



Carlos Silva Lopez

Generado desde: Editor CVN de FECYT

Fecha del documento: 05/03/2023

v 1.4.3

4e799a8de6bdb20dec10d38bