis of Indomethacin in strongly acidic media
Nombre del congreso: Fast Reactions in solution. Annual Meeting
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: BURGOS,
Fecha de celebración: 11/09/1994
SATURNINO IBEAS CORTES; BEGOÑA GARCIA RUIZ; JOSE MARIA LEAL VILLALBA.
- 27 Título del trabajo:** Specific catalytic effect of alkali-metal ions in redox reactions
Nombre del congreso: Fast Reactions in solution. Annual Meeting
Tipo de participación: Participativo - Póster



Ciudad de celebración: BURGOS,

Fecha de celebración: 11/09/1994

P.L. DOMINGO; BEGOÑA GARCIA RUIZ; SATURNINO IBEAS CORTES; JOSE MARIA LEAL VILLALBA.

Gestión de I+D+i y participación en comités científicos

Organización de actividades de I+D+i

- 1 Título de la actividad:** International Symposia on Metal Complexes
Tipo de actividad: Secretario del Comité Organizador **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Ciudad de celebración: Burgos, Castilla y León, España
Ciudad entidad convocante: Burgos, Castilla y León, España
Modo de participación: Secretario/a
Nº de asistentes: 109
Fecha de inicio-fin: 16/06/2013 - 20/06/2013
- 2 Título de la actividad:** Fast Reactions in Solution
Tipo de actividad: Secretario del comité organizador **Ámbito geográfico:** INTERNACIONAL
Ciudad de celebración: Burgos, Castilla y León, España
Ciudad entidad convocante: Burgos, Castilla y León, España
Modo de participación: Secretario/a
Nº de asistentes: 71
Fecha de inicio-fin: 05/09/2004 - 09/09/2004
- 3 Título de la actividad:** Fast Reactions in Solution
Tipo de actividad: Secretario del comité organizador **Ámbito geográfico:** INTERNACIONAL
Ciudad de celebración: Burgos, Castilla y León, España
Ciudad entidad convocante: Burgos, Castilla y León, España
Modo de participación: Secretario/a
Nº de asistentes: 80
Fecha de inicio-fin: 11/09/1994 - 15/09/1994

Otros méritos

Períodos de actividad investigadora

- 1 Nº de tramos reconocidos:** 1
Entidad acreditante: MINISTERIO DE EDUCACIÓN, CULTURA Y DEPORTE
Ciudad entidad acreditante: Burgos, Castilla y León, España
Fecha de obtención: 2012
- 2 Nº de tramos reconocidos:** 2
Entidad acreditante: MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA
Ciudad entidad acreditante: Burgos, Castilla y León, España
Fecha de obtención: 2006



María del Pilar Redondo Cristóbal

Generado desde: Editor CVN de FECYT

Fecha del documento: 15/10/2018

v 1.4.0

2409d40eb8d7eab37bbd2ee457c9d56f

Este fichero electrónico (PDF) contiene incrustada la tecnología CVN (CVN-XML). La tecnología CVN de este fichero permite exportar e importar los datos curriculares desde y hacia cualquier base de datos compatible. Listado de Bases de Datos adaptadas disponible en <http://cvn.fecyt.es/>



María del Pilar Redondo Cristóbal

Apellidos: **Redondo Cristóbal**
 Nombre: **María del Pilar**
 DNI: **13103544F**
 Fecha de nacimiento: **23/06/1962**
 Sexo: **Mujer**
 Teléfono fijo: **(34) 983184017 - 4017**
 Correo electrónico: **predondo@qf.uva.es**

Situación profesional actual

Entidad empleadora: Universidad de Valladolid
Departamento: Química Física y Química Inorgánica, Facultad de Ciencias
Categoría profesional: Catedrático de Universidad
Fecha de inicio: 21/02/2018
Modalidad de contrato: Funcionario/a **Régimen de dedicación:** Tiempo completo
Primaria (Cód. Unesco): 230000 - Química
Secundaria (Cód. Unesco): 230700 - Química física
Identificar palabras clave: Química

Cargos y actividades desempeñados con anterioridad

	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
1	Universidad de Valladolid	Profesor Titular de Universidad	04/04/2000
2	Universidad de Valladolid	Profesor Titular de Universidad Interino	01/10/1999
3	Universidad de Valladolid	Profesor Asociado, Tipo 3, T.C.	01/03/1996
4	Universidad de Valladolid	Ayudante de Universidad	01/11/1993
5	CUI de Burgos. Universidad de Valladolid	Profesor Asociado, Tipo 3, T.C.	01/02/1993
6	CUI de Burgos. Universidad de Valladolid	Profesor Asociado, Tipo 2, T.C.	01/02/1992
7	CUI de Burgos. Universidad de Valladolid	Profesor Asociado, Tipo 2, (6+6)	01/02/1991
8	Ecole Normale Supérieure (París)	Becario Post Doctoral. beca de Perfeccionamiento para Doctores, Subprograma MEC/MRES	01/12/1989
9	Universidad de Valladolid	Becario del Plan Nacional de Formación del Personal Investigado. MEC (plan general)	01/01/1986

1 Entidad empleadora: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Profesor Titular de Universidad
Fecha de inicio-fin: 04/04/2000 - 20/02/2018



- 2 Entidad empleadora:** Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Profesor Titular de Universidad Interino
Fecha de inicio-fin: 01/10/1999 - 04/04/2000
- 3 Entidad empleadora:** Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Profesor Asociado, Tipo 3, T.C.
Fecha de inicio-fin: 01/03/1996 - 30/09/1999
- 4 Entidad empleadora:** Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Ayudante de Universidad
Fecha de inicio-fin: 01/11/1993 - 28/02/1996
- 5 Entidad empleadora:** CUI de Burgos. **Tipo de entidad:** Universidad
Universidad de Valladolid
Categoría profesional: Profesor Asociado, Tipo 3, T.C.
Fecha de inicio-fin: 01/02/1993 - 30/10/1993
- 6 Entidad empleadora:** CUI de Burgos. **Tipo de entidad:** Universidad
Universidad de Valladolid
Categoría profesional: Profesor Asociado, Tipo 2, T.C.
Fecha de inicio-fin: 01/02/1992 - 31/01/1993
- 7 Entidad empleadora:** CUI de Burgos. **Tipo de entidad:** Universidad
Universidad de Valladolid
Categoría profesional: Profesor Asociado, Tipo 2, (6+6)
Fecha de inicio-fin: 01/02/1991 - 31/01/1992
- 8 Entidad empleadora:** Ecole Normale Supérieure **Tipo de entidad:** Organismo Público de
(París) Investigación
Categoría profesional: Becario Post Doctoral. beca de Perfeccionamiento para Doctores,
Subprograma MEC/MRES
Fecha de inicio-fin: 01/12/1989 - 31/01/1991
- 9 Entidad empleadora:** Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Becario del Plan Nacional de Formación del Personal Investigado. MEC
(plan general)
Fecha de inicio-fin: 01/01/1986 - 30/11/1989



Formación académica recibida

Titulación universitaria

Estudios de 1º y 2º ciclo, y antiguos ciclos (Licenciados, Diplomados, Ingenieros Superiores, Ingenieros Técnicos, Arquitectos)

Titulación universitaria: Titulado Superior

Nombre del título: Licenciado en Ciencias Químicas

Entidad de titulación: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

Fecha de titulación: 30/06/1995

Doctorados

Programa de doctorado: Programa Oficial de Doctorado en Ciencias Químicas

Entidad de titulación: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

Fecha de titulación: 17/11/1989

Formación especializada, continuada, técnica, profesionalizada, de reciclaje y actualización (distinta a la formación académica reglada y a la sanitaria)

- Título de la formación:** "Summer School in Quantum Chemistry"
Entidad de titulación: Universidad de Cantabria. Cursos de verano
Fecha de finalización: 08/1994
- Título de la formación:** "Advanced Lectures and Fifth CSF Users Group Meeting"
Entidad de titulación: Universidad de Namur, Belgica
Fecha de finalización: 05/1992
- Título de la formación:** "Química Iónica"
Fecha de finalización: 07/1988
- Título de la formación:** Certificado de Aptitud Pedagógica (C.A.P.)
Fecha de finalización: 1986



Cursos y seminarios recibidos de perfeccionamiento, innovación y mejora docente, nuevas tecnologías, etc., cuyo objetivo sea la mejora de la docencia

- 1** **Título del curso/seminario:** GESTORES DE REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS Y BIBLIOMETRÍA BÁSICA
Objetivos del curso/seminario: Cursos de Formación Profesorado Universitario
Entidad organizadora: Universidad de Valladolid, Área de Formación Permanente e Innovación
Duración en horas: 30 horas
Fecha de inicio-fin: 15/05/2017 - 04/06/2017
- 2** **Título del curso/seminario:** GESTIÓN DE TRABAJO EN EQUIPO EN LA NUBE
Objetivos del curso/seminario: Cursos de Formación Profesorado Universitario
Entidad organizadora: Universidad de Valladolid, Centro Buendia
Duración en horas: 13 horas
Fecha de inicio-fin: 15/02/2016 - 26/02/2016
- 3** **Título del curso/seminario:** INNOVA EN TUS PRESENTACIONES PREZI
Objetivos del curso/seminario: Cursos de Formación Profesorado Universitario
Entidad organizadora: Universidad de Valladolid, Centro Buendia
Duración en horas: 13 horas
Fecha de inicio-fin: 21/10/2015 - 22/10/2015
- 4** **Título del curso/seminario:** El diseño de Asignaturas en el Marco ECTS
Objetivos del curso/seminario: Cursos de Formación Profesorado Universitario
Entidad organizadora: Universidad de Valladolid, Centro Buendia
Duración en horas: 20 horas
Fecha de inicio-fin: 14/04/2010 - 15/05/2010
- 5** **Título del curso/seminario:** Taller Virtual de Apoyo a la Docencia con Moodle
Objetivos del curso/seminario: Cursos de Formación Profesorado Universitario
Entidad organizadora: Universidad de Valladolid, Centro Buendia
Duración en horas: 40 horas
Fecha de inicio-fin: 02/02/2010 - 26/02/2010
- 6** **Título del curso/seminario:** Estrategias Metodológicas para Dinamizar el Aula Universitaria
Objetivos del curso/seminario: Talleres de Técnicas Docentes para el Profesorado Universitario. Arte Docente
Entidad organizadora: Universidad de Valladolid, Centro Buendia
Duración en horas: 8 horas
Fecha de inicio: 2001
- 7** **Título del curso/seminario:** Motivar en el Aula
Objetivos del curso/seminario: Talleres de Técnicas Docentes para el Profesorado Universitario. Arte Docente
Entidad organizadora: Universidad de Valladolid, Centro Buendia
Duración en horas: 8 horas
Fecha de inicio: 2001
- 8** **Título del curso/seminario:** Nuevas Tecnologías Aplicadas a la Publicación de Documentos Científico-Técnicos
Objetivos del curso/seminario: Talleres de Técnicas Docentes para el Profesorado Universitario. Arte Docente
Entidad organizadora: Universidad de Valladolid, Centro Buendia
Duración en horas: 8 horas



Fecha de inicio: 2000

9 Título del curso/seminario: Publicación en la Red

Objetivos del curso/seminario: Talleres de Técnicas Docentes para el Profesorado Universitario. Arte Docente

Entidad organizadora: Universidad de Valladolid, Centro Buendía

Duración en horas: 8 horas

Fecha de inicio: 2000

Conocimiento de idiomas

Idioma	Comprensión auditiva	Comprensión de lectura	Interacción oral	Expresión oral	Expresión escrita
Inglés		C1	A1	A1	C1
Francés		C1	C1	C1	A1

Actividad docente

Formación académica impartida

- Nombre de la asignatura/curso:** Físico-Química de la Atmósfera
Titulación universitaria: Máster en Técnicas Avanzadas en Química
Fecha de inicio: 2013 **Fecha de finalización:** 2018
Fecha de finalización: 2018
Entidad de realización: Universidad de Valladolid
- Nombre de la asignatura/curso:** Laboratorio de Química
Titulación universitaria: MÁSTER DE PROFESOR DE SECUNDARIA - MÓDULO ESPECÍFICO: FÍSICA Y QUÍMICA Y SU DIDÁCTICA
Fecha de inicio: 2012 **Fecha de finalización:** 2018
Fecha de finalización: 2018
Entidad de realización: Universidad de Valladolid
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- Nombre de la asignatura/curso:** Química Experimental II
Titulación universitaria: Grado en Química
Fecha de inicio: 2011 **Fecha de finalización:** 2018
Fecha de finalización: 2018
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- Nombre de la asignatura/curso:** Química Física I
Titulación universitaria: Grado en Química
Fecha de inicio: 2011 **Fecha de finalización:** 2018
Fecha de finalización: 2018
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias



- 5** **Nombre de la asignatura/curso:** Química de la Atmósfera
Titulación universitaria: Licenciatura en Química
Fecha de inicio: 2000 **Fecha de finalización:** 2016
Fecha de finalización: 2016
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 6** **Nombre de la asignatura/curso:** Métodos de la Química Cuántica y la Mecánica Estadística
Titulación universitaria: Máster de Química Teórica y Modelización Computacional (Interuniversitario)
Fecha de inicio: 2012 **Fecha de finalización:** 2013
Fecha de finalización: 2013
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 7** **Nombre de la asignatura/curso:** Química Física II
Titulación universitaria: Grado en Química
Fecha de inicio: 2012 **Fecha de finalización:** 2013
Fecha de finalización: 2013
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 8** **Nombre de la asignatura/curso:** Química Experimental II
Titulación universitaria: Grado en Química
Fecha de inicio: 2011 **Fecha de finalización:** 2013
Fecha de finalización: 2013
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 9** **Nombre de la asignatura/curso:** Métodos de la Química Cuántica y la Mecánica Estadística
Titulación universitaria: Máster de Química Teórica y Modelización Computacional (Interuniversitario)
Fecha de inicio: 2011 **Fecha de finalización:** 2012
Fecha de finalización: 2012
Entidad de realización: Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 10** **Nombre de la asignatura/curso:** Operaciones Básicas de Laboratorio II
Titulación universitaria: Grado en Química
Fecha de inicio: 2011 **Fecha de finalización:** 2012
Fecha de finalización: 2012
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 11** **Nombre de la asignatura/curso:** Química Física III
Titulación universitaria: Licenciatura en Química
Fecha de inicio: 2011 **Fecha de finalización:** 2012
Fecha de finalización: 2012
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias



- 12** **Nombre de la asignatura/curso:** Físico Química de la Atmósfera
Titulación universitaria: Master universitario en Técnicas Avanzadas en Química
Fecha de inicio: 2010 **Fecha de finalización:** 2011
Fecha de finalización: 2011
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 13** **Nombre de la asignatura/curso:** Introducción a la Experimentación Química y las Técnicas Instrumentales I
Titulación universitaria: Licenciatura en Química
Fecha de inicio: 2009 **Fecha de finalización:** 2011
Fecha de finalización: 2011
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 14** **Nombre de la asignatura/curso:** Química Física I
Titulación universitaria: Licenciatura en Química
Fecha de inicio: 1999 **Fecha de finalización:** 2011
Fecha de finalización: 2011
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 15** **Nombre de la asignatura/curso:** Espectroscopía Molecular
Titulación universitaria: Licenciatura en Química
Fecha de inicio: 2000 **Fecha de finalización:** 2009
Fecha de finalización: 2009
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 16** **Nombre de la asignatura/curso:** Métodos de la Química Cuántica
Titulación universitaria: Doctorado en Química teórica y Computacional (interuniversitario)
Fecha de inicio: 2006 **Fecha de finalización:** 2008
Fecha de finalización: 2008
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 17** **Nombre de la asignatura/curso:** Fundamentos en Química Computacional
Titulación universitaria: Doctorado en Estudios en Química Avanzada
Fecha de inicio: 2003 **Fecha de finalización:** 2006
Fecha de finalización: 2006
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 18** **Nombre de la asignatura/curso:** Aplicaciones Computacionales en Estructura y Reactividad Química
Titulación universitaria: Doctorado en Estudios en Química Avanzada
Fecha de inicio: 2003 **Fecha de finalización:** 2004
Fecha de finalización: 2004
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias



- 19** **Nombre de la asignatura/curso:** Experimentación en Química
Titulación universitaria: Licenciatura en Física
Fecha de inicio: 2003 **Fecha de finalización:** 2004
Fecha de finalización: 2004
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 20** **Nombre de la asignatura/curso:** Química Computacional
Titulación universitaria: Licenciatura en Química
Fecha de inicio: 2001 **Fecha de finalización:** 2002
Fecha de finalización: 2002
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 21** **Nombre de la asignatura/curso:** Laboratorio de Técnicas instrumentales y del Láser en Química
Titulación universitaria: Licenciatura en Química
Fecha de inicio: 2000 **Fecha de finalización:** 2002
Fecha de finalización: 2002
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 22** **Nombre de la asignatura/curso:** Termodinámica Molecular
Titulación universitaria: Licenciatura en Química
Fecha de inicio: 1997 **Fecha de finalización:** 2000
Fecha de finalización: 2000
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 23** **Nombre de la asignatura/curso:** Termodinámica Molecular
Titulación universitaria: Licenciatura en Química
Fecha de inicio: 1997 **Fecha de finalización:** 2000
Fecha de finalización: 2000
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 24** **Nombre de la asignatura/curso:** Ampliación de Química Física
Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 1994 **Fecha de finalización:** 1999
Fecha de finalización: 1999
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 25** **Nombre de la asignatura/curso:** Química Física
Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 1993 **Fecha de finalización:** 1998
Fecha de finalización: 1998
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias



C

V

n

CURRÍCULUM VITAE NORMALIZADO

2409d40eb8d7eab37bbd2ee457c9d56f

- 26** **Nombre de la asignatura/curso:** Química Cuántica y Espectroscopía
Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 1996 **Fecha de finalización:** 1997
Fecha de finalización: 1997
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 27** **Nombre de la asignatura/curso:** Química General
Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 1993 **Fecha de finalización:** 1996
Fecha de finalización: 1996
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias
- 28** **Nombre de la asignatura/curso:** Ampliación de Química Física
Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 1991 **Fecha de finalización:** 1993
Fecha de finalización: 1993
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: CUI de Burgos
- 29** **Nombre de la asignatura/curso:** Cinética y Mecanismos de Reacción
Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 1991 **Fecha de finalización:** 1993
Fecha de finalización: 1993
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: CUI de Burgos
- 30** **Nombre de la asignatura/curso:** Física Química
Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencia y Tecnología de los Alimentos
Fecha de inicio: 1991 **Fecha de finalización:** 1993
Fecha de finalización: 1993
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: CUI de Burgos
- 31** **Nombre de la asignatura/curso:** Química Física
Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 1991 **Fecha de finalización:** 1993
Fecha de finalización: 1993
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: CUI de Burgos



Dirección de tesis doctorales y/o proyectos fin de carrera

- Título del trabajo:** Estudio Computacional de los Sistemas [H, X, Y, Z] (X=C,Si; Y=N,P; Z=O,S)
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Andrea Livián López
Calificación obtenida: 8.0
Fecha de defensa: 06/07/2018
- Título del trabajo:** Las TIC en la Actividad Docente: Aplicaciones web en Mecánica Cuántica para ESO y Bachillerato
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Máster
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Álvaro Vega Vega
Calificación obtenida: 8.5
Fecha de defensa: 05/2018
- Título del trabajo:** Sistemas relevantes en Astroquímica [H, X, Y, Z] (X=C,Si; Y=N,P; Z=O,S): Estudio computacional de la estructura y el enlace
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Paloma Benito Castresana
Calificación obtenida: 8.5
Fecha de defensa: 05/07/2017
- Título del trabajo:** LA ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA EN EDUCACIÓN SECUNDARIA Y BACHILLERATO A TRAVÉS DE EXPERIENCIAS PRÁCTICAS DE ELECTROQUÍMICA
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Máster
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: María Atienza Escarda
Calificación obtenida: 8.5
Fecha de defensa: 03/07/2017
- Título del trabajo:** Modelización Computacional de la Reactividad Química: Reacción de $Ge^+ + CH_3X$ (Cl, Br)
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Jesús Abellán Burgos
Calificación obtenida: 7.5
Fecha de defensa: 05/07/2016
- Título del trabajo:** DETERMINACIÓN TEÓRICA DE PARÁMETROS ESTRUCTURALES: ESTUDIO DE LOS ISÓMEROS [Al,C,C,C] Y [Al,C,C,Si]
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: M^a Esmeralda García Vivas
Calificación obtenida: 9.0
Fecha de defensa: 10/07/2015



- 7** **Título del trabajo:** Síntesis de Biomoléculas en el medio interestelar: Estudio Computacional
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: María Isabel Carazo Hernán
Calificación obtenida: 8.7
Fecha de defensa: 09/07/2015
- 8** **Título del trabajo:** Química prebiótica en el medio interestelar
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Master
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Laura Largo Escudero
Calificación obtenida: Sobresaliente
Fecha de defensa: 07/2011
- 9** **Título del trabajo:** Síntesis de precursores de glicina en el medio interestelar
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral
Codirector/a tesis: Carmen Barrientos Benito
Entidad de realización: UNIVERSIDAD DE VALLADOLID Facultad / Escuela: FACULTAD DE CIENCIAS
Alumno/a: Laura Largo Escudero
Calificación obtenida: Sobresaliente Cum Laude
Fecha de defensa: 17/06/2011
- 10** **Título del trabajo:** Estructura y Síntesis de Compuestos Clorocarbonados en el Medio Interestelar: Un Estudio Teórico
Codirector/a tesis: Antonio Largo Cabrerizo
Entidad de realización: UNIVERSIDAD DE VALLADOLID Facultad / Escuela: FACULTAD DE CIENCIAS
Alumno/a: José Ramón REDONDO CRISTÓBAL
Calificación obtenida: Sobresaliente Cum Laude
Fecha de defensa: 25/04/2002
- 11** **Título del trabajo:** "Estudio Teórico de las Reacciones de Nitrógeno Atómico con Derivados Iónicos del Hidrocarburo C₃H₂" Realizada por: María Jesús Ruiz Labarga Presentada: Julio de 1999
Tipo de proyecto: Tesina
Codirector/a tesis: Antonio Largo
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: María Jesús Ruiz Labarga
Fecha de defensa: 07/1999
- 12** **Título del trabajo:** "Procesos Ión-Molécula en la Formación de Cianopoliacetilenos: Estudio Teórico de la Reacción C₂H₂⁺ + CN"
Tipo de proyecto: Tesina
Codirector/a tesis: Antonio Largo
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Rocío Boronat Palacios
Calificación obtenida: Notable
Fecha de defensa: 03/1999
- 13** **Título del trabajo:** "Estudio Teórico de los Procesos de Formación de la Molécula Interestelar SC₃"
Tipo de proyecto: Tesina
Codirector/a tesis: Antonio Largo
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad



Alumno/a: Elena Calleja Pérez
Calificación obtenida: Notable
Fecha de defensa: 11/1998

14 Título del trabajo: "Estudio Teórico de Compuestos Tetraatómicos Clorocarbonados: Estructura y Procesos de Formación"

Tipo de proyecto: Tesina

Codirector/a tesis: Antonio Largo

Entidad de realización: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Alumno/a: José Ramón Redondo Cristóbal

Fecha de defensa: 07/1998

15 Título del trabajo: "Estudio Teórico de Compuestos Binarios Si-C en el Medio Interestelar: Estructura y Posibles Vías de Formación"

Tipo de proyecto: Tesina

Codirector/a tesis: Antonio Largo Cabrerizo

Entidad de realización: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Alumno/a: Ana V. Sagüillo Retuerto

Calificación obtenida: Notable

Fecha de defensa: 11/1997

Tutorías académicas de estudiantes

Nombre del programa: Tutoría de alumnos Grado en Química

Entidad de realización: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Frecuencia de la actividad: 6

Publicaciones docentes o de carácter pedagógico, libros, artículos, etc.

M.J. Insausti; P. Redondo; E. Charro. Manual de experimentación básica en química. Universidad de Valladolid, 1999. ISBN 84-7762-990-0

Nombre del material: Libro

Fecha de elaboración: 1999

Tipo de soporte: Libro

Participación en proyectos de innovación docente

1 Título del proyecto: Desarrollo de materiales y herramientas docentes para la evaluación de la capacidad de auto-aprendizaje y autonomía del alumno

Tipo de participación: Miembro de equipo

Tipo duración relación laboral: Por tiempo determinado

Entidad financiadora: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Fecha de inicio-fin: 2015 - 2016

Duración: 1 año

2 Título del proyecto: Desarrollo de materiales y herramientas docentes para la evaluación de la capacidad de auto-aprendizaje y autonomía del alumno

Tipo de participación: Otros

Tipo duración relación laboral: Por tiempo determinado

Entidad financiadora: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad



Fecha de inicio-fin: 2014 - 2015

Duración: 1 año

- 3 Título del proyecto:** Desarrollo de herramientas para la evaluación de la capacidad de auto-aprendizaje y autonomía del alumno
Tipo de participación: Otros
Tipo duración relación laboral: Por tiempo determinado
Entidad financiadora: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio-fin: 2013 - 2014 **Duración:** 1 año
- 4 Título del proyecto:** Desarrollo e implementación de nuevas metodologías docentes en la Química Física y Química Analítica dentro del marco de la Convergencia Europea
Tipo de participación: Otros
Tipo duración relación laboral: Por tiempo determinado
Entidad financiadora: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio-fin: 2008 - 2009 **Duración:** 1 año
- 5 Título del proyecto:** Ayuda para la elaboración de recursos de apoyo y experiencias innovadoras en torno a la Convergencia Europea: Desarrollo de competencias para el trabajo en grupo en el ámbito de la Química.
Tipo de participación: Otros
Tipo duración relación laboral: Por tiempo determinado
Fecha de inicio-fin: 08/10/2004 - 06/2005
- 6 Título del proyecto:** Ayuda para la elaboración de recursos de apoyo y experiencias innovadoras en torno a la Convergencia Europea: Desarrollo de competencias para el trabajo en grupo en el ámbito de la Química.
Tipo de participación: Otros
Tipo duración relación laboral: Por tiempo determinado
Entidad financiadora: Consejería de Educación, Junta de Castilla y León
Fecha de inicio-fin: 08/10/2004 - 06/2005
- 7 Título del proyecto:** Manual de Experimentación Básica en Química
Tipo de participación: Otros
Nombre del investigador/a principal (IP): M. José Insausti
Fecha de inicio-fin: 07/1996 - 12/1997

Participación en congresos con ponencias orientadas a la formación docente

- 1 Nombre del evento:** Jornadas virtuales "Virtual USATIC 2016, Ubicuo y Social: Aprendizaje con TIC"
Tipo de evento: Jornada
Ciudad de celebración: España
Fecha de presentación: 30/06/2016
Entidad organizadora: Universidad de Zaragoza **Tipo de entidad:** Universidad
El Trabajo Colaborativo en la Tutoría-Aula en el Grado en Química.
- 2 Nombre del evento:** VI Jornada de Innovación Docente de la Universidad de Valladolid "Los Universos Docentes"
Tipo de evento: Jornada
Ciudad de celebración: Valladolid, España
Fecha de presentación: 22/04/2016
Entidad organizadora: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
El Trabajo Colaborativo en la Tutoría-Aula-Poster.



- 3** **Nombre del evento:** XX Reunión de la Sociedad Española de Química Analítica
Tipo de evento: Congreso
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de presentación: 03/07/2015
Entidad organizadora: Universidad de Santiago de Compostela
Tipo de entidad: Universidad
Diseño de cuestionarios en el entorno Moodle y su uso como herramientas de autoaprendizaje-Poster.
- 4** **Nombre del evento:** Jornada sobre estrategias para la innovación de la actividad docente en Química Analítica: Contenidos y herramientas
Tipo de evento: Jornada
Ciudad de celebración: Alcalá de Henares, España
Fecha de presentación: 10/04/2014
Entidad organizadora: Universidad de Alcalá de Henares
El cuestionario como herramienta para la evaluación de la capacidad de auto-aprendizaje y autonomía del alumno-Poster.
- 5** **Nombre del evento:** V Jornada de innovación docente de la UVa "Innovar para crecer, crecer para innovar"
Tipo de evento: Jornada
Ciudad de celebración: Valladolid, España
Fecha de presentación: 12/12/2013
Entidad organizadora: Universidad de Valladolid
desarrollo de herramientas para la evaluación de la capacidad de auto-aprendizaje y autonomía del alumno-Poster.
- 6** **Nombre del evento:** I Jornadas sobre Convergencia Europea en los estudios de Química
Tipo de evento: Jornada
Ciudad de celebración: Valencia, España
Fecha de presentación: 29/06/2005
Entidad organizadora: Universitat de València
Tipo de entidad: Universidad
Experiencias docentes sobre el desarrollo de competencias en el ámbito de la Química.
- 7** **Nombre del evento:** Organización de las jornadas sobre: "Espacio Europeo de Educación Superior"
Tipo de evento: Jornada
Ciudad de celebración: Valladolid, España
Fecha de presentación: 05/2005
Entidad organizadora: Universidad de Valladolid
Tipo de entidad: Universidad
- 8** **Nombre del evento:** Jornada de Intercambio de Experiencias Innovadoras en Torno a la Convergencia Europea
Tipo de evento: Jornada
Ciudad de celebración: Valladolid, España
Fecha de presentación: 17/06/2005
Entidad organizadora: Universidad de Valladolid
Tipo de entidad: Universidad
Desarrollo de competencias para el trabajo en grupo en el ámbito de la Química.
- 9** **Nombre del evento:** XIX Encuentros de Didáctica de las Ciencias Experimentales
Tipo de evento: Congreso
Ciudad de celebración: Madrid, España
Fecha de presentación: 09/2000
Modelo de trabajo experimental para el laboratorio de química.



- 10 Nombre del evento:** III Congreso Internacional de Formación y Medios Audiovisuales
Tipo de evento: Congreso
Ciudad de celebración: Valladolid, España
Fecha de presentación: 07/2000
Experiencias del laboratorio de Química con apoyo audiovisual e informático.
- 11 Nombre del evento:** 26 Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Tipo de evento: Congreso
Ciudad de celebración: Cádiz,
Fecha de presentación: 08/1997
El vídeo como complemento a la enseñanza experimental en un laboratorio de química.
- 12 Nombre del evento:** 26 Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Tipo de evento: Congreso
Ciudad de celebración: Cádiz,
Fecha de presentación: 08/1997
Manual de experimentación básica en química.

Experiencia científica y tecnológica

Grupos/equipos de investigación, desarrollo o innovación

- 1 Nombre del grupo:** Unidad de Investigación Consolidada de la JCyL UIC 139
Objeto del grupo: Investigación
Código normalizado: UIC139
Entidad de afiliación: Universidad de Valladolid
Fecha de inicio: 05/2018
Clase de colaboración: Coautoría de publicaciones
Tipo de entidad: Universidad
Duración: 10 años
- 2 Nombre del grupo:** Química Teórica y Computacional (GIR reconocido)
Objeto del grupo: Investigación
Clase de colaboración: Coautoría de publicaciones
Entidad de afiliación: Universidad de Valladolid
Fecha de inicio: 2003
Tipo de entidad: Universidad
Duración: 10 años



Actividad científica o tecnológica

Proyectos de I+D+i financiados en convocatorias competitivas de Administraciones o entidades públicas y privadas

- 1 Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Jesús R. FLORES RODRIGUEZ(IP)
Entidad/es financiadora/s:
DGICYT (Subdirec. Gener. Coop. Inter.)
Nombre del programa: REFERENCIA: Acción Integrada Hispano Alemana.
Cód. según financiadora: Referencia 12B y26B
Fecha de inicio-fin: 01/01/1994 - 31/12/2895 **Duración:** 1 año - 11 meses - 30 días
Entidad/es participante/s: Universidad de Kassel (Alemania); Universidad de Valladolid
- 2 Nombre del proyecto:** Astroquímica computacional: Formación de moléculas prebióticas y predicción de parámetros espectroscópicos de moléculas relevantes (AYA2017-87515-P)
Entidad de realización: Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Valladolid, Castilla y León, España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo
Nº de investigadores/as: 5
Entidad/es financiadora/s:
Ministerio de Ciencia e Innovación. Universidades **Tipo de entidad:** Nacional
Ciudad entidad financiadora: Madrid, Comunidad de Madrid, España
Fecha de inicio-fin: 01/01/2018 - 31/12/2020 **Duración:** 3 años
- 3 Nombre del proyecto:** Procesos ion.molécula en fase gas: Síntesis interestelar de biomoléculas y reactividad de derivados halocarbonados (VA077U13)
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carmen Barrientos Benito (IP)
Nº de investigadores/as: 7
Entidad/es financiadora/s:
Junta de Castilla y León **Tipo de entidad:** Autonómica
Ciudad entidad financiadora: Valladolid, Castilla y León, España
Fecha de inicio-fin: 01/2014 - 12/2016 **Duración:** 3 años
Cuantía total: 30.000 €
- 4 Nombre del proyecto:** Estudio mecano-cuántico y cinético de sistemas y procesos ion-molécula de interés en Astroquímica y química sintética (CTQ2010-16864).
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carmen Barrientos Benito (IP)
Nº de investigadores/as: 5
Entidad/es financiadora/s:
Ministerio de Ciencia e Innovación.
Fecha de inicio-fin: 12/2010 - 30/06/2014 **Duración:** 3 años - 6 meses
Cuantía total: 71.390 €
- 5 Nombre del proyecto:** Reacciones ion-molécula en fase gas. Implicaciones en Química sintética y Astroquímica (VA040A09)
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carmen Barrientos Benito (IP)
Nº de investigadores/as: 5

**Entidad/es financiadora/s:**

Junta de Castilla y León

Tipo de entidad: Autonómica**Ciudad entidad financiadora:** Valladolid, Castilla y León, España**Fecha de inicio-fin:** 05/2009 - 12/2011**Duración:** 2 años - 7 meses**Cuantía total:** 42.100 €

- 6 Nombre del proyecto:** Reactividad en fase gas de cationes metálicos con CH₃X (X=H,F,Cl). La importancia de la formación de intermediatos en reactividad química (CTQ2007-67234-C02-02).

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carmen Barrientos Benito (IP)**Nº de investigadores/as:** 5**Entidad/es financiadora/s:**

Ministerio de Educación y Ciencia. Dirección General de Investigación.

Fecha de inicio-fin: 12/2007 - 12/2010**Duración:** 3 años**Cuantía total:** 77.440 €

- 7 Nombre del proyecto:** Estudio de la estructura y síntesis de compuestos de interés en química atmosférica y en el medio interestelar (VA077A06)

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carmen Barrientos Benito (IP)**Nº de investigadores/as:** 3**Entidad/es financiadora/s:**

Junta de Castilla y León

Tipo de entidad: Autonómico**Ciudad entidad financiadora:** Valladolid, Castilla y León, España**Fecha de inicio-fin:** 2006 - 12/2008**Duración:** 2 años**Cuantía total:** 13.300 €

- 8 Nombre del proyecto:** Estudio mecanístico de reacciones de interés en química atmosférica y astroquímica (CTQ2004-07405-C02-01).

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo Cabrerizo (IP)**Nº de investigadores/as:** 6**Entidad/es financiadora/s:**

Ministerio de Educación y Ciencia. Dirección General de Investigación.

Fecha de inicio-fin: 13/12/2004 - 12/12/2007**Duración:** 2 años - 11 meses - 30 días**Cuantía total:** 52.000 €

- 9 Nombre del proyecto:** Reacciones de interés en química medioambiental e interestelar: importancia de los procesos prohibidos por el spin. Acción Integrada Hispano-Italiana (HI2002-0025)

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo Cabrerizo (IP)**Nº de investigadores/as:** 5**Entidad/es financiadora/s:**

Ministerio de Ciencia y Tecnología

Fecha de inicio-fin: 01/01/2003 - 31/12/2004**Duración:** 1 año - 11 meses - 30 días**Entidad/es participante/s:** Universidad de Valladolid-Università de L'Aquila (Italia)**Cuantía total:** 10.400 €

- 10 Nombre del proyecto:** Reacciones de interés en química medioambiental, atmosférica e interestelar: importancia del cruce entre sistemas y de los complejos pre-reactivos (BQU2001-3660-C02-02).

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo Cabrerizo (IP)**Nº de investigadores/as:** 5**Entidad/es financiadora/s:**



Ministerio de Ciencia y Tecnología. Dirección General de Investigación.

Fecha de inicio-fin: 01/01/2002 - 31/12/2004

Duración: 3 años

Cuantía total: 43.873,88 €

11 Nombre del proyecto: Estructura y procesos de síntesis de compuestos policarbonados: estudio teórico (VA085/03)

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carmen Barrientos Benito (IP)

Nº de investigadores/as: 4

Entidad/es financiadora/s:

Junta de Castilla y León

Tipo de entidad: Autonómico

Ciudad entidad financiadora: Valladolid, Castilla y León, España

Fecha de inicio-fin: 01/01/2003 - 21/12/2004

Duración: 1 año - 11 meses - 30 días

Entidad/es participante/s: Universidad de Valladolid

Cuantía total: 13.500 €

12 Nombre del proyecto: Estudio teórico de reacciones ion-molécula en fase gas. Aplicaciones en Química Interestelar (VA 18/00B)

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo Cabrerizo (IP)

Entidad/es financiadora/s:

Junta de Castilla y León

Tipo de entidad: Autonómico

Ciudad entidad financiadora: Valladolid, Castilla y León, España

Fecha de inicio-fin: 01/01/2000 - 31/12/2002

Duración: 2 años - 11 meses - 30 días

Entidad/es participante/s: Universidad de Valladolid

13 Nombre del proyecto: Interacciones Moleculares en Mezclas Líquidas

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Pilar REDONDO CRISTOBAL (IP)

Entidad/es financiadora/s:

Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Nombre del programa: Ayuda de Investigación Grupos Jovenes

Cód. según financiadora: Programa 541 A. Aplicación 644

Fecha de inicio-fin: 05/1991 - 04/1992

Duración: 11 meses

14 Nombre del proyecto: Equipamento multidisciplinar en estructura molecular. Proyecto de adquisición de infraestructura científica (Fondos FEDER) Subvención concedida: 48.6 Mptas. (Petición conjunta de cuatro grupos de investigación del Departamento de Química Física).

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo Cabrerizo, José L. Alonso, Inmaculada Martín (IPs)

Fecha de inicio: 2000

Duración: 2 años

15 Nombre del proyecto: Estudio teórico de la estructura, reactividad y espectroscopía de especies atómicas y moleculares de interés en astroquímica.(PB97-0399-C03-01)

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Inmaculada Martín García (IP)

Entidad/es financiadora/s:

DGICYT

Fecha de inicio: 01/07/1998

Duración: 3 años

Entidad/es participante/s: Universidad de Oviedo; Universidad de Valladolid



C
V
n

CURRÍCULUM VITAE NORMALIZADO

2409d40eb8d7eab37bbd2ee457c9d56f

- 16 Nombre del proyecto:** Desarrollo de Técnicas de Flujo y de Relajación para Reacciones Rápidas. Aplicaciones a la Vitamina C en Microemulsiones como Disolvente
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José M. LEAL VILLALBA
Entidad/es financiadora/s:
Ministerio de Educación y Ciencia. DGICYT
Cód. según financiadora: PB92-1054
Fecha de inicio: 1993
Entidad/es participante/s: Universidad de Burgos
- 17 Nombre del proyecto:** Estudio teórico mediante métodos ab initio y semiempíricos, de propiedades espectrales y químicas de interés astrofísico. (PB91-0207-C02-02)
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Inmaculada Martín García (IP)
Entidad/es financiadora/s:
DGICYT
Fecha de inicio: 15/06/1992 **Duración:** 3 años
Entidad/es participante/s: Universidad de Oviedo; Universidad de Valladolid
- 18 Nombre del proyecto:** Estudio teórico de moléculas y procesos químicos interestelares. Acción Integrada Hispano-Francesa (Conv 1991 HF-304)
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo Cabrerizo
Entidad/es financiadora/s:
DGICYT (Subdirec. Gener. Coop. Inter.).
Fecha de inicio: 01/01/1992 **Duración:** 11 meses - 30 días
Entidad/es participante/s: Universidad de Oviedo-Ecole Normale Supérieure (Paris)
- 19 Nombre del proyecto:** Estudio teórico de moléculas y procesos químicos interestelares. Acción Integrada Hispano-Francesa (Conv 1990 HF-316)
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo Cabrerizo (IP)
Entidad/es financiadora/s:
DGICYT (Subdirec. Gener. Coop. Inter.).
Fecha de inicio: 01/01/1991 **Duración:** 11 meses - 30 días
Entidad/es participante/s: Universidad de Oviedo-Ecole Normale Supérieure (Paris)
- 20 Nombre del proyecto:** Estudio teórico de moléculas y procesos químicos interestelares. Acción Integrada Hispano-Francesa (Conv 1989 HF-236)
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo Cabrerizo (IP)
Entidad/es financiadora/s:
DGICYT (Subdirec. Gener. Coop. Inter.).
Fecha de inicio: 01/01/1990 **Duración:** 11 meses - 30 días
Entidad/es participante/s: Universidad de Oviedo-Ecole Normale Supérieure (Paris)
- 21 Nombre del proyecto:** Estudio teórico de procesos físicos y químicos en el medio interestelar (PB88-0343).
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Inmaculada Martín García (IP)
Entidad/es financiadora/s:
Ministerio de Educación y Ciencia. DGICYT
Fecha de inicio: 22/09/1989 **Duración:** 2 años - 11 meses - 29 días
Entidad/es participante/s: Universidad de Valladolid



- 22** **Nombre del proyecto:** Estudio Teórico de procesos Físicos y Químicos en el Medio Interestelar
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): 1
Entidad/es financiadora/s:
Ministerio de Educación y Ciencia. DGICYTREFERENCIA: PB88-0343
Fecha de inicio: 06/1989 **Duración:** 2 años - 6 meses

Actividades científicas y tecnológicas

Producción científica

Índice H: 19

Fecha de aplicación: 15/01/2018

Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1** Pilar Redondo; Antonio Largo; Carmen Barrientos. Structure and Spectroscopic Properties of Imine Acetaldehyde: a Possible Interstellar Molecule. MNRAS. 478, pp. 3042 - 3048. Royal Astronomical Society, 04/05/2018. Disponible en Internet en: <<http://iopscience.iop.org/article/10.3847/1538-4357/aa5ca4/meta>>.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 1 **Autor de correspondencia:** Si
Nº total de autores: 3
- 2** Pilar Redondo; Víctor M. Rayón; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Structural Trends in Monoboronyl Compounds: Analysis of the Interaction of Second-Row Elements with BO. The Journal of Physical Chemistry A. 122, pp. 398 - 409. ACS, 11/12/2017. Disponible en Internet en: <<http://iopscience.iop.org/article/10.3847/1538-4357/aa5ca4/meta>>.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 1 **Autor de correspondencia:** No
Nº total de autores: 4
- 3** Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Complex organic molecules formation in space through gas phase reactions: a theoretical approach. The Astrophysical Journal. 836, pp. 240-1 - 240-8. 20/02/2017. Disponible en Internet en: <<http://iopscience.iop.org/article/10.3847/1538-4357/aa5ca4/meta>>.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: Si
- 4** Álvaro Vega Vega; Antonio Largo; Pilar Redondo; Carmen Barrientos. Structure and spectroscopic properties of [Mg,C,N,O] isomers: plausible astronomical molecules. ACS Earth and Space Chemistry. 1, pp. 158 - 167. 2017.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 3 **Autor de correspondencia:** No
Nº total de autores: 4
- 5** Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Prediction of the spectroscopic parameters of new iron compounds: Hydride of iron cyanide/isocyanide, HFeCN/HFeNC. The Astrophysical Journal. 828 - 1, pp. 45-1 - 45-9. 01/09/2016. Disponible en Internet en: <<http://iopscience.iop.org/article/10.3847/0004-637X/828/1/45/meta>>.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: Si



- 6** Pilar Redondo; Antonio Largo; Carmen Barrientos. Is the reaction between formic acid and protonated aminomethanol a possible source of glycine precursors in the interstellar medium?. *Astronomy & Astrophysics*. 579, pp. A125-1 - A125-6. 2015. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201526548>>. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: Si
- 7** Pilar Redondo; Antonio Largo; Álvaro Vega-Vega; Carmen Barrientos. Structure and spectroscopic properties of neutral and cationic tetratomic [C,H,N,Zn] isomers: A theoretical study. *The Journal of Chemical Physics*. 142, pp. 184301-1 - 184301-11. 2015. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 8** Carmen Barrientos; Pilar Redondo; Henar Martínez; Antonio Largo. Computational Prediction of the Spectroscopic Parameters of Methanediol, an Elusive Molecule for Interstellar Detection. *The Astrophysical Journal*. 784, pp. 132-1 - 132-7. 2014. ISSN 0004-637X
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 9** Pilar Redondo; Antonio Largo; Víctor M. Rayón³; Germán Molpeceres; José Ángel Sordo; Carmen Barrientos. Halogen-Abstraction Reactions from Chloromethane and Bromomethane Molecules by Alkaline-Earth Monocations. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*. 16, pp. 16121 - 16136. 2014. ISSN 1463-9076
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 10** Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Peptide Bond Formation Through Gas-Phase Reactions in the Interstellar Medium: Formamide and Acetamide as Prototypes. *The Astrophysical Journal*. 793, pp. 32-1 - 32-8. 2014. ISSN 0004-637X
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: Si
- 11** Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Some Insights into Formamide Formation through Gas-Phase Reactions in the Interstellar Medium. *The Astrophysical Journal*. 780, pp. 181-1 - 181-7. 2014. ISSN 0004-637X
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: Si
- 12** Pilar Redondo; Henar Martínez; Alvaro Cimas; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Computational study of peptide bond formation in the gas phase through ion-molecule reactions. *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*. 15 - 31, pp. 13005 - 13012. 2013. ISSN 1463-9076
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 13** Carmen Barrientos; Víctor M. Rayón; Antonio Largo; José A. Sordo; Pilar Redondo. Kinetics Studies of the Reactions of Main Fourth-Period Monocations (Ga⁺, Ge⁺, As⁺, and Se⁺) with Methyl Fluoride. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A*. 117 - 33, pp. 7742 - 7753. 2013. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 14** Pilar Redondo; Adrian Varela-Álvarez; Víctor M. Rayón; Antonio Largo; José A. Sordo; Carmen Barrientos. Reactivity of First-Row Transition Metal Monocations (Sc⁺, Ti⁺, V⁺, Zn⁺) with Methyl Fluoride: A Computational Study. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A*. 117 - 14, pp. 2932 - 2943. 2013. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 15** Carmen Barrientos; Pilar Redondo; Laura Largo; Victor M. Rayon; Antonio Largo. Gas-Phase Synthesis of Precursors of Interstellar Glycine: a Computational Study of the Reactions of Acetic Acid with Hydroxylamine and its Ionized and Protonated Derivatives. *ASTROPHYSICAL JOURNAL*. 748 - 2, pp. 99-1 - 99-7. 04/2012. ISSN 0004-637X
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 16** Estefania F. Villanueva; Pilar Redondo; Victor M. Rayon; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Small carbides of third-row main group elements: structure and bonding in C3X compounds (X = K-Br). PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 14 - 43, pp. 14923 - 14932. 2012. ISSN 1463-9076
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 17** Carmen Barrientos; Pilar Redondo; Victor M. Rayon; Antonio Largo. Structure and stability of neutral cyanide complexes of copper and zinc. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 504 - 4-6, pp. 125 - 129. 03/2011. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 18** Adrian Varela-Alvarez; Jose Angel Sordo; Pilar Redondo; Antonio Largo; Carmen Barrientos; Victor M. Rayon. Theoretical study of the C-F bond activation in methyl fluoride by alkaline-earth metal monocations. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS. 128 - 4-6, pp. 609 - 618. 03/2011. ISSN 1432-881X
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 19** Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo; Victor M. Rayon. Neutral cyanide complexes of iron: Structure and stability. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 500 - 1-3, pp. 9 - 13. 11/2010. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 20** Victor M. Rayon; Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Structure and bonding in third-row main group dicarbides C2X (X=K-Br). JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 133 - 12, pp. 124306-1 - 124306-8. 09/2010. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 21** Laura Largo; Carmen Barrientos; Victor M. Rayon; Antonio Largo; Pilar Redondo. Could the reactions of formic acid with CH3NH2+/CH3NH3+ produce protonated glycine?. INTERNATIONAL JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY. 295 - 1-2, pp. 21 - 25. 07/2010. ISSN 1387-3806
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 22** L. Largo; P. Redondo; V. M. Rayon; A. Largo; C. Barrientos. The reaction between NH3+ and CH3COOH: a possible process for the formation of glycine precursors in the interstellar medium. ASTRONOMY & ASTROPHYSICS. 516, 06/2010. ISSN 0004-6361
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 23** Victor M. Rayon; Carmen Barrientos; Pilar Redondo; Antonio Largo. A computational study of arsenic dicarbide (C2As). CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 485 - 4-6, pp. 286 - 289. 01/2010. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 24** Pilar Redondo; Laura Largo; Carmen Barrientos. Charged FeCn clusters: A comparison with TMCn+/TMCn- (TM = Sc, Ti, V, Co and Zn, n=1-8) systems. CHEMICAL PHYSICS. 364 - 1-3, pp. 1 - 13. 10/2009. ISSN 0301-0104
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 25** Adrian Varela-Alvarez; V. M. Rayon; P. Redondo; C. Barrientos; Jose A. Sordo. Gas-phase reaction between calcium monocation and fluoromethane: Analysis of the potential energy hypersurface and kinetics calculations. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 131 - 14, pp. 144309-1 - 144309-11. 10/2009. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 26** Victor M. Rayon; Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Cyanide complexes of Ti(IV): A computational study. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 131 - 9, pp. 094507-1 - 094507-8. 09/2009. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 27** Laura Largo; Victor M. Rayon; Carmen Barrientos; Antonio Largo; Pilar Redondo. Stability of protonated and ionized hydroxylamine in the interstellar medium. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 476 - 4-6, pp. 174 - 177. 07/2009. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 28** Laura Largo; Carmen Barrientos; Pilar Redondo. Small iron doped carbon clusters: A comparison with early and late first-row transition metal doped clusters. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 130 - 13, 04/2009. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 29** Victor M. Rayon; Pilar Redondo; Haydee Valdes; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Polyisocyanides of Titanium. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 113 - 8, pp. 1574 - 1577. 02/2009. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 30** D. Talbi; A. P. Hickman; D. Kashinski; R. F. Malenda; P. Redondo. "A comparative study of the DR reactions of c-C₃H₃⁺ and l-C₃H₃⁺: Preliminary theoretical studies". J. of Phys.: Conf. Ser.192, pp. 012014-1 - 012014-6. 2009.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 31** Laura Largo; Victor M. Rayon; Carmen Barrientos; Antonio Largo; Pilar Redondo. Gas-Phase Reaction of NH₂(⁺) with Acetic Acid: Implications in Astrochemistry. JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION. 4 - 12, pp. 2085 - 2093. 12/2008. ISSN 1549-9618
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 32** Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. A density functional study of CoC_n (n=1-8) clusters: Structures and stabilities. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 108 - 10, pp. 1684 - 1695. 08/2008. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 33** Carmen Barrientos; Pilar Redondo; Antonio Largo. Structural and electronic properties of ZnC_n^{+/-} clusters. INTERNATIONAL JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY. 273 - 3, pp. 87 - 94. 06/2008. ISSN 1387-3806
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 34** Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Structures and stabilities of charged cobalt-doped carbon clusters. INTERNATIONAL JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY. 272 - 2-3, pp. 187 - 198. 05/2008. ISSN 1387-3806
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 35** Laura Largo; Alvaro Cimas; Pilar Redondo; Victor M. Rayon; Carmen Barrientos. Charged titanium-doped carbon clusters: Structures and energetics. INTERNATIONAL JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY. 266 - 1-3, pp. 50 - 61. 10/2007. ISSN 1387-3806
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 36** Pilar Redondo; Victor M. Rayon; Haydee Valdes; Carmen Barrientos; Antonio Largo. {A theoretical study of the [FeCN]⁺ system: Cyanide-isocyanide competition and isomerization barrier}. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 445 - 1-3, pp. 22 - 27. 09/2007. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 37** Victor M. Rayon; Pilar Redondo; Haydee Valdes; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Cyanides and isocyanides of first-row transition metals: Molecular structure, bonding, and isomerization barriers. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 111 - 28, pp. 6334 - 6344. 07/2007. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista

- 38** Victor M. Rayon; Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Structure and bonding in first-row transition metal dicarbide cations MC_2^+ . JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 111 - 28, pp. 6345 - 6353. 07/2007. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 39** Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Structures and stabilities of non-linear $VC_n^{+/-}$ ($n=1-8$) clusters. INTERNATIONAL JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY. 263 - 1, pp. 101 - 112. 05/2007. ISSN 1387-3806
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 40** Carmen Barrientos; Pilar Redondo; Antonio Largo. Structure and stability of small ZnC_n clusters. JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION. 3 - 2, pp. 657 - 664. 03/2007. ISSN 1549-9618
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 41** Laura Largo; Alvaro Cimas; Pilar Redondo; Victor M. Rayon; Carmen Barrientos. Structure of small TiC_n clusters: A theoretical study. CHEMICAL PHYSICS. 330 - 3, pp. 431 - 440. 11/2006. ISSN 0301-0104
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 42** Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Ionization potential and electron affinity of VC_n ($n=1-8$) open-chain clusters: A theoretical study. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM. 769 - 1-3, pp. 225 - 236. 09/2006. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 43** Victor M. Rayon; Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Structure and bonding in first-row transition-metal dicarbides: Are they related to the stability of met-cars?. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 12 - 26, pp. 6963 - 6975. 09/2006. ISSN 0947-6539
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 44** Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. Small carbon clusters doped with vanadium metal: A density functional study of VC_n ($n=1-8$). JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION. 2 - 3, pp. 885 - 893. 05/2006. ISSN 1549-9618
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 45** VM Rayon; P Redondo; C Barrientos; A Largo. Structure of binary titanium-carbon ions: A theoretical study of TiC_2^+ and $Ti_2C_4^+$. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 422 - 1-3, pp. 289 - 293. 04/2006. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 46** P Redondo; C Barrientos; A Largo. Small ScC_n cyclic clusters: A density functional study of their structure and stability. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 110 - 11, pp. 4057 - 4064. 03/2006. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 47** P Redondo; F Pauzat; Y Ellinger. Theoretical survey of the NH^+CH_3 potential energy surface in relation to Titan atmospheric chemistry. PLANETARY AND SPACE SCIENCE. 54 - 2, pp. 181 - 187. 02/2006. ISSN 0032-0633
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 48** P Redondo; C Barrientos; A Largo. Small carbon clusters doped with early transition metals: A theoretical study of ScC_n , ScC_n^+ , and ScC_n^- ($n=1-8$) open-chain clusters. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 109 - 38, pp. 8594 - 8603. 09/2005. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 49** P Redondo; C Barrientos; A Largo. Theoretical study of the structures and stabilities of small CaC_n , CaC_n^+ , and CaC_n^- ($n=1-8$) cyclic clusters. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 108 - 50, pp. 11132 - 11140. 12/2004. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 50** A Largo; P Redondo; C Barrientos. On the competition between linear and cyclic isomers in second-row dicarbides. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 126 - 44, pp. 14611 - 14619. 11/2004. ISSN 0002-7863
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 51** P Redondo; C Barrientos; A Largo. Structures and stabilities of CaC_3^+ and CaC_3H^+ isomers. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM. 709 - 1-3, pp. 143 - 155. 11/2004. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 52** A Largo; P Redondo; C Barrientos. Structure and properties of the open-chain calcium-doped carbon clusters CaC_n , CaC_n^+ , and CaC_n^- ($n=1-8$). JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 108 - 30, pp. 6421 - 6429. 07/2004. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 53** A Largo; P Redondo; C Barrientos. Theoretical study of possible ion-molecule reactions leading to precursors of glycine in the interstellar medium. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 98 - 4, pp. 355 - 360. 06/2004. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 54** P Redondo; C Barrientos; A Largo. Theoretical study of the structures and stabilities of AlC_n , AlC_n^+ , and AlC_n^- ($n=1-7$) monocyclic clusters. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 96 - 6, pp. 615 - 626. 02/2004. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 55** P Redondo; C Barrientos; A Cimas; A Largo. Structure and stability of small NaC_n , NaC_n^+ , and NaC_n^- clusters: A theoretical study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 108 - 1, pp. 212 - 224. 01/2004. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 56** P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. Theoretical study of the structures and stabilities of small CaC_n , CaC_n^+ , and CaC_n^- ($n=1-8$) cyclic clusters. J. PHYS. CHEM. A. 108, pp. 11132 - 11140. 2004.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 57** P Redondo; C Barrientos; A Largo. Structure and stability of binary calcium-carbon compounds: a comparative ab initio and DFT study of CaC_2 . CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 382 - 1-2, pp. 150 - 159. 11/2003. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 58** P Redondo; C Barrientos; A Cimas; A Largo. Theoretical study of small MgC_n , MgC_n^+ , and MgC_n^- cyclic clusters. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 107 - 32, pp. 6317 - 6325. 08/2003. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 59** P Redondo; C Barrientos; A Largo. Ionization and protonation of NaC_3 : a theoretical study. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM. 630 - SI, pp. 59 - 73. 07/2003. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 60** JR Redondo; P Redondo; A Largo. Theoretical study of the reaction of HCl with C_3H_2^+ : A possible source of carbon-chlorine compounds in space. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 107 - 30, pp. 5844 - 5853. 07/2003. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 61** P Redondo; C Barrientos; A Cimas; A Largo. Theoretical study of MgC_n , MgC_n^+ , MgC_n^- ($n=1-7$) open-chain clusters. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 107 - 23, pp. 4676 - 4682. 06/2003. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 62** JR Redondo; P Redondo; A Largo. Structures and stabilities of C_3Cl_2 and $C_3Cl_2^+$ isomers: a theoretical study. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM. 621 - 1-2, pp. 59 - 73. 02/2003. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 63** JR Redondo; P Redondo; A Largo. Reaction of $C_3H_2^+$ with atomic chlorine: A theoretical study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 106 - 26, pp. 6346 - 6351. 07/2002. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 64** A Largo; P Redondo; C Barrientos; LM Ziurys. Structures and stabilities of CaC_3 isomers. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 355 - 5-6, pp. 509 - 516. 04/2002. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 65** A Largo; P Redondo; C Barrientos. Theoretical study of AlC_n , AlC_n^+ , and AlC_n^- ($n=1-7$) clusters. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 106 - 16, pp. 4217 - 4225. 04/2002. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 66** C Barrientos; P Redondo; A Largo. Ionization and protonation of MgC_3 : A theoretical study. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 86 - 1, pp. 114 - 121. 01/2002. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 67** P Redondo; A Largo; F Garcia; C Barrientos. Theoretical study of AlC_3^+ . INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 84 - 6, pp. 660 - 669. 09/2001. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 68** C Barrientos; P Redondo; A Largo. Theoretical study of the structures and stabilities of NaC_3 isomers. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 343 - 5-6, pp. 563 - 570. 08/2001. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 69** A Largo; A Cimas; P Redondo; C Barrientos. Theoretical study of C_nCl , C_nCl^+ , C_nCl^- ($n=1-7$) clusters. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 84 - 1, pp. 127 - 135. 07/2001. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 70** P Redondo; C Barrientos; A Largo. Structures and stabilities of MgC_3 isomers: a theoretical study. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 335 - 1-2, pp. 64 - 70. 02/2001. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 71** C Barrientos; P Redondo; A Largo. Reaction of $C_3H_2^+$ with atomic nitrogen: A theoretical study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 104 - 49, pp. 11541 - 11548. 12/2000. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 72** P Redondo; JR Redondo; C Barrientos; A Largo. Theoretical study of the reaction of Cl^+ with C_3H_2 . JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 104 - 43, pp. 9733 - 9739. 11/2000. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 73** P Redondo; MJ Ruiz; R Boronat; C Barrientos; A Largo. Theoretical study of the reaction of CN with $C_2H_2^+$. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS. 104 - 3-4, pp. 199 - 202. 07/2000. ISSN 1432-881X
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 74** P Redondo; JR Redondo; A Largo. Structures and energies of the chlorine-substituted analogues of C₃H₂: an ab initio and density functional theory comparative study. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM. 505, pp. 221 - 232. 06/2000. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 75** C Barrientos; P Redondo; A Largo. Theoretical study of AlC₃: linear or cyclic ground state?. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 320 - 5-6, pp. 481 - 486. 04/2000. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 76** P Redondo; JR Redondo; C Barrientos; A Largo. Theoretical study of the C₃Cl radical and its cation. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 315 - 3-4, pp. 224 - 232. 12/1999. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 77** P Redondo; E Calleja; C Barrientos; A Largo. Theoretical study of the reaction of S⁺ with C₃H₂. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 103 - 45, pp. 9125 - 9131. 11/1999. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 78** C Barrientos; P Redondo; A Largo. Theoretical study of the reaction of S⁺ with acetylene. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 306 - 3-4, pp. 168 - 178. 06/1999. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 79** P Redondo; A Saguillo; C Barrientos; A Largo. Theoretical study of the reaction of Si⁺ with C₃H₂. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 103 - 17, pp. 3310 - 3320. 04/1999. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 80** P Redondo; A Saguillo; A Largo. Theoretical study of SiC₃⁺. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 102 - 22, pp. 3953 - 3958. 05/1998. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 81** JR Flores; P Redondo. A theoretical study of the dynamics of the reaction of P⁺ with ammonia. MOLECULAR PHYSICS. 92 - 4, pp. 743 - 755. 11/1997. ISSN 0026-8976
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 82** C. Barrientos; P. Redondo; A. Largo. Theoretical studies of interstellar molecules: structure and synthesis. Recent Reseach Develop. in Phys. Chem.1, pp. 51 - 57. 1997.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 83** JR FLORES; P REDONDO; S AZPELETA. A THEORETICAL-STUDY OF THE REACTION OF SI⁺ WITH AMMONIA. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 240 - 1-3, pp. 193 - 198. 06/1995. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 84** JR FLORES; P REDONDO. A THEORETICAL-STUDY OF THE REACTION OF P⁺ WITH WATER - POTENTIAL-ENERGY SURFACES AND REACTION DYNAMICS. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 230 - 4-5, pp. 358 - 364. 12/1994. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 85** JR FLORES; P REDONDO. HIGH-PRECISION ATOMIC COMPUTATIONS FROM FINITE-ELEMENT TECHNIQUES - 2ND-ORDER CORRELATION ENERGIES FOR BE, CA, SR, CD, BA, YB, AND HG. JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. 15 - 7, pp. 782 - 790. 07/1994. ISSN 0192-8651
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 86** JR FLORES; P REDONDO. COMPUTATION OF 2ND-ORDER CORRELATION ENERGIES USING A FINITE-ELEMENT METHOD FOR ATOMS WITH D-ELECTRONS. JOURNAL OF PHYSICS B-ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS. 26 - 15, pp. 2251 - 2261. 08/1993. ISSN 0953-4075
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 87** X LOPEZ; JM UGALDE; C BARRIENTOS; A LARGO; P REDONDO. THEORETICAL-STUDY OF POSSIBLE PROCESSES FOR THE INTERSTELLAR PRODUCTION OF PHOSPHORUS-COMPOUNDS - REACTION OF P+ WITH SH2. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 97 - 8, pp. 1521 - 1525. 02/1993. ISSN 0022-3654
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 88** JR FLORES; P REDONDO. ACCURATE 2ND-ORDER CORRELATION ENERGIES FOR MG AND AR. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 45 - 6, pp. 563 - 572. 1993. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 89** C. Barrientos; A.Largo; P. Redondo; F. Pauzat; Y. Ellinger. Theoretical study of a basic process in interstellar chlorine chemistry: Reaction of C+ with HCl. J. PHYS. CHEM.97, pp. 173 - 176. 1993.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 90** P REDONDO; A LARGO. PROTON AFFINITIES OF SNH AND HSN - AN ABINITIO STUDY OF THE STRUCTURES AND STABILITIES OF (H2NS)+. THEOCHEM-JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. 85, pp. 261 - 273. 01/1992. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 91** P REDONDO; Y ELLINGER; G BERTHIER; R CIMIRAGLIA. MOLECULAR CALCIUM IN INTERSTELLAR SPACE AND CIRCUMSTELLAR ENVELOPES - A POSSIBLE CANDIDATE - CAC2. ASTRONOMY AND ASTROPHYSICS. 247 - 1, pp. L1 - L4. 07/1991. ISSN 0004-6361
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 92** P. Redondo; A. Largo; C. Barrientos; J.M. Ugalde. "A theoretical study of the structures and stabilities of (H2PO)+ species and the proton affinities of HPO and POH". J. Phys. Chem.95, pp. 4318 - 4323. 1991.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 93** A. Largo; P. Redondo; C. Barrientos; J.M. Ugalde. "Theoretical Studies of possible Processes for the interstellar production of phosphorus compounds. Reaction of P+ with water". J. Phys. Chem.95, pp. 5443 - 5445. 1991.
Tipo de producción: Artículo científico
- 94** P REDONDO; JR FLORES; J LARGOCABRERIZO. MULTIPLE SOLUTIONS OF UNRESTRICTED HARTREE-FOCK EQUATIONS - THE SNH+ RADICAL AS AN EXAMPLE. JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. 10 - 3, pp. 295 - 301. 04/1989. ISSN 0192-8651
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista

Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

- 1** **Título del trabajo:** Hydrogenation of isocyanic acid on water ice surfaces: a computational approach
Nombre del congreso: Our Astro-Chemical History Past, Present, and Future
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Assen, Holanda
Fecha de celebración: 10/09/2018
Fecha de finalización: 14/09/2018
Pilar Redondo; Carmen Barrientos; Antonio Largo. 10/2014.



- 2** **Título del trabajo:** A computational kinetics study of the antioxidant activity of tryptamine
Nombre del congreso: 11th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA2018)
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Toledo, España
Fecha de celebración: 17/07/2018
Fecha de finalización: 19/07/2018
Henar Martínez; Antonio Largo; Pilar Redondo; Erika N. Bentz; Rosana M. Lobayan. 10/2014.
- 3** **Título del trabajo:** Complex organic molecules formation through the gas-phase reaction between HNO and CH₂CHOH₂⁺
Nombre del congreso: 11th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA2018)
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Toledo, España
Fecha de celebración: 17/07/2018
Fecha de finalización: 19/07/2018
Pilar Redondo; Henar Martínez; Antonio Largo; Carmen Barrientos. 10/2014.
- 4** **Título del trabajo:** Structural trends in monoboronyl compounds
Nombre del congreso: 11th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA2018)
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Toledo, España
Fecha de celebración: 17/07/2018
Fecha de finalización: 19/07/2018
Carmen Barrientos; Pilar Redondo; Víctor M. Rayón; Antonio Largo. 10/2014.
- 5** **Título del trabajo:** Resiliemce of the ice in the interstellar medium
Nombre del congreso: European Conference on Laboratory Astrophysics, ECLA-2016
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Madrid, España
Fecha de celebración: 21/11/2016
Fecha de finalización: 25/11/2016
Pilar Redondo; Alexis Markovits; Françoise Pauzat; Yves Ellinger. 10/2014.
- 6** **Título del trabajo:** Possible ion-molecule reactions leading to interstellar glycine
Nombre del congreso: "10th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC-2014)". Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Santiago, Chile
Fecha de celebración: 10/2014
Fecha de finalización: 10/10/2014
A. Largo; Henar Martínez; P. Redondo; C. Barrientos. 10/2014.



- 7 Título del trabajo:** Reactivity of Alkaline-Earth Monocations with Halomethane Molecules: A Computational Kinetic Study
Nombre del congreso: “10th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC-2014)”. Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Santiago, Chile
Fecha de celebración: 10/2014
Fecha de finalización: 10/10/2014
C. Barrientos; P. Redondo; A. Largo; Víctor M. Rayón; Germán Molpeceres; José A. Sordo. 10/2014.
- 8 Título del trabajo:** Formation of peptide bond in space through gas-phase reactions: Formamide and acetamide
Nombre del congreso: “10th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC-2014)”. Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Santiago, Chile
Fecha de celebración: 10/2014
Fecha de finalización: 10/10/2014
P. Redondo; A. Largo; C. Barrientos. 10/2014.
- 9 Título del trabajo:** Gas-phase reactions of metal monocations with CH₃X(X=Cl,Br): Mechanism for the C-X bond activation
Nombre del congreso: “9th Congress of Electronic Structure: Principles and Applications-ESPA2014”. Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Ciudad de celebración: Badajoz, España
Fecha de celebración: 07/2014
C. Barrientos; P. Redondo; A. Largo; V.M. Rayón; G. Molpeceres; J.A. Sordo. 12/2011.
- 10 Título del trabajo:** Molecular structure of plutonium tricarbide: a computational study
Nombre del congreso: “9th Congress of Electronic Structure: Principles and Applications-ESPA2014”. Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Ciudad de celebración: Badajoz, España
Fecha de celebración: 07/2014
A. Largo; G. Molpeceres; C. Barrientos; V.M. Rayón; P. Redondo. 12/2011.
- 11 Título del trabajo:** Structure and spectroscopic properties of neutral and cationic tetratomic [C,H,N,Zn] isomers: a theoretical study
Nombre del congreso: “9th Congress of Electronic Structure: Principles and Applications-ESPA2014”. Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Ciudad de celebración: Badajoz, España
Fecha de celebración: 07/2014
P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 12/2011.
- 12 Título del trabajo:** Study of ion-molecule reactions leading to interstellar glycine
Nombre del congreso: “9th Congress of Electronic Structure: Principles and Applications-ESPA2014”. Internacional
Ámbito geográfico: Internacional no UE



Ciudad de celebración: Badajoz, España
Fecha de celebración: 07/2014
H. Martínez; P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 12/2011.

- 13 Título del trabajo:** Reactivity of first-row transition metal monocations with methyl fluoride: a computational kinetic study
Nombre del congreso: "VIIIth Congress of the International Society of Theoretical Chemical Physics". Internacional
Ciudad de celebración: Budapest, Hungría
Fecha de celebración: 25/08/2013
Fecha de finalización: 31/08/2013
C. Barrientos; P. Redondo; Víctor M. Rayón; A. Largo; J.A. Sordo. 2031.
- 14 Título del trabajo:** Theoretical studies of possible routes for the synthesis of amino acids in space
Nombre del congreso: "VIIIth Congress of the International Society of Theoretical Chemical Physics". Internacional
Ciudad de celebración: Budapest, Hungría
Fecha de celebración: 25/08/2013
Fecha de finalización: 31/08/2013
A. Largo; P. Redondo; C. Barrientos; H. Martínez. 2031.
- 15 Título del trabajo:** C-F activation by main-fourth-period mono-cations
Nombre del congreso: "QUITEL 2013". Internacional
Ciudad de celebración: Granada, España
Fecha de celebración: 30/06/2013
P. Redondo; C. Barrientos; V.M. Rayón; A. Largo; José A. Sordo. 30/06/2013.
- 16 Título del trabajo:** Ion-molecule reactions in gas phase: aplicaciones in Astrochemistry and halocarbon chemistry
Nombre del congreso: "QUITEL 2013". Internacional
Ciudad de celebración: Granada, España
Fecha de celebración: 30/06/2013
A. Largo; P. Redondo; C. Barrientos; Víctor M. Rayón; H. Martínez. 30/06/2013.
- 17 Título del trabajo:** Peptide bond formation in the gas phase: on the mechanism of the reaction of protonated glycine with neutral glycine
Nombre del congreso: "QUITEL 2013". Internacional
Ciudad de celebración: Granada, España
Fecha de celebración: 30/06/2013
H. Martínez-García; A. Largo; P. Redondo; A. Cimas; C. Barrientos. 30/06/2013.
- 18 Título del trabajo:** Small carbides of third-row main group elements: Structure and bonding
Nombre del congreso: Theoretical Chemistry in Spain told by women A symposium in Honour of Rosa Caballol
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Intervención por: Por invitación
Ciudad de celebración: Tarragona, España
Fecha de celebración: 30/01/2013
Fecha de finalización: 31/01/2013
P. Redondo; E.F. Villanueva; V.M. Rayón; A. Largo; C.Barrientos.



- 19 Título del trabajo:** Structure and bonding in small carbides
Nombre del congreso: XXVIIIth Congress of theoretical Chemists of Latin Expression QUITEL 2012.
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Natal-RN,
Fecha de celebración: 02/12/2012
Fecha de finalización: 07/12/2012
C. Barrientos; P. Redondo; V.M. Rayón; E. Fernández; A. Largo.
- 20 Título del trabajo:** Exploration of Different Routes for the Formation of Formamide in Space
Nombre del congreso: XXVIIIth Congress of theoretical Chemists of Latin Expression QUITEL 2012.
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Natal-RN,
Fecha de celebración: 12/2012
P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 02/2007.
- 21 Título del trabajo:** Peptide bond formation through gas-phase ion-molecule reactions: A Computational study
Nombre del congreso: XXVIIIth Congress of theoretical Chemists of Latin Expression QUITEL 2012.
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Natal-RN,
Fecha de celebración: 12/2012
A. Largo; H. Martínez; A. Cimas; P. Redondo; C. Barrientos. 12/2012.
- 22 Título del trabajo:** Applications of Computational Chemistry in Astrochemistry: possible ion-molecule routes toward interstellar glycine
Nombre del congreso: Theory and Applications of Computational Chemistry TACC 2012.
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote **Intervención por:** Por invitación
Ciudad de celebración: Pavia, Italia
Fecha de celebración: 02/09/2012
Fecha de finalización: 07/09/2012
C. Barrientos; P. Redondo; A. Largo.
- 23 Título del trabajo:** Searching for the Origin of Biomolecules in Space
Nombre del congreso: VIIIth Congress on Electronic Structure: Principles and Applications ESPA 2012.
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Barcelona, España
Fecha de celebración: 26/06/2012
Fecha de finalización: 29/06/2012
P. Redondo; A. Largo; C. Barrientos.
- 24 Título del trabajo:** Structure and bonding in third-row main group tricarbides
Nombre del congreso: VIIIth Congress on Electronic Structure: Principles and Applications ESPA 2012.
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Barcelona, España
Fecha de celebración: 26/06/2012



Fecha de finalización: 29/06/2012

P. Redondo; E. Fernández; V.M. Rayón; A. Largo; C. Barrientos.

- 25 Título del trabajo:** Gas phase reactions between fluoremethane and third-row monocations.
Nombre del congreso: "QUITEL 2011". Internacional
Ciudad de celebración: Riviera Maya, México
Fecha de celebración: 12/2011
P. Redondo; C. Barrientos; V.M. Rayón; J.A. Sordo. 12/2011.
- 26 Título del trabajo:** On the search for synthetic routes leading to interstellar glycine.
Nombre del congreso: "QUITEL 2011". Internacional
Ciudad de celebración: Riviera Maya, México
Fecha de celebración: 12/2011
C. Barrientos; P. Redondo; L. Largo; V.M. Rayón; A. Largo. 12/2011.
- 27 Título del trabajo:** About the role of water ice in the formation of water ice.
Nombre del congreso: "The Chemical Cosmos". Internacional
Ciudad de celebración: Valletta, Malta
Fecha de celebración: 10/2011
F. Pauzat; P. Redondo; Y. Ellinger; A. Markovits. 10/2011.
- 28 Título del trabajo:** Competitive kinetical study of the C-F bond activation in methyl fluoride by third-row cations in phase gas.
Nombre del congreso: "WATOC-2011". Internacional
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 07/2011
P. Redondo; J.A. Sordo; C. Barrientos; V.M. Rayón; A. Largo. 07/2011.
- 29 Título del trabajo:** Computational Astrochemistry: Ion-molecule processes in the synthesis of interstellar glycine.
Nombre del congreso: "WATOC-2011". Internacional The World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 07/2011
A. Largo; P. Redondo; C. Barrientos; L. Largo; V.M. Rayón. 07/2011.
- 30 Título del trabajo:** Neutral polycyanides of transitions metals.
Nombre del congreso: "WATOC-2011". Internacional
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 07/2011
C. Barrientos; P. Redondo; V.M. Rayón; A. Largo. 07/2011.
- 31 Título del trabajo:** Reactions of $\text{NH}_2\text{OH}^+/\text{NH}_3\text{OH}^+$ with acetic acid.
Nombre del congreso: "WATOC-2011". Internacional
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 07/2011
L. Largo; P. Redondo; V.M. Rayón; C. Barrientos; A. Largo. 07/2011.
- 32 Título del trabajo:** About the role of ice in the reconstruction of ice
Nombre del congreso: "Molecular Universe (IAU Symposium 280)". Internacional
Ciudad de celebración: Toledo, España



Fecha de celebración: 06/2011

F. Pauzat; P. Redondo; A. Markovits; Y. Ellinger. 06/2011.

- 33 Título del trabajo:** Could the reactions of acetic acid with hydroxylamine-derived ions produce glycine precursors
Nombre del congreso: "Molecular Universe (IAU Symposium 280)". Internacional
Ciudad de celebración: Toledo, España
Fecha de celebración: 06/2011
P. Redondo; L. Largo; C. Barrientos; V.M. Rayón; A. Largo. 06/2011.
- 34 Título del trabajo:** C-F bond activation in methyl fluoride by alkaline-earth metal cations: analysis of the potential energy hypersurface and chimetics calculations
Nombre del congreso: "36ème CHITEL". Internacional
Ciudad de celebración: Anglet, Francia
Fecha de celebración: 09/2010
P. Redondo; A. Varela-Álvarez; J.A. Sordo; A. Largo; C. Barrientos; V.M. Rayón. 09/2010.
- 35 Título del trabajo:** Reactions of formic acid with $\text{CH}_3\text{NH}_2^+/\text{CH}_3\text{NH}_3^+$: astrochemical implications
Nombre del congreso: "7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications". Internacional
Ciudad de celebración: Oviedo, España
Fecha de celebración: 07/2010
P. Redondo; L. Largo; C. Barrientos; V.M. Rayón; A. Largo. 07/2010.
- 36 Título del trabajo:** Structure and bonding in third-row main group dicarbides C_2X ($\text{X}=\text{K}-\text{Br}$)
Nombre del congreso: "7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications". Internacional
Ciudad de celebración: Oviedo, España
Fecha de celebración: 07/2010
C. Barrientos; V.M. Rayón; P. Redondo; A. Largo. 07/2010.
- 37 Título del trabajo:** Structure and stability of neutral cyanide complexes of iron
Nombre del congreso: "7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications". Internacional
Ciudad de celebración: Oviedo, España
Fecha de celebración: 07/2010
A Largo; V.M. Rayón; P. Redondo; C. Barrientos. 07/2010.
- 38 Título del trabajo:** Complejos de Ti(IV) con Ligandos CN⁻: Un Estudio Teórico
Nombre del congreso: "QUITEL09". Internacional
Ciudad de celebración: San Andrés, Colombia
Fecha de celebración: 09/2009
P. Redondo; V.M. Rayón; C. Barrientos; A. Largo. 09/2009.
- 39 Título del trabajo:** Estructura y propiedades de FeC_n , FeC_n^+ y FeC_n^- ($n = 1-8$)
Nombre del congreso: "XXXV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina-QUITEL09". Internacional
Ciudad de celebración: San Andrés, Colombia
Fecha de celebración: 09/2009
L. Largo; C. Barrientos; P. Redondo. 09/2009.
- 40 Título del trabajo:** Estudio Teórico de Reacciones Ion-Molécula de Posible Relevancia en la Síntesis Interestelar de Glicina
Nombre del congreso: "QUITEL09". Internacional

Ciudad de celebración: San Andrés, Colombia

Fecha de celebración: 09/2009

A. Largo; P. Redondo; L. Largo; V.M. Rayón; C. Barrientos. 09/2009.

41 Título del trabajo: Estudio termodinámico y cinético de la reacción entre fluorometano y el monocatión calcio

Nombre del congreso: "QUITEL09". Internacional

Ciudad de celebración: San Andrés, Colombia

Fecha de celebración: 09/2009

A. Varela-Álvarez; V.M. Rayón; P. Redondo; C. Barrientos; J.A. Sordo. 09/2009.

42 Título del trabajo: Some Ion-Molecule Reactions Related to the Interstellar Formation of Glycine

Nombre del congreso: "13th ICQC". Internacional

Ciudad de celebración: Helsinki, Finlandia

Fecha de celebración: 06/2009

P. Redondo; L. Largo; V.M. Rayón; C. Barrientos; A. Largo. 06/2009.

43 Título del trabajo: Theoretical study of Neutral Ti[CN]_n complexes

Nombre del congreso: "13th ICQC". Internacional

Ciudad de celebración: Helsinki, Finlandia

Fecha de celebración: 06/2009

C. Barrientos; V.M. Rayón; P. Redondo; H. Valdés; A. Largo. 06/2009.

44 Título del trabajo: A possible ion-molecule reaction leading to precursor of glycine in the interstellar medium

Nombre del congreso: "ESPA 2008". Internacional

Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España

Fecha de celebración: 09/2008

L. Largo; P. Redondo; V.M. Rayón; C. Barrientos; A. Largo. 09/2008.

45 Título del trabajo: Computational study of the reactivity of metal cations with methyl fluoride

Nombre del congreso: "WATOC 2008". Internacional

Ciudad de celebración: Sydney, Australia

Fecha de celebración: 09/2008

C. Barrientos; A. Varela; V.M. Rayón; P. Redondo; L. Largo; A. Cimas; J.A. Sordo. 09/2008.

46 Título del trabajo: Cyanide vs. isocyanide competition in transition metal complexes

Nombre del congreso: "WATOC 2008". Internacional

Ciudad de celebración: Sydney, Australia

Fecha de celebración: 09/2008

A. Largo; V.M. Rayón; H. Valdés; P. Redondo; C. Barrientos. 09/2008.

47 Título del trabajo: Gas-phase reactivity of bare metal cations with CH₃F: the importance of formation of intermediates in chemical reactivity

Nombre del congreso: "6th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications: ESPA2008". Internacional

Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España

Fecha de celebración: 09/2008

C. Barrientos; A. Varela; V.M. Rayón; P. Redondo; L. Largo; A. Cimas; J.A. Sordo. 09/2008.



- 48** **Título del trabajo:** Small carbon clusters doped with first-row transition metals: structures and stabilities
Nombre del congreso: "WATOC 2008". Internacional
Ciudad de celebración: Sydney, Australia
Fecha de celebración: 09/2008
P. Redondo; C. Barrientos; L. Largo; A. Largo. 09/2008.
- 49** **Título del trabajo:** Stability trends on small first-row transition metal carbides TMC_n ($n = 1-8$)
Nombre del congreso: "ESPA 2008". Internacional
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 09/2008
P. Redondo; C. Barrientos; L. Largo; A. Largo. 09/2008.
- 50** **Título del trabajo:** Transition metal cyanide complexes: an ab initio study on the cyanide-isocyanide competition
Nombre del congreso: "ESPA 2008". Internacional
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 09/2008
V.M. Rayón; P. Redondo; H. Valdés; C. Barrientos; A. Largo. 09/2008.
- 51** **Título del trabajo:** Complejos de metales de transición con el ion cianuro: un análisis de la competencia cianuro isocianuro
Nombre del congreso: "CHITEL 08". Internacional
Ciudad de celebración: Cetraro, Italia
Fecha de celebración: 07/2008
A. Largo; V.M. Rayón; H. Valdés; P. Redondo; C. Barrientos. 07/2008.
- 52** **Título del trabajo:** A systematic study of cyanides and isocyanides of first-row transition metals
Nombre del congreso: "ICCMSE 2007". Internacional
Ciudad de celebración: Corfu, Grecia
Fecha de celebración: 09/2007
P. Redondo; V.M. Rayón; H. Valdés; C. Barrientos; A. Largo. 09/2007.
- 53** **Título del trabajo:** Complejos de Fe^{+2} con ligandos CN^- : Estudio teórico de la competencia entre la formación de cianuros e isocianuros
Nombre del congreso: "XXXIII QUITEL". Internacional
Ciudad de celebración: La Habana, Cuba
Fecha de celebración: 09/2007
V.M. Rayón; H. Valdés; P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2007.
- 54** **Título del trabajo:** Complex of Fe^{+2} with CN^- ligands: A theoretical Study of cyanide vs. isocyanide competition
Nombre del congreso: "ICCMSE 2007". Internacional
Ciudad de celebración: Corfu, Grecia
Fecha de celebración: 09/2007
V.M. Rayón; H. Valdés; P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2007.
- 55** **Título del trabajo:** Estructura molecular, enlace y barreras de isomerización de cianuros e isocianuros de metales de transición
Nombre del congreso: "XXXIII QUITEL". Internacional
Ciudad de celebración: La Habana, Cuba
Fecha de celebración: 09/2007



A. Largo; P. Redondo; V.M. Rayón; H. Valdés; C. Barrientos. 09/2007.

- 56 Título del trabajo:** Estudio comparativo de la estructura y estabilidad en pequeños clusters de carbono monosustituidos por V y Co
Nombre del congreso: "XXXIII QUITEL". Internacional
Ciudad de celebración: La Habana, Cuba
Fecha de celebración: 09/2007
P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2007.
- 57 Título del trabajo:** Estudio teórico de la reacción entre el catión NH_2^+ y el ácido acético
Nombre del congreso: "XXXIII QUITEL". Internacional
Ciudad de celebración: La Habana, Cuba
Fecha de celebración: 09/2007
L. Largo; P. Redondo; C. Barrientos; V.M. Rayón; A. Largo. 09/2007.
- 58 Título del trabajo:** Theoretical study of the reaction between NH_2^+ and CH_3COOH
Nombre del congreso: "International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering ICCMSE 2007". Internacional
Ciudad de celebración: Corfú, Grecia
Fecha de celebración: 09/2007
L. Largo; P. Redondo; C. Barrientos; V.M. Rayón; A. Largo. 09/2007.
- 59 Título del trabajo:** Cyanides and isocyanides of first-row transition metals: molecular structure, bonding and isomerization barriers
Nombre del congreso: "Molecular Quantum Mechanics Conference - Analytic Gradients and Beyond". Internacional
Ciudad de celebración: Budapest, Hungría
Fecha de celebración: 06/2007
V.M. Rayón; P. Redondo; H. Valdés; C. Barrientos; A. Largo. 06/2007.
- 60 Título del trabajo:** Molecular structure and stability of the first-row transition metal cyanides and isocyanides
Nombre del congreso: "Molecules in Space & Laboratory". Internacional
Ciudad de celebración: París, Francia
Fecha de celebración: 05/2007
P. Redondo; V.M. Rayón; H. Valdés; C. Barrientos; A. Largo. 05/2007.
- 61 Título del trabajo:** Structure and bonding in first-row transition metal dicarbide cations
Nombre del congreso: "ESPA-2006". Internacional
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 07/2006
C. Barrientos; V.M. Rayón; P. Redondo; A. Largo. 07/2006.
- 62 Título del trabajo:** Structure and stabilities of XC_2^+ and X_2C_4^+ ($\text{X}=\text{Ti}, \text{V}$) ions: A theoretical study
Nombre del congreso: "Electronic Structure: Principles and applications-ESPA-2006". Internacional
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 07/2006
P. Redondo; V.M. Rayón; C. Barrientos; A. Largo. 07/2006.



- 63** **Título del trabajo:** Structure and stability of TiCn (n=2-8) clusters
Nombre del congreso: "ESPA-2006". Internacional
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 07/2006
L. Largo; A. Cimas; P. Redondo; V.M. Rayón; C. Barrientos; A. Largo. 07/2006.
- 64** **Título del trabajo:** Estudio teórico de la estructura y propiedades electrónicas de clusters lineales VCn (n=1-8)
Nombre del congreso: "XXXI QUITEL". Internacional
Ciudad de celebración: Isla Margarita, Venezuela
Fecha de celebración: 10/2005
P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 10/2005.
- 65** **Título del trabajo:** Molecular structure and bonding in first-row transition metal dicarbides
Nombre del congreso: "28th International Symposium on Free Radicals". Internacional
Ciudad de celebración: Leysin, Suiza
Fecha de celebración: 09/2005
V.M. Rayón; P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2005.
- 66** **Título del trabajo:** Estudio teórico de la competencia entre isómeros cíclicos y lineales en compuestos XC2 (X=Na-Cl)
Nombre del congreso: "XXX QUITEL". Internacional
Ciudad de celebración: Oporto, Portugal
Fecha de celebración: 09/2004
P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2004.
- 67** **Título del trabajo:** On the competition between cyclic and linear isomers in second-row dicarbides
Nombre del congreso: "ESPA-2004". Internacional
Ciudad de celebración: Valladolid, España
Fecha de celebración: 09/2004
A. Largo; P. Redondo; C. Barrientos. 09/2004.
- 68** **Título del trabajo:** Small carbon clusters doped with early transition metals: a theoretical study of ScCn (n=1-8) compounds
Nombre del congreso: "ESPA-2004". Internacional
Ciudad de celebración: Valladolid, España
Fecha de celebración: 09/2004
P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2004.
- 69** **Título del trabajo:** Structure and properties of open-chain and monocyclic calcium-doped carbon clusters CaCn, CaCn+, and CaCn- (n=1-8)
Nombre del congreso: "ESPA-2004". Internacional
Ciudad de celebración: Valladolid, España
Fecha de celebración: 09/2004
C. Barrientos; P. Redondo; A. Largo. 09/2004.
- 70** **Título del trabajo:** "Compuestos binarios policarbonados de Calcio: un estudio teórico"
Nombre del congreso: "29ème Congrès International des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine". Internacional
Ciudad de celebración: Marrakech, Marruecos
Fecha de celebración: 09/2003



P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2003.

- 71 Título del trabajo:** "Theoretical studies of small carbon clusters doped with alkaline and alkaline-earth elements"
Nombre del congreso: "Xlth International Congress of Quantum Chemistry 2003". Internacional
Ciudad de celebración: Bonn, Alemania
Fecha de celebración: 07/2003
P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 07/2003.
- 72 Título del trabajo:** "DFT study of small Magnesium-doped carbon clusters"
Nombre del congreso: "ESPA2002. Electronic Structure: Principles and Applications". Internacional
Ciudad de celebración: Sevilla, España
Fecha de celebración: 09/2002
P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2002.
- 73 Título del trabajo:** "Theoretical study of AlC_n , AlC_n^+ and AlC_n^- ($n=1-7$) clusters. Open-chain and monocyclic structures"
Nombre del congreso: "Fourth European Conference on Computational Chemistry (EUCCO-CC4)". Internacional
Ciudad de celebración: Assisi, Italia
Fecha de celebración: 09/2002
P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2002.
- 74 Título del trabajo:** "Theoretical study of the reaction of HCl with $C_3H_2^+$: A possible source of carbon-chlorine compounds in space"
Nombre del congreso: "ESPA2002. Electronic Structure: Principles and Applications". Internacional
Ciudad de celebración: Sevilla, España
Fecha de celebración: 09/2002
P. Redondo; J.R. Redondo; A. Largo. 09/2002.
- 75 Título del trabajo:** "Ionization and protonation of NaC_3 : a theoretical study"
Nombre del congreso: "6th World Congress of Theoretically Oriented Chemists (WATOC02)". Internacional
Ciudad de celebración: Lugano, Suiza
Fecha de celebración: 08/2002
P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 08/2002.
- 76 Título del trabajo:** "Étapas prohibidas por el espín en procesos globalmente permitidos por el espín. Aplicaciones en Química Interestelar"
Nombre del congreso: "27ème Congrès des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine". Internacional
Ciudad de celebración: Toulouse, Francia
Fecha de celebración: 09/2001
A. Largo; M. Aschi; C. Barrientos; P. Redondo. 09/2001.
- 77 Título del trabajo:** "Procesos ion-molécula para la formación de compuestos cloro-carbonados"
Nombre del congreso: "27ème Congrès des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine". Internacional
Ciudad de celebración: Toulouse, Francia
Fecha de celebración: 09/2001
J.R. Redondo; P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2001.



- 78 Título del trabajo:** "The role of spin-forbidden steps in globally spin-allowed processes. The $S^+ + C_2H_2$ reaction as a test case"
Nombre del congreso: "Electronic Structure and Chemical Reactivity. An International Symposium in Honor of Prof. Juan Bertran". Internacional
Ciudad de celebración: Bellaterra, España
Fecha de celebración: 09/2001
A. Largo; M. Aschi; C. Barrientos; P. Redondo. 09/2001.
- 79 Título del trabajo:** "Theoretical study of C_nCl , C_nCl^+ , C_nCl^- ($n=1-7$) Clusters"
Nombre del congreso: "Electronic Structure: Prediction and Applications"
Ciudad de celebración: San Sebastián, España
Fecha de celebración: 10/2000
A. Cimas; P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 10/2000.
- 80 Título del trabajo:** "Theoretical study of MgC_3 and its cationic and protonated derivatives"
Nombre del congreso: "Electronic Structure: Prediction and Applications". Internacional
Ciudad de celebración: San Sebastián, España
Fecha de celebración: 10/2000
P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 10/2000.
- 81 Título del trabajo:** "Theoretical study of C_nCl , C_nCl^+ , C_nCl^- ($n=1-7$) Clusters"
Nombre del congreso: "Third European Conference on Computational Chemistry, EUCO-CC3". Internacional
Ciudad de celebración: Budapest, Hungría
Fecha de celebración: 09/2000
A. Cimas; P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 09/2000.
- 82 Título del trabajo:** "Experiencias del laboratorio de Química con apoyo audiovisual e informático"
Nombre del congreso: "III Congreso Internacional de Formación y Medios Audiovisuales". Internacional
Ciudad de celebración: Valladolid, España
Fecha de celebración: 07/2000
M.J. Insausti; P. Redondo; E. Charro. 07/2000.
- 83 Título del trabajo:** "Theoretical study of Aluminum-Carbon compounds: structure and synthesis of AlC_3 "
Nombre del congreso: "Xth International Congress of Quantum Chemistry". Internacional
Ciudad de celebración: Menton, Francia
Fecha de celebración: 06/2000
F. García; P. Redondo; C. Barrientos; A. Largo. 06/2000.
- 84 Título del trabajo:** "Estudio teórico de la reacción $S^+ + C_3H_2$ "
Nombre del congreso: "XXV Congreso Internazionale dei Chimici Teorici di Espressione Latina"
Ciudad de celebración: Nápoles, Italia
Fecha de celebración: 09/1999
P. Redondo; E. Calleja; C. Barrientos; A. Largo. 09/1999.
- 85 Título del trabajo:** "Procesos ion-molécula en la formación de cianopoliacetilenos: estudio teórico de la reacción $C_2H_2^+ + CN$ "
Nombre del congreso: "XXV Congreso Internazionale dei Chimici Teorici di Espressione Latina". Internacional
Ciudad de celebración: Napoles, Italia
Fecha de celebración: 09/1999



P. Redondo; R. Boronat; C. Barrientos; A. Largo. 1999.

- 86 Título del trabajo:** "Structure and formation of carbon-chlorine compounds in space"
Nombre del congreso: "World Congress of Theoretically Oriented Chemists (WATOC)". Internacional
Ciudad de celebración: Londres, Reino Unido
Fecha de celebración: 08/1999
P. Redondo; J.R. Redondo; A. Largo. 08/1999.
- 87 Título del trabajo:** "Theoretical studies of interstellar molecules: structure and synthesis"
Nombre del congreso: "Workshop on Computational Chemistry". Internacional
Ciudad de celebración: Miraflores de la Sierra, España
Fecha de celebración: 06/1998
C. Barrientos; P. Redondo; A. Largo. 06/1998.
- 88 Título del trabajo:** "Theoretical studies of possible processes for the interstellar production of silicon-carbon compounds"
Nombre del congreso: "Second European Conference on Computational Chemistry". Internacional
Ciudad de celebración: Lisboa, Portugal
Fecha de celebración: 1997
P. Redondo; A. Sagüillo; C. Barrientos; A. Largo. 1997.
- 89 Título del trabajo:** "Estudio Dinámico de la reacción entre P+ y amoniaco"
Nombre del congreso: "XXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina". Internacional
Ciudad de celebración: Cáceres, España
Fecha de celebración: 1996
J.R. Flores; P. Redondo. 1996.
- 90 Título del trabajo:** "Estudio teórico de la reacción del catión fósforo P+ con metanol"
Nombre del congreso: "XXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina". Internacional
Ciudad de celebración: Cáceres, España
Fecha de celebración: 1996
P. Redondo; J.R. Flores. 2020.
- 91 Título del trabajo:** "Accurate second-order correlation energies for Mg and Ar"
Nombre del congreso: "Fifth SCF users group meeting". Internacional
Ciudad de celebración: Namur,
Fecha de celebración: 1992
P. Redondo; J.R. Flores. 1992.
- 92 Título del trabajo:** "Activation and excess thermodynamic properties of the binary mixtures N-methylpyrrolidone with n-alkanols at different temperatures"
Nombre del congreso: "V International Conference on Thermodynamics of Solutions of Nonelectrolytes". Internacional
Ciudad de celebración: Oporto, Portugal
Fecha de celebración: 1992
P. Merino; R. Alcalde; P. Redondo; C. Herrera; B. García; J.M. Leal. 1992.



- 93** **Título del trabajo:** "Etude Theorique de C2Ca: Cette molécule peut-elle etre observee dans le milieu interstellaire?"
Nombre del congreso: "XIX Congresso Internazionale dei Chimici Teorici dei Paesi di Espressione Latina".
Ciudad de celebración: Roma, Italia
Fecha de celebración: 1990
P. Redondo; G. Berthier; Y. Ellinger; R. Cimiraglia. 1990.
- 94** **Título del trabajo:** "Structure et stabilité d'une nouvelle molécule cyclique à rechercher dans l'espace: C2Ca"
Nombre del congreso: "Journées d'étude: Physico-Chimie liée aux Missions spatiales"
Ciudad de celebración: Meudon, Francia
Fecha de celebración: 1990
Y. Ellinger; P. Redondo; G. Berthier. 1990.
- 95** **Título del trabajo:** "Estudio ab initio del sistema SNH+: Una posible especie interestelar"
Nombre del congreso: "XVII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina".
Ciudad de celebración: Peñíscola, España
Fecha de celebración: 1987
P. Redondo; J.R. Flores; J. Largo Cabrerizo. 1987.

Gestión de I+D+i y participación en comités científicos

Organización de actividades de I+D+i

Título de la actividad: International Conference on Electronic Structure : Principles and Applications (ESPA-2004)

Tipo de actividad: Organización de Congreso

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Ciudad entidad convocante: Valladolid, España

Fecha de inicio-fin: 15/09/2004 - 17/09/2004

Evaluación y revisión de proyectos y artículos de I+D+i

- 1** **Funciones desempeñadas:** Referee de diversas revistas científicas internacionales
Ciudad entidad realización: Estados Unidos de América
Fecha de inicio-fin: 2006 - 2015
- 2** **Funciones desempeñadas:** Referee de Proyecto FONCYT. Argentina
Entidad de realización: Ministerio de Ciencia Tecnología e Innovación Productiva
Ciudad entidad realización: Argentina
Fecha de inicio-fin: 2014 - 2014

Otros méritos

Estancias en centros de I+D+i públicos o privados

- 1** **Entidad de realización:** Université Pierre et Marie Curie
Facultad, instituto, centro: Laboratoire de Chimie Théorique
Ciudad entidad realización: París, Francia
Fecha de inicio-fin: 03/07/2016 - 11/07/2016 **Duración:** 8 días
Entidad financiadora: COST Action CM1401
Objetivos de la estancia: STSM (short term scientific mission)COST Action CM1401
- 2** **Entidad de realización:** Université Pierre et Marie Curie
Facultad, instituto, centro: Laboratoire de Chimie Théorique
Ciudad entidad realización: París, Francia
Fecha de inicio: 2011 **Duración:** 2 meses
Entidad financiadora: DGICYT (Subdirec. Gener. Coop. Inter.)
Objetivos de la estancia: subvención de Junta de Castilla de León dentro del Plan de Movilidad de Personal Investigador
- 3** **Entidad de realización:** Université Pierre et Marie Curie
Facultad, instituto, centro: Laboratoire de Chimie Théorique
Ciudad entidad realización: París, Francia
Fecha de inicio: 2009 **Duración:** 2 meses
Entidad financiadora: DGICYT (Subdirec. Gener. Coop. Inter.)
Objetivos de la estancia: Ayuda de la Universidad de Valladolid dentro del Plan de Movilidad de Personal Investigador
- 4** **Entidad de realización:** l'Ecole Normale Supérieure
Facultad, instituto, centro: Laboratoire d'Etude Theorique des Milieux Extremes
Ciudad entidad realización: París, Francia
Fecha de inicio: 1998 **Duración:** 3 meses
Entidad financiadora: DGICYT (Subdirec. Gener. Coop. Inter.)
Objetivos de la estancia: Contratado/a
- 5** **Entidad de realización:** l'Ecole Normale Supérieure
Facultad, instituto, centro: Laboratoire de Radioastronomie Millemétrique
Ciudad entidad realización: París, Francia
Fecha de inicio: 1994 **Duración:** 2 meses
Entidad financiadora: DGICYT (Subdirec. Gener. Coop. Inter.)
Objetivos de la estancia: Ayuda de la Universidad de Valladolid dentro del Plan de Movilidad de Personal Investigador
- 6** **Entidad de realización:** l'Ecole Normale Supérieure
Facultad, instituto, centro: Laboratoire de Radioastronomie Millemétrique
Ciudad entidad realización: París, Francia
Fecha de inicio: 1991 **Duración:** 1 mes
Entidad financiadora: DGICYT (Subdirec. Gener. Coop. Inter.)
Objetivos de la estancia: Acción Integrada Hispano-Francesa



- 7** **Entidad de realización:** Universidad de Kassel
Facultad, instituto, centro: Facultad de Física
Fecha de inicio: 1991 **Duración:** 14 días
Objetivos de la estancia: Acción Integrada Hispano Alemana
- 8** **Entidad de realización:** l'Ecole Normale Supérieure
Ciudad entidad realización: París, Francia
Fecha de inicio: 1989 **Duración:** 3 meses
Entidad financiadora: MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA
Objetivos de la estancia: Doctorado/a
- 9** **Entidad de realización:** l'Ecole Normale Supérieure
Facultad, instituto, centro: Laboratoire de Radioastronomie Millemétrique
Ciudad entidad realización: París, Francia
Fecha de inicio: 1989 **Duración:** 15 meses
Entidad financiadora: MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA
Objetivos de la estancia: Posdoctoral

Ayudas y becas obtenidas

- 1** **Nombre de la ayuda:** Beca de Perfeccionamiento para Doctores, Subprograma MEC/MRES de Becas en Francia
Finalidad: Posdoctoral
Entidad concesionaria: MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA
Fecha de concesión: 01/12/1989 **Duración:** 14 meses
Fecha de finalización: 31/01/1991
- 2** **Nombre de la ayuda:** Beca del Plan de Formación del Personal Investigador (Programa General)
Finalidad: Predoctoral
Entidad concesionaria: MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA
Fecha de concesión: 01/01/1986 **Duración:** 3 años - 11 meses
Fecha de finalización: 30/11/1989
- 3** **Nombre de la ayuda:** Ayuda para estancia corta en el extranjero dentro del P.F.P.I.
Finalidad: Estancia corta dentro del período predoctoral
Entidad concesionaria: MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA
Fecha de concesión: 01/02/1989 **Duración:** 3 meses
Fecha de finalización: 30/04/1989
- 4** **Nombre de la ayuda:** Beca de Colaboración
Finalidad: Beca de Colaboración en Departamentos Universitarios
Entidad concesionaria: MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA
Fecha de concesión: 01/10/1984 **Duración:** 12 meses
Fecha de finalización: 30/09/1985
- 5** **Nombre de la ayuda:** Subvención de Junta de Castilla de León dentro del Plan de Movilidad de Personal Investigador
Finalidad: Estancias de Investigadores en centros extranjeros
Entidad concesionaria: Junta de Castilla y León **Tipo de entidad:** Público



Fecha de concesión: 2011

Duración: 2 meses

6 Nombre de la ayuda: Ayuda del Plan de Movilidad de Personal Investigador de la Universidad de Valladolid (Modalidad Doctores)

Finalidad: Estancias cortas en otros laboratorios

Entidad concesionaria: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Fecha de concesión: 2009

Duración: 2 meses

7 Nombre de la ayuda: Beca de la Unión Europea del programa Training and Mobility of Researchers (TMR),
Finalidad: Ayuda para asistencia a para la asistencia al congreso "Second European Conference on Computational Chemistry"

Entidad concesionaria: Unión Europea

Fecha de concesión: 1997

8 Nombre de la ayuda: Ayuda del Plan de Movilidad de Personal Investigador de la Universidad de Valladolid (Modalidad Doctores)

Finalidad: Estancias cortas en otros laboratorios

Entidad concesionaria: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Fecha de concesión: 1994

Duración: 2 meses

Períodos de actividad investigadora

Nº de tramos reconocidos: 5

Entidad acreditante: Comisión Nacional Evaluadora de la Actividad Científica (CNEA)

Tipo de entidad: Agencia Estatal

Fecha de obtención: 31/12/2017

Acreditaciones/reconocimientos obtenidos

1 Descripción: Evaluación positiva de seis tramos docentes (quinquenios)

Entidad acreditante: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Fecha del reconocimiento: 2017

2 Descripción: Excelente en el Programa Docencia UVa 2012/2013 de Evaluación de la calidad de la actividad docente

Entidad acreditante: Universidad de Valladolid

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad acreditante: Valladolid, España

Fecha del reconocimiento: 28/06/2013

Resumen de otros méritos

1 Descripción del mérito: Coordinadora del segundo curso del grado en Química

Entidad acreditante: Facultad de Ciencias-Universidad de Valladolid

Ciudad entidad acreditante: Valladolid,

Fecha de concesión: 09/2014



- 2** **Descripción del mérito:** Acreditada para el Cuerpo Docente de Catedráticos de Universidad
Entidad acreditante: Consejo de Universidades. **Tipo entidad:** Agencia Estatal
Comisión de Acreditación de Catedráticos de
Universidad de Ciencias
Ciudad entidad acreditante: España
Fecha de concesión: 04/12/2012
- 3** **Descripción del mérito:** Coordinadora de la Sección Departamental de Química Física
Entidad acreditante: Departamento de Química Física y Química Inorgánica **Tipo entidad:** Universidad
Ciudad entidad acreditante: Valladolid,
Fecha de concesión: 19/11/2010

Dr. Xavier Giménez Curriculum Vitae



Personal Data

Name: Francesc Xavier Giménez Font

Birth Place and Date: Barcelona, 23–05–1963

Family: Married to Immaculada Adsuar, 2 sons: Gerard (b. 1993) and Laura (b. 1998).

Personal Address: C/ Salvador Codina, 15. 08140 Caldes de Montbui (Barcelona)

Phone: +34 93 403 4020 (Office) +34 93 865 4055 (Home) +34 699 55 0589 (Cellular)

e-mail: xgimenez@ub.edu

twitter: @xgimenezub

facebook: <https://www.facebook.com/xavier.gimenez.39>

LinkedIn: www.linkedin.com/in/xaviergimenezfontUB

ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-7003-1713>

Education, Academic and Professional Activities

1977–1981: High School: Institut “Manolo Hugué”, Caldes de Montbui (Barcelona).

1981–1986: Facultat de Química, Universitat de Barcelona. 1986: Degree in Chemistry, Majors in Physical Chemistry. Overall Grade: A.

1986–1987: I.B.M.-Universitat de Barcelona Grant. Departament de Química Inorgànica, Universitat de Barcelona.

1987–1988: F.P.I. Pre-doctoral Grant, Departament de Química Física, Universitat de Barcelona.

1988–1990: Visiting Predoctoral Researcher, Dipartimento di Chimica, Università di Perugia (Italy), Prof. Antonio Laganà (8 months).

1989–1993: Assistant Professor, Departament de Química Física, Universitat de Barcelona.

Jan. 1991: Ph.D. in Chemistry, Physical Chemistry. Supervisors: Antonio Laganà (Università di Perugia, Italy), Antonio Aguilar and Josep M. Lucas (Universitat de Barcelona).

1991–1992: Visiting Postdoc Researcher, Departament de Química, Universitat Autònoma de Barcelona, Prof. José M. Lluch (5 months).

1992–1992: Invited Postdoc Researcher, CNRS-Observatoire de Paris, Meudon (France), Prof. Jean-Michel Launay (1 month).

1993–cont: Professor, Departament de Química Física, Universitat de Barcelona.

1996–1996: Visiting Researcher, Dipartimento di Chimica, Università di Perugia (Italia), Prof. Vincenzo Aquilanti (1 month).

- 1999–2000:** Research visiting scholar, Department of Chemistry, University of California (EE.UU.), Prof. William H. Miller (12 months).
- 2004–2006:** Secretary, Departament de Química Física, Universitat de Barcelona.
- 2013–2014:** Visiting Researcher, Matgas Institute, Bellaterra (Spain). Prof. Lourdes Vega (6 months).
- 2018–cont:** UB representative at EUA (European Universities Association), Learning and Teaching Innovation Working Group.

Teaching

Theory, Problems and Laboratory teaching of (Chemistry Degree, unless stated):

- Molecular Spectroscopy
- Introduction to Spectroscopy
- Chemistry, Environmental Sciences Degree
- Computational Chemistry
- Introduction to Numerical Programming; Fortran Language.
- Applied Informatics; Fortran Language, Chemical Engineering & Materials Engineering Degrees
- Basic Physical Chemistry Lab.: Thermodynamics and Chemical Kinetics
- Chemistry, Geological Engineering Degree
- Environmental Chemistry
- Physical Chemistry of Materials, Materials Engineering Degree
- Introduction to Numerical Programming; Python Language.
- Applied Thermodynamics, Chemical Engineering Degree
- Molecular Dynamics, Theoretical and Computational Chemistry Master

Teaching Innovation

Participation in 4 projects (1 as principal researcher), funded by Universitat de Barcelona and Generalitat de Catalunya.

Principal Researcher, Project: “Self–study and Metacognition strategies for University STEM subjects”. Universitat de Barcelona, 2014–cont.

Creator of **SABER Synchronous Flipped Classroom Teaching Method**, Universitat de Barcelona, 2015:

- <https://www.investigacionyciencia.es/blogs/fisica-y-quimica/39/posts/s-a-b-e-r-ensear-casi-sin-clases-magistrales-i-atrevmonos-14163>;
- <https://www.investigacionyciencia.es/blogs/fisica-y-quimica/39/posts/s-a-b-e-r-ensear-casi-sin-clases-magistrales-ii-hagmoslo-14170>.

Publications

90+ research papers in international journals (*Journal of Chemical Physics*, *Journal of Physical Chemistry A*, *Chemical Physics Letters*, ...), mainly in Computational and Theoretical Chemistry. Ca. 1400 citations according to ISI records (Feb 2017).

Basic Research keywords: *Elementary Chemical Reactions, Reaction Dynamics, Quantum Mechanics, Semiclassical Mechanics, Numerical Integration Methods, N-body problem, Tunnel Effect, Time-dependent molecular processes, Bohmian Mechanics.*

Applied Research keywords: *Gas Adsorption, Porous Solids, Hydrocarbons, Interfacial Tension, Wettability, CO₂ capture.*

120+ popular science papers, mainly in the local journal "Montbui", Science and Society Section and Scilogs Blog Section of the Popular Science journal "Investigación y Ciencia". Main Topics: *Chemistry, Molecules, Hydrogen Economy, Sustainable Energy Resources, Education Policy.*

Published 2 books on Chemistry Teaching.

Published 1 book on Popular Science: "*L'Aire que Respiram*", UB Edicions, Barcelona, 2013 (Catalan); "*El Aire que Respiramos*", UB Edicions, Barcelona, 2018 (Spanish).

Selected research publications

- 1) X. Giménez, J.M. Lucas, A. Aguilar and A. Laganà: "*Calculated versus measured vibrational state specific reactivity of H+F₂*". *Journal of Physical Chemistry* **97**, 8578 (1993).
- 2) F. Huarte-Larrañaga, X. Giménez and A. Aguilar: "*The application of complex absorbing potentials to an invariant embedding scattering method: I. Theory and computational details*". *Journal of Chemical Physics* **109**, 5761 (1998).
- 3) F. Huarte-Larrañaga, X. Giménez, J.M. Lucas, A. Aguilar and J.M. Launay: "Detailed energy dependences of cross sections and rotational distributions for the $Ne + H_2^+ \rightarrow NeH^+ + H$ reaction". *Journal of Physical Chemistry A*, **104**, 10227 (2000).
- 4) R. Gelabert, X. Giménez, M. Thoss, H. Wang and W.H. Miller: "*Semiclassical description of diffraction and its quenching by the forward-backward version of the initial value representation*". *Journal of Chemical Physics* **114**, 2572 (2001).
- 5) J. González, X. Giménez and J.M. Bofill: "*A restricted quantum reaction-path Hamiltonian: theory, discrete variable representation propagation algorithm, and applications*". *Journal of Chemical Physics* **131**, 054108 (2009).
- 6) A.S. Sanz, X. Giménez, J.M. Bofill, S. Miret-Artés: "*Understanding chemical reactions within a generalized Hamilton-Jacobi framework*". *Chemical Physics Letters* **478**, 89 (2009).
- 7) X. Giménez and J.M. Bofill: "*Accurate deep tunneling description by the classical Schrödinger equation*". *Quantum Trajectories*, **CCP6**, 62 (2012).
- 8) H. Prats, D. Bahamon, G. Alonso, X. Giménez, P. Gamallo and R. Sayós: "*Optimal faujasite structures for combustion CO₂ capture and separation in different swing adsorption processes*". *Journal of CO₂ utilization* **19**, 100 (2017).

Conferences

30 Conferences delivered in international Universities and Meetings, Congresses and Workshops, on research topics.

150 conferences delivered on popular science subjects & university teaching, in Primary, Secondary, High Schools, Universities, as well as Professional Organizations.

Communications in Meetings

Over 120 communications in national and international meetings.

Meeting Organization

1. 6th European Workshop on Molecular Spectroscopy and Photon Induced Dynamics, Sant Feliu de Guíxols, May 1991. Member of the Organizing Comitee
2. Curso Breve sobre cálculo paralelo y aplicaciones científicas, Barcelona, February 1993. Secretary of the Organizing Comitee.
3. Workshop on Exact and Approximate Methods in Theoretical Reaction Dynamics, Barcelona, September 1996. Secretary of the Organizing Comitee.

Undergraduate Students

1. Yolanda Quirós, 1996.
2. José Miguel Ortega, 2004.
3. Francisco Saiz, 2015.
4. Sara Broto, 2016.
5. Oriol Sánchez, 2017.
6. Laura Arévalo, 2017.
7. Marta Tur, 2018.
8. Maria Corbella, 2018.
9. Victor Dieste, 2018.
10. Anna Moreno, 2018.

Graduate, Master Students

11. Xavier Grande, 1993.
12. Juan Arjona, 1995.
13. Fermin Huarte, 1997.
14. Javier González, 2001.
15. Osvaldo Gervasi, 2004.
16. María Fernanda González, 2004.
17. Antoni Aguilar–Mogas, 2007.
18. Marc Caballero, 2009.
19. Núria Sambola, 2015.
20. Catalina Dupuy, 2018.

Ph. D. Students, year of Ph.D. Diploma.

1. Fermin Huarte, 1999.
2. Javier Gonzalez, 2005.
3. María Fernanda González, 2007.
4. Antoni Aguilar–Mogas, 2010.
5. Osvaldo Gervasi, 2012.
6. Marc Caballero, 2013.

PostDoc Students

1. Dario de Fazio, 1996–1997.
2. Noelia Faginas, 2001.
3. Daniel Bahamón, 2016–cont.

Visiting Researchers

1. Uwe Manthe, Bielefeld Universität, Germany, 2002.
2. Emilio Martínez, Universidade de Santiago de Compostela, 2007.
3. Rigoberto Hernández, Georgia Institute of Technology, USA, 2008.

4. Fateme Keshavarz, Univ. of Shiraz, Iran. 2015–2016.
5. Nadia Balucani, Univ. of Perugia, Italy. 2016.
6. Angelica Vega, Universidad de Chile, Chile. 2017.
7. Gustavo Castro, Universidad de Chile, Chile. 2017.
8. Rogério Matias, Instituto Politécnico de Viséu, Portugal. 2018.

Project and Research Contracts

Participation in 28 research and teaching innovation projects, funded by Generalitat de Catalunya, Spanish Ministerio de Educación y Ciencia, and European Union.

1 research contract with private companies.

Consultant Activity

2000–cont Acted as consultant on Physical Chemistry subjects, for companies of the Barcelona Metropolitan area.

Other Relevant Activities

1. Software Development for Inorganic Chemistry Teaching, 1986-1987.
2. Students Prize, Societat Catalana de Química, 1988.
3. Organization of a Conference Series: “*Converses de Química Física Contemporània*”, Departament de Química Física, Universitat de Barcelona, 1995-1996.
4. Project Director: “*Desarrollo de material curricular para la docencia de las ciencias, ESO y Bachillerato*”, in collaboration with Prof. Angelica Stacy, Department of Chemistry and Lawrence Hall of Science, University of California, Berkeley, 1999-2000.
5. Technical Review: “*Introducción a la Química Computacional*”, authors G. Cuevas, F. Cortés and A. Vela, Fondo de Cultura Económica, México, 2000.
6. ANEP Evaluator, Ministerio de Ciencia e Innovación. 2006–2010.
7. External Advisor, Full Professorship of Prof. Rigoberto Hernandez, Georgia Institute of Technology, Atlanta (USA). 2009.
8. Chemistry, University Expert for the Media (Press, TV, Radio), 2009–cont.
9. Technical Review: “*Química Orgánica*”, F. Klein (Author), Editorial Médica Panamericana, Buenos Aires, 2013.
10. AQU Evaluator, Generalitat de Catalunya, 2014–cont.
11. CAIDUB Board Member, Universitat de Barcelona, 2017–cont.



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Dr. Xavier Giménez Font
Teaching Innovation & Science Outreach Curriculum



Societies and Dissemination programs

Member of SCQ (Societat Catalana de Química): 1986–cont.
Member of RSEF (Real Sociedad Española de Física): 1988–cont.
Member of ACCC (Associació Catalana de Comunicació Científica): 2014–cont.
Member of UB–Divulga, Toc–Toc Program, Universitat de Barcelona: 2017–cont.

Selected Teaching Innovation & Science Dissemination Articles

- “*Reacciones Químicas Oscilantes*”, Suplemento de Ciencia y Tecnología, La Vanguardia Journal, 1989.
- “*Simulació de Reaccions Químiques*”, Teraflopp Journal, 1995.
- “*Femtoquímica*”, Butlletí de la Societat Catalana de Química, 2000.
- “*La Misteriosa Física Quàntica*”, Montbui Journal, 2006.
- “*Biodiésels*”, APECPAE Journal, 2006.
- “*Sobre el Pla de Bolonya*”, Montbui Journal, 2009.
- “*El Laser, 50 anys*”, Montbui Journal, 2010.
- “*Química Computacional e Industria*”, BioSciences Lab. Journal, 2011.
- “*El Bosó de Higgs*”, Montbui Journal, 2011.
- “*Com tenim la Capa d’Ozó?*”, Montbui Journal, 2014.
- “*Desinfectar con agua*”, ConcienciaEco Digital Journal, 2015.
- “*La capa de ozono y el efecto invernadero no tienen relación*”, ConcienciaEco Digital Journal, 2016.
- “*SABER 2.0 in STEM: Rewarded Correction and Subject Content – Active Learning Practical Matching Strategies*”, REIRE Journal, 2018.

Blogs

Science Blog in *Scilogs*, Investigación y Ciencia Journal, on “Química, Aire y Ambiente”. 2014–cont: <http://www.investigacionyciencia.es/blogs/fisica-y-quimica/39/posts>. Published 35 articles.

Blog on Environmental Chemistry, Environmental Science and Engineering Professionals. 2014–cont.: <http://www.i-ambiente.es/?q=blogs/xavier-gimenez-font>.

Books

Chemistry Teaching:

- “*Química Ambiental: Itinerari Ambiental de Castellciuró a Santa Creu d’Olorda*”, Edicions UB, Barcelona, 2011.
- “*El principi d’Avogadro*”, Societat Catalana de Química, Barcelona, 2012.

Popular Science:

- “*L’Aire que Respiram*”, Col·lecció Catàlisi, UB Edicions, Barcelona, 2013. 380 pages.
- “*El Aire que Respiramos*”, Col·lecció Catàlisi, UB Edicions, Barcelona, 2018, 380 pages (in press).
- “*Química, Cambio Climático y Matemáticas*”, (To be published, 2019).

Multimedia

- Software Development for Inorganic Chemistry Teaching, 1986-1987. Programs “GINY” (Molecular Structure), “MAGNET” (Molecular Magnetism), “SIMULKIN” (Chemical Kinetics).
- Multimedia education material, web-based project: “Idees i vincles en el segle XX. La Ciència”. J. Ignasi Ribas (Coord.). Chemistry Section author. Generalitat de Catalunya, 2003. <http://www.xtec.cat/monografics/seglexx/help/GuiaDidactica.pdf>
- Video on “Química Teòrica i Computacional”, 11 minutes. Main author, also contributed by Lourdes Vega and Jean Didier Maréchal, Xarxa de Recerca en Química Teòrica de Catalunya, 2013. <https://www.youtube.com/watch?v=Kk7Lk6C51MA#t=16> and <http://www.xrqtc.com/index.php/es/>.
- L’Aula inversa, Portal “Metodologies actives i TIC”. Universitat de Barcelona, Sept. 2016. <https://www.ub.edu/portal/web/metodologies/aula-inversa> .

Conferences & Short Courses

1. “*La Universitat*”, Escola Pia, Caldes de Montbui, 2003.
2. “*El forat d’Ozó*”, Ateneu de Caldes de Montbui, 2003.
3. “*L’Economia de l’Hidrogen*”, Ateneu de Caldes de Montbui, 2003.
4. “*El futur ja és aquí: el cotxe d’hidrogen*”, Escola Pia, Caldes de Montbui, 2005.
5. “*Experiències tecnològiques innovadores per reduir els efectes del transport i la mobilitat sobre el canvi climàtic: L’Economia de l’Hidrogen*”, Col·legi d’Arquitectes de Catalunya, Barcelona, 25/Nov/2005.
6. “*Les piles d’hidrogen: són ara una alternativa viable per a la mobilitat i el transport?*”, Jornades sobre l’Energia com a Recurs, Facultat de Biologia, Universitat de Barcelona, 18–19/May/2006.
7. “*L’origen de l’Univers, l’origen de la vida*”, Escola Pia, Caldes de Montbui, 2007.
8. “*Un Viatge per l’Univers*”, Escola Montbui, Caldes de Montbui, 2007.
9. “*El cotxe d’Hidrogen*”, IES Ramon Casas, Palau Solità i Plegamans, 2007.
10. “*Un viatge per l’Univers*”, Escola El Farell, Caldes de Montbui, 2008.

11. "*El cotxe d'Hidrogen*", IES Ramon Casas, Palau Solità i Plegamans, 2008.
12. "*El cotxe elèctric i el cotxe d'Hidrogen*", IES Ramon Casas, Palau Solità i Plegamans, 2009.
13. "*L'Aire que Respiram*", Llibreria Alibri, Barcelona, 2014.
14. "*L'Aire que Respiram*", Les Cases dels Mestres, Caldes de Montbui, 2014.
15. "*L'Aire que Respiram*", IES Manolo Hugué, Caldes de Montbui, 2014.
16. "*L'Aire que Respiram*", Escola Ferran i Clua, Barcelona, 2014.
17. "*L'Aire que Respiram*", Universitat de Barcelona, Barcelona, 2014.
18. "*L'Aire que Respiram*", IES L'Alzina, Barcelona, 2014.
19. "*L'Aire que Respiram*", IES Moianès, Moià, 2014.
20. "*L'Aire que Respiram*", IES Moianès, Moià, 2014.
21. "*L'Aire que Respiram*", IES Pere Calders, Bellaterra, 2014.
22. "*L'Aire que Respiram*", IES Pere Calders, Bellaterra, 2014.
23. "*L'Aire que Respiram*", IES Martí Dot, Sant Feliu de Llobregat, 2014.
24. "*Llibres de Divulgació Científica*", Màster de Comunicació Científica, Univ. Barcelona, 2014.
25. "*L'Aire que Respiram*", Escola Pia, Caldes de Montbui, 2014.
26. "*L'Aire que Respiram*", IES Vinyet, Sitges, 2014.
27. "*Química en Viu*", Special Seminar at Escola d'Adults, Caldes de Montbui, 2014.
28. "*L'Aire que Respiram*", Escola Sant Elies, Vilafranca del Penedès, 18/May/2015.
29. "*Llibres de Divulgació Científica*", Màster de Comunicació Científica, Univ. Barcelona, 17/Oct/2015.
30. "*L'Aire que Respiram*", Escola Garrofer, Viladecans, 12/Nov/2015.
31. "*L'Aire que Respiram*", La Setmana de la Ciència, IES Ramon Casas, Palau Solità i Plegamans, 18/Nov/2015.
32. "*Química en Viu*", Special Seminar at Escola d'Adults, Caldes de Montbui, 18/Nov/2015.
33. "*L'Aire que Respiram*", Closing Talk at Ciència amb Xocolata: Course "**Català per Estudiants de Mobilitat**", Universitat de Barcelona, 24/Nov/2015.
34. "*Les microones i les ones de radio: què són i com ens afecten*", Cicle "**Llum i Ciència**", Universitat de Barcelona, 9/Dec/2015.
35. "*Fem possible el bon rendiment acadèmic dels estudiants*", IES Sant Ramon, Cardona, 20/Jan/2016.
36. "*Hagamos posible el buen rendimiento académico*", Mondragon Unibersitateea, Mondragon, 29/Jan/2016.
37. "*Fem possible el bon rendiment acadèmic*", 8-hour course at Universitat de Lleida, Lleida, 4/Feb/2016.
38. "*Let's make possible high academic performance*", ESADE, Sant Cugat del Vallès, 9/Feb/2016.
39. "*Fem possible el bon rendiment acadèmic*", **Jornada d'Innovació Docent**, Universitat d'Andorra, Sant Julià de Lòria (Andorra), 11/Feb/2016.
40. "*Hagamos posible el buen rendimiento académico*", ESADE Pedralbes, Barcelona, 18/Feb/2016.
41. "*UB s'Aprupa 16*". Institut de Camarles, Camarles, 25/Feb/2016.
42. "*UB s'Aprupa 16*". Institut Les Termes, Sabadell, 1/Mar/2016.
43. "*UB s'Aprupa 16*". Institut Cendrassos, Figueres, 10/Mar/2016.
44. "*UB s'Aprupa 16*". Institut Vescomte de Cabrera, Hostalric, 17/Mar/2016.
45. "*UB s'Aprupa 16*". Institut Maria de Bell-Lloch, Bigues i Riells, 29/Mar/2016.
46. "*UB s'Aprupa 16*". Institut de Llagostera, Llagostera, 30/Mar/2016.
47. "*UB s'Aprupa 16*". Institut Milà i Fontanals, Vilafranca del Penedès, 31/Mar/2016.
48. "*UB s'Aprupa 16*". Institut La Caparrella, Lleida, 4/Apr/2016.
49. "*UB s'Aprupa 16*". Escola Andorrana de Batxillerat, La Margineda (Andorra), 6/Apr/2016.
50. "*UB s'Aprupa 16*". Escola Pia, Igualada, 7/Apr/2016.
51. "*UB s'Aprupa 16*". Institut Sant Elm, Sant Feliu de Guixols, 8/Apr/2016.
52. "*UB s'Aprupa 16*". Institut de Vidreres, Vidreres, 14/Apr/2016.
53. "*L'aire que respirem*". Escola Sant Elies, Vilafranca del Penedès, 18/May/2016.

54. "*Hagamos posible el buen rendimiento académico*", Universidad de Santiago, Santiago de Compostela, 23/May/2016.
55. "*Training Educatiu: millorem el rendiment dels estudiants de ciències i tecnologia*", 8-hour course at Universitat de Barcelona, 6–8/Jun/2016.
56. "*Hagamos posible el buen rendimiento académico*", 6-hour course at Universidad de Burgos, Burgos, 20/Jun/2016.
57. "*Llibres de Divulgació Científica*", Màster de Comunicació Científica, Univ. Barcelona, 17/Oct/2016.
58. "*UB s'Apropa 17*". Institut Sant Elm, Sant Feliu de Guíxols, 14/Nov/2016
59. "*L'Aire que Respiram*", La Setmana de la Ciència, Institut Sant Elm, Sant Feliu de Guíxols, 14/Nov/2016.
60. "*L'Aire que Respiram*", La Setmana de la Ciència, Auditori Municipal, Castellar del Vallès, 16/Nov/2016.
61. "*Millor i més petit impossible: les promeses dels Motors Moleculars*", 1-Day Meeting **Passat, Present i Futur de la Recerca Científica**, Auditori del Museu de la Ciència i la Tècnica de Catalunya, Terrassa, 19/Nov/2016.
62. "*UB s'Apropa 17*". Europa International School, Sant Cugat del Vallès, 16/Jan/2017
63. "*UB s'Apropa 17*". Institut Manuel Blancafort, La Garriga, 17/Jan/2017
64. "*UB s'Apropa 17*". Escola Pia de Granollers, Granollers, 27/Jan/2017
65. "*UB s'Apropa 17*". Escola Pia de Caldes, Caldes de Montbui, 30/Jan/2017
66. "*UB s'Apropa 17*". Escola Municipal del Treball, Granollers, 1/Feb/2017
67. "*UB s'Apropa 17*". Institut La Vall del Tenes, Sta. Eulàlia de Ronsana, 3/Feb/2017
68. "*UB s'Apropa 17*". Institut Maria de Bell-Lloc, Bigues i Riells, 6/Feb/2017
69. "*UB s'Apropa 17*". Institut Alba del Vallès, Sant Fost de Campsentelles, 8/Feb/2017
70. "*UB s'Apropa 17*". Institut Alba del Vallès, Sant Fost de Campsentelles, 9/Feb/2017
71. "*Active Learning Education in Science*", Round Table in "**Jornada d'Investigadors Predoctorals Interdisciplinària**". Universitat de Barcelona, Barcelona, 9/Feb/2017.
72. "*UB s'Apropa 17*". Institut La Roca del Vallès, La Roca del Vallès, 10/Feb/2017
73. "*UB s'Apropa 17*". Institut Vilanova del Vallès, Vilanova del Vallès, 10/Feb/2017
74. "*UB s'Apropa 17*". Institut Vilanova del Vallès, Vilanova del Vallès, 10/Feb/2017
75. "*UB s'Apropa 17*". Institut Moianès, Moia, 16/Feb/2017
76. "*UB s'Apropa 17*". Institut Mollet del Vallès, Mollet del Vallès, 17/Feb/2017
77. "*UB s'Apropa 17*". Institut El Sui, Cardedeu, 21/Feb/2017
78. "*UB s'Apropa 17*". Jesuïtes Sant Gervasi – Escola Infant Jesús, Barcelona, 22/Feb/2017
79. "*UB s'Apropa 17*". Institut El Sui, Cardedeu, 23/Feb/2017
80. "*UB s'Apropa 17*". Institut Milà i Fontanals, Vilafranca del Penedès, 1/Mar/2017
81. "*UB s'Apropa 17*". Institut Camí de Mar, Calafell, 2/Mar/2017
82. "*L'Aire que respirem*". **Toc–Toc UB Science Dissemination Program**, Institut Manuel Blancafort, La Garriga, 30/Mar/2017
83. "*UB s'Apropa 17*". Institut Manolo Hugué, Caldes de Montbui, 7/Apr/2017
84. "*L'Aire que Respiram*". **Toc–Toc UB Science Dissemination Program**, Escola Municipal del Treball, Granollers. 19/Apr/2017.
85. "*Hagamos posible el buen rendimiento académico*", 4-hour course at Universidad de Extremadura, Cáceres, 4/May/2017.
86. "*Les Microones i les Ones de Ràdio: què són i com ens afecten?*". **Toc–Toc UB Science Dissemination Program**, Centre Cultural Sant Josep – Jornades "Pessics de Ciència", Hospitalet de Llobregat, 17/May/2017.
87. "*The role of Universities in the Energy Transition: multidisciplinary education and research*". **5th Uni–SET Meeting**. KU Leuven, Leuven, Belgium, 2/Jun/2017.
88. "*Ensenyar a aprendre: millorem l'aprenentatge de les ciències i la tecnologia*", 8-hour course at Universitat de Lleida, Lleida, 5/Jun/2017.
89. "*Profesores de Ciencias, hagamos posible el buen rendimiento académico sin clases magistrales*", 8-hour course at Universidad de Sevilla, Sevilla, 19–20/Jun/2017.
90. "*El mètode SABER de classe invertida síncrona en un entorn STEM*". One-day meeting "**L'enfocament d'aula inversa a la Universitat**", Universitat de Girona, 21/Jun/2017.

91. “*Let’s make high academic performance possible*”. Workshop **Learnin’s Creatin’**. Instituto Politécnico de Viséu, Viséu, Portugal, 13–14/Sept/2017.
92. “*Practical strategies to improve students’ performance, with emphasis on STEM: the SABER synchronous flipped classroom*”. Invited Conference at “**1st international conference in experiences in active learning in higher education**”, Facultat d’Economia i Empresa, Universitat de Barcelona, 27/Oct/2017.
93. “*Llibres de Divulgació Científica*”, Màster de Comunicació Científica, Univ. Barcelona, 13/Nov/2017.
94. “*L’Aire que Respiram*”, **La Setmana de la Ciència**, Institut Joan Brudieu, La Seu d’Urgell, 15/Nov/2017.
95. “*La màgia de l’aigua*”, **La Setmana de la Ciència**, Sala Noble de Can Rius, Caldes de Montbui, 17/Nov/2017.
96. “*UB s’Apropa 18*”. La Salle Manresa, Social Science Students, Manresa, 24/Nov/2017
97. “*UB s’Apropa 18*”. La Salle Manresa, Science Students, Manresa, 24/Nov/2017
98. “*L’Aire que Respiram*”. **Toc–Toc UB Science Dissemination Program**, Oak House School, Barcelona. 29/Nov/2017.
99. “*L’Aire que Respiram*”. **Toc–Toc UB Science Dissemination Program**, Biblioteca Sagrada Família, Barcelona. 29/Nov/2017.
100. “*Enseñar a aprender: de las clases magistrales a la clase invertida síncrona*”, Openning Lecture at **IV Jornadas de Docencia Universitaria** de la Universidad de Sevilla, Sevilla, 4–5/Dec/2017.
101. “*UB s’Apropa 18*”. Gresol International American School, Terrassa, 9/Jan/2018
102. “*UB s’Apropa 18*”. INS Pius Font i Quer, Manresa, 10/Jan/2018
103. “*L’Aire que Respiram, l’energia que ens mou*”, Course at Universitat Popular Caldes de Montbui, 10/Jan/2018.
104. “*UB s’Apropa 18*”. INS Celestí Bellera, Granollers, 11/Jan/2018
105. “*UB s’Apropa 18*”. INS Miramar, Viladecans, 12/Jan/2018
106. “*UB s’Apropa 18*”. INS Celestí Bellera, Granollers, 12/Jan/2018
107. “*UB s’Apropa 18*”. INS Montserrat Miró i Vilà, Sta. Coloma Gramanet, 15/Jan/2018
108. “*UB s’Apropa 18*”. INS Domènec Perramon, Arenys de Munt, 16/Jan/2018
109. “*UB s’Apropa 18*”. INS La Vall del Tenes, Sta. Eulàlia de Ronsana, 16/Jan/2018
110. “*UB s’Apropa 18*”. INS Pau Vila, Sabadell, 17/Jan/2018
111. “*Hagamos posible el buen rendimiento académico sin clases magistrales en un entorno STEM*”, 8–hour course at **Universidad Cardenal Herrera–CEU San Pablo**, Valencia, 18–19/Jan/2018.
112. “*UB s’Apropa 18*”. INS Baix a Mar, Vilanova i la Geltrú, 22/Jan/2018
113. “*Podem entendre la Física Quàntica?*”, Conference on occasion of the **Feynman Year, Visions de Ciència** Programme. Biblioteca Sagrada Família, Barcelona, 22/Jan/2018.
114. “*UB s’Apropa 18*”. INS Domènec i Montaner, Canet de Mar, 24/Jan/2018
115. “*L’Aire que Respiram, l’energia que ens mou*”, Course at Universitat Popular Caldes de Montbui, 24/Jan/2018.
116. “*UB s’Apropa 18*”. INS Celestí Bellera, Granollers, 25/Jan/2018
117. “*UB s’Apropa 18*”. Escola Pia, Caldes de Montbui, 25/Jan/2018
118. “*UB s’Apropa 18*”. Escola Pia, Granollers, 25/Jan/2018
119. “*UB s’Apropa 18*”. Escola La Presentació, Arenys de Mar, 30/Jan/2018
120. “*UB s’Apropa 18*”. Escola Goar, Viladecans, 31/Jan/2018
121. “*UB s’Apropa 18*”. INS Torre de Malla, Parets del Vallès, 31/Jan/2018
122. “*L’Aire que Respiram, l’energia que ens mou*”, Course at Universitat Popular Caldes de Montbui, 31/Jan/2018.
123. “*UB s’Apropa 18*”. INS Les Termes, Sabadell, 1/Feb/2018
124. “*UB s’Apropa 18*”. INS Vilamajor, Sant Pere de Vilamajor, 1/Feb/2018
125. “*UB s’Apropa 18*”. INS Cal Gravat, Manresa, 2/Feb/2018
126. “*L’Aire que Respiram, l’energia que ens mou*”, Course at Universitat Popular Caldes de Montbui, 7/Feb/2018.
127. “*UB s’Apropa 18*”. Escola Andorrana de Batxillerat, La Margineda, Andorra, 8/Feb/2018.
128. “*UB s’Apropa 18*”. INS Sentmenat, Sentmenat, 14/Feb/2018.

129. “*L’Aire que Respirerem, l’energia que ens mou*”, Course at Universitat Popular Caldes de Montbui, 14/Feb/2018.
130. “*UB s’Apropa 18*”. INS Vinyet, Sitges, 15/Feb/2018.
131. “*L’Aire que Respirerem, l’energia que ens mou*”, Course at Universitat Popular Caldes de Montbui, 21/Feb/2018.
132. “*UB s’Apropa 18*”. INS Alba del Vallès, Sant Fost de Campsentelles, 27/Feb/2018.
133. “*UB s’Apropa 18*”. INS Alba del Vallès, Sant Fost de Campsentelles, 27/Feb/2018.
134. “*L’Aire que Respirerem, l’energia que ens mou*”, Course at Universitat Popular Caldes de Montbui, 28/Feb/2018.
135. “*La Màgia de l’Aigua*”. **Toc–Toc UB Science Dissemination Program**, Escola Patronat Domènech, Barcelona. 13/Mar/2018.
136. “*UB s’Apropa 18*”. INS Guillem Catà, Manresa, 15/Mar/2018.
137. “*UB s’Apropa 18*”. INS Vescomtat Cabrera, Hostalric, 16/Mar/2018.
138. “*UB s’Apropa 18*”. INS Lliçà d’Amunt, Lliçà d’Amunt, 20/Mar/2018.
139. “*Delivering new and innovative research and education programmes*”. Plenary Session Moderator at **European Universities for a clean energy future: interdisciplinary education, training and research**, Energy Clustering Event of the European University Association. Université de Lorraine, Nancy, France, 21–22/Mar/2018.
140. “*Teaching for improved learning: creating new content*”. 2nd Workshop “**Learnin’s Creatin**”, Instituto Politécnico de Viséu, Viséu, Portugal, 4–5/Apr/2018.
141. “*Promoting Active Learning in Universities*”. 1st meeting of the **EUA Thematic Peer Group**. Malmö University, Malmö, Sweden, 9/Apr/2018.
142. “*UB s’Apropa 18*”. INS Maria de Bell–Lloc, Bigues i Riells, 17/Apr/2018.
143. “*UB s’Apropa 18*”. Escola Pia Igualada, Igualada, 19/Apr/2018.
144. “*Apropa’t a la UB!*”. Universitat de Barcelona, 20/Apr/2018.
145. “*Feynman i les màquines moleculars: el somni d’un visionari*”. 1–Day meeting **NanoEduca 2018**. Universitat de Barcelona, 9/May/2018.
146. “*La Magia de l’Aigua*”. **Toc–Toc UB Science Dissemination Program**, Biblioteca Sagrada Família, Barcelona. 9/May/2018.
147. “*Some reflections on active learning and teaching*”. **EUA–Innoenergy Workshop: research, innovation and educational capacities for the energy transition**, EIT House, Brussels, 28/May/2018.
148. “*Promoting Active Learning in Universities*”. 2nd meeting of the **EUA Thematic Peer Group**. University College Cork, Cork, Ireland, 11/Jun/2018.
149. “*Promoting Active Learning in Universities*”. 3rd meeting of the **EUA Thematic Peer Group**. Twente University, Enschede, The Netherlands, 10–11/Sep/2018.
150. “*Consortio Europeo para la Formación, Investigación e Innovación en Docencia Universitaria*”, **Kick–Off Meeting** at Universidad de Sevilla, Sevilla, 23–24/Sep/2018.
151. “*Students improve learning because we, teachers, forget about classical teaching*”. **International Conference on Active Learning and Education**, Instituto Politécnico de Viséu, Viséu, Portugal, 26–27/Sep/2018.
152. “*Let’s make possible increased students’ performance*”. Round Table at **International Conference on Active Learning and Education**, Instituto Politécnico de Viséu, Viséu, Portugal, 26–27/Sep/2018.

Forthcoming:

1. “*La màgia de l’aigua*”, **Toc–Toc UB Science Dissemination Program**, Escola Patronat Domènech, Barcelona. 24/Oct/2018.
2. “*Llibres de Divulgació Científica*”, **Màster de Comunicació Científica**, Univ. Barcelona, 5/Nov/2018.
3. “*Les microones i les ones de ràdio. Què són i com ens afecten?*”. **Toc–Toc UB Science Dissemination Program**, Biblioteca Can Casas, Llinars del Vallès. 8/Nov/2018.
4. “*La màgia de l’aigua*”, **La Setmana de la Ciència**, Sala d’Actes UPC, Vilanova i la Geltrú. 13/Nov/2018.

5. “*Les microones i les ones de ràdio. Què són i com ens afecten?*”. **Toc–Toc UB Science Dissemination Program**, Institut Frederic Mompou, Sant Vicenç dels Horts. 14/Nov/2018.
6. “*Poca broma amb la Física Quàntica i Richard Feynman: les contribucions d’un Geni*”. **Conference Course 18–19 and Setmana de la Ciència**. Agrupació Astronòmica de Sabadell. Sabadell, 14/Nov/2018.
7. “*La màgia de l’aigua*”, **La Setmana de la Ciència**, La Salle Bonanova, Barcelona. 15/Nov/2018.
8. “*Assessment strategies to promote active learning in Universities*”. **Final EUA–TPG Workshop**. Universidade de Porto, Porto, Portugal, 19–20/Nov/2018.
9. “*La futura carrera docente universitària*”. **Jornadas RED–U: “De la invisibilidad al reconocimiento de la buena docencia universitaria”**. Universidad de Jaen, Jaen, 22–23/Nov/2018.
10. “*La màgia de l’aigua*”, **Toc–Toc UB Science Dissemination Program**, Institut Maria Espinalt, Barcelona. 26/Nov/2018.
11. “*La màgia de l’aigua*”, **Toc–Toc UB Science Dissemination Program**, INS Escola del Treball, Barcelona. 13/Dec/2018.
12. “*Las posibilidades de la edición académica digital*”, invited talk at “**Congreso sobre Edición Académica**”, Universidad de Cádiz, Cádiz, 14/Dec/2018.

Interviews in Press, TV, Radio and Digital Media

1. Monthly appearance in “El Planeta Blau”, **Ràdio Caldes**, 2002–2004.
2. Monthly appearance in “Espai La Terra”, **Ràdio Caldes**, 2006–2008.
3. “*El Pla de Bolonya*”, program “Els Matins de TV3”, **TV3**, 2009: <http://www.ccma.cat/tv3/alcarta/programa/Els-estudiants-davant-del-Pla-Bolonya/video/1113509/>
4. “*El Pla de Bolonya*”, magazine of **25TV**, 2009.
5. “*Bolonya esquerra la Universitat*”, **El Punt Avui**, March 20th, 2009: <http://www.elpuntavui.cat/article/2-societat/5-societat/279220--bolonya-esquerra-la-universitat-.html?cca=1&tmpl=component&print=1&page=>
6. “*La normativa de permanència a la Universitat*”, program “Els matins de TV3”, **TV3**, 2010.
7. “*L’accident de la planta d’amoniac a Waco, Texas*”, program “8 al dia”, **8TV**, April 18th, 2013: <http://www.8tv.cat/8aldia/videos/una-explosio-en-una-fabrica-de-texas-cause-5-morts-i-160-ferits/>
8. “*Profesor de Química cuenta en un libro anécdotas sobre el aire que respiramos*”. Vida section of **La Vanguardia**, February 14th, 2014: <http://www.lavanguardia.com/vida/20140213/54401140468/profesor-de-quimica-cuenta-en-un-libro-las-anecdotas-del-aire-que-respiramos.html>
9. “*L’Aire que Respiram*”, program “Matins en Xarxa”, **La Xarxa Ràdio**, 2014.
10. “*L’Aire que Respiram*”, program “Paciencia la nostra”, **Ràdio Sants – RAC1**, April 6th, 2014: <http://www.paciencialanostra.com/2014/04/programa-233-6-iv-14.html>
11. “*La prohibició de venda d’aparells amb mercuri*”, program “8 al dia”, **8TV**, April 9th, 2014: <http://www.8tv.cat/8aldia/videos/dema-ja-no-es-podran-vendre-termometres-de-mercuri/>
12. “*L’Aire que Respiram*”, program “El problema de Gettier”, **La Xarxa TV**, April 30th, 2014: <http://www.xiptv.cat/el-problema-de-gettier/capitol/l-x27-entrevista-xavier-gimenez>
13. “*La capa de ozono? Bien, gracias*”, Interview by Miguel Margineda, Ciencia section of **Ideal.es**, May 4th, 2014: <http://www.ideal.es/jaen/20140504/mas-actualidad/sociedad/capa-ozono-bien-gracias-201405040033.html>
14. “*La destrucción de la capa de Ozono da una tregua y comienza a regenerarse*”, Ciencia section of **EcoDiario.es**, August 19th, 2014:

- <http://ecodiario.economista.es/ciencia/noticias/6017936/08/14/La-destruccion-de-la-capa-de-Ozono-da-una-tregua-y-comienza-a-regenerarse.html>
15. “Un químico desmonta la teoría de conspiración de los Chemtrails”, Interview by Miguel Margineda, Ciencia section of **Diariovasco.com**, September 8th, 2014: <http://www.diariovasco.com/sociedad/ciencia/201409/08/quimico-desmonta-teoria-conspiracion-20140908174442.html>
 16. “Chemtrails”, program “Nit de Misteris”, **Radio Marca**, September 28th, 2014: http://www.ivoox.com/nit-misteris-28-09-2014-chemtrails-audios-mp3_rf_3554066_1.html
 17. “Chemtrails, parte II”, program “Nit de Misteris”, **Radio Marca**, November, 2nd, 2014: https://www.ivoox.com/nit-misteris-02-11-2014-chemtrails-2-parte-audios-mp3_rf_3688144_1.html
 18. “El clima se resistirá a la manipulación de la geoingeniería”. Interview by Rosae Martín Peña, **Tendencias 21**, February 20th, 2015: http://www.tendencias21.net/El-clima-se-resistira-a-la-manipulacion-de-la-geoingenieria_a39728.html
 19. “El núvol tòxic a Igualada”, program “Telenotícies Vespre”, **TV3**, February 13th, 2015: <http://www.ccma.cat/tv3/alcarta/noticies-324/els-perills-reals-del-nuvol-digualada/video/5466920/>
 20. “Integrar matemáticas y ciencias, enseñar a aprender”, Interview by Juan Riera Roca at program “Paideia”, **IB3 Radio**, April 26th, 2015: <http://ib3tv.com/carta?id=4a642e61-a454-4028-b2c7-bf7d6b056125>
 21. “Com afecta la salut el clor a les piscines?”, program “8 al dia”, **8TV**, July 14th, 2015: <http://www.8tv.cat/8aldia/videos/com-afecta-la-salut-el-clor-de-les-piscines/>
 22. “Antenes sí, a casa del veí”, program “Quequicom”, **TV3/C33**, Sept. 29th, 2015: <http://www.ccma.cat/tv3/alcarta/quequicom/antenes-si-a-casa-del-vei/video/5553819/>
 23. “El semen dels joves tarragonins és de més mala qualitat?”, program “La Vida”, **Catalunya Ràdio**, October 7th, 2015: <http://www.ccma.cat/catradio/alcarta/la-vida/per-que-el-semen-dels-joves-tarragonins-es-de-mes-mala-qualitat/audio/895698/>
 24. “¿Pueden las matemáticas y la física huir de las clases magistrales?”. Interview by Ana Torres Menárguez, **El País**, November 2nd, 2015: http://economia.elpais.com/-economia/2015/10/30/actualidad/1446206875_723926.html
 25. “Ensenyar ciències amb alt rendiment”. Program “El Trencadís”, N° 46, **8TV**, November 4th, 2015: <http://www.8tv.cat/programa/trencadis/>
 26. “Contaminació dièsel: no és només VW”. Program “Quequicom”, **TV3/C33**, February 2nd, 2016: <http://www.ccma.cat/tv3/alcarta/quequicom/contaminacio-diesel-no-es-nomes-vw/video/5581651/>
 27. “¿Para qué sirven los años sabáticos de los profesores universitarios?”. Interview by Ana Torres Menárguez, **El País**, February 8th, 2016: http://economia.elpais.com/-economia/2016/02/05/actualidad/1454700801_868353.html?rel=lom
 28. “Millorem el rendiment de l'aprenentatge: dubtem, preguntem i treballem per saber”, **UBtv**, Universitat de Barcelona, February 16th, 2016: <http://www.ub.edu/ubtv/video/millorem-el-rendiment-de-laprenentatge-dubtem-preguntem-i-treballem-per-saber-facultat-de-quimica-ub>
 29. “Let’s make possible high academic performance”, **CEI ESADE**, February 9th, 2016: https://www.youtube.com/watch?v=vL_Hn2YOXUE
 30. “Hagamos posible el buen rendimiento académico”, **CEI ESADE**, February 18th, 2016: <https://www.youtube.com/watch?v=7pLOCLcWEXg>
 31. “Sin prueba científica (sobre la Homeopatía)”, Interview by Carina Farreras, **La Vanguardia**, March 9th, 2016: <http://www.lavanguardia.com/edicion-impresa/20160309/40304374154/sin-prueba-cientifica.html>
 32. “La cancelación del Master de Homeopatía en la UB”, Program “La W Radio”, **W Radio Colombia (PRISA)**, March 11th, 2016.
 33. “Ladrones de Nubes”, Interview by Inés Gallastegui, **Las Provincias (Vocento)**, April 26th, 2016: <http://www.lasprovincias.es/sociedad/201604/24/ladrones-nubes-20160423235419-v.html>

34. "Anys sabàtics", Interview by Néstor Bogajo, **Aula** periodic issue of **La Vanguardia**. June 13th, 2016: http://issuu.com/clariana/docs/20160613_aula_graus_i_masters-ok/34?e=1
35. "La capa de ozono se recupera, el calentamiento global continúa", Interview by Jorge Solís, Program "Principio de Incertidumbre", **Canal Extremadura Radio**, July 9th, 2016: <http://www.canalextramadura.es/alcarta/radio/audios/principio-de-incertidumbre-capade-ozono-y-cambio-climatico-090716>
36. "Classe inversa: experiències docents". Metodologies Actives i TIC, **UBTV**, Universitat de Barcelona. Sept 13th, 2016: <http://www.ub.edu/ubtv/video/classe-inversa-constrast-debat>
37. "Pediatras y Químicos restan importancia al colorante E-110 del Dalsy", Interview by Carmen Jané, **El Periódico de Catalunya**, September 20th, 2016: <http://www.elperiodico.com/es/noticias/sociedad/pediatras-quimicos-restan-importancia-colorante-del-dalsy-5392417>
38. "El dia sense cotxes. Com està la contaminació de la ciutat de Barcelona?", Interview by Eva Arderiu, Program "Bàsics BTV", **BTV**, September 21st, 2016: <http://www.btv.cat/alcarta/basics-btv/46534>
39. "El cautxú de la gespa artificial, sota sospita", Interview by Marta Ballesta, Program "Les 10 notícies", **BTV**, October 14th, 2016: <http://www.btv.cat/les10noticies/la-gespa-artificial-amb-cautxu-sota-sospita/>
40. "La proposta municipal per a les àrees blava i verda ja es debat al carrer", Interview by Marc Bermejo, Program "BTV Notícies", **BTV**, October 14th, 2016: <http://www.btv.cat/btvnoticies/2016/10/14/reaccions-a-lencariment-de-la-zones-verdes-i-blaves-per-contaminacio/>
41. "La pols africana és un fenomen útil", Interview by Marc Bermejo, Program "BTV Notícies", **BTV**, October 27th, 2016: <http://www.btv.cat/btvnoticies/2016/10/27/pols-africana-xavier-gimenez-professor-quimica-ambiental/>
42. "Tot sobre l'aire que respirem", news at **L'actual.cat** magazine, November 16th, 2016: <http://www.lactual.cat/cat/notices/2016/11/tot-sobre-l-aire-que-respirem-23376.php>
43. "Education in Science" Discussion at JIPI17, Jornada d'Investigadors Predoctorals Interdisciplinària. **UBTV**, Universitat de Barcelona, February, 9th, 2017: <http://www.ub.edu/ubtv/video/debate-education-in-science>
44. "Can Barcelona superblocks cut traffic and clean up city air?" Interview by Sophie Davies, United States edition of **Reuters.com**, February 23rd, 2017: <http://www.reuters.com/article/us-spain-urban-pollution-transport-idUSKBN1621E7>
45. "Què és la felicitat" Interview by Guillem Martínez, Science section of **BTV**. March 20th, 2017: <http://beteve.cat/seccions/tecnologia/>
46. "Dormir a prop del mòbil: entre el risc i la falsa alarma". Interview by Marc Garcia, Life section of **El Món**, March 25th, 2017: <http://elmon.cat/noticia/192028/dormir-a-prop-del-mobil-entre-el-risc-i-la-falsa-alarma>
47. "La polémica solución de Trump al cambio climático: lanzar productos químicos al aire". Interview by Rocío Pérez Benavente, Science section of **El Confidencial**. March 29th, 2017: http://www.elconfidencial.com/tecnologia/ciencia/2017-03-29/geoingenieria-solar-cambio-climatico-quimicos-atmosfera_1356072/
48. "La contaminació de l'aire que respirem al Vallès Oriental". Interview by Dani Agudo for Infovallès, **VOTV**. April 19th, 2017: <http://votv.xiptv.cat/entrevista#>
49. "Dudas sobre la efectividad de las medidas anticontaminación". Interview by Pablo Alegre, Mobility section, **Metrópoli Abierta Barcelona**. April 20th, 2017: http://www.metropoliabierta.com/el-pulso-de-la-ciudad/movilidad/restringir-acceso-barcelona-problemas-soluciones-contaminacion_1055_102.html
50. "Ha pujat l'ús de mascaretes antipol·lució. Són efectives?". Interview by Miriam Santamaria, program **Verd Primera**, **BTV**. May 10th, 2017: <http://beteve.cat/clip/entrevista-a-xavier-gimenez-i-pau-girbau-sobre-les-mascaretes-antipollucio/>
51. "Les microones i les ones de ràdio: què són i com ens afecten". Conference within the series "**Pessics de Ciència**", Centre Cultural Sant Josep, L'Hospitalet de Llobregat. May 17th, 2017: <https://www.youtube.com/watch?v=UKEhCROFrhk>

52. “*El termòmetre i el mercuri*”, Interview by Marta Ballesta, Program “Les 10 notícies”, **BTV**, June 16th, 2017: <http://beteve.cat/programa/les-10-noticies/>
53. “*La contaminació atmosfèrica*”. Interview by Martí Roma et al, for a **newsgame within a Degree Final Report** (TFG), Journalism Degree, Universitat Pompeu Fabra, Barcelona: <http://verdalia.cat/>
54. “*El mètode SABER de classe invertida síncrona en un entorn STEM*”. One–day meeting “**L'enfocament d'aula inversa a la Universitat**”, Universitat de Girona, 21/Jun/2017: <http://diobma.udg.edu/handle/10256.1/4836>
55. “*L'Aire que Respiram*”. Talk at INS Joan Brudieu, La Seu d'Urgell, during “La Setmana de la Ciència 2017”. Nov 15th, 2017: <https://www.youtube.com/watch?v=nxWkozNzWYk>
56. “*Geoingeniaritza, mitoetatik harago*”. Interview by Juanma Gallego, **Berria** Journal (Basque Lang.), 28/Jan/2018: https://www.berria.eus/paperekoa/1974/018/001/2018-01-28/geoingeniaritza_mitoetatik_harago.htm
57. “*Europa obligarà a passar a tots els vehicles matriculats uns tests més exhaustius*”. Interview for the program “Via Lliure”, **RAC1**, Sept 1st, 2018: <https://www.rac1.cat/programes/via-lliure/20180901/451552580540/europa-obligara-a-tots-els-vehicles-matriculats-a-passar-uns-tests-mes-exhaustius.html>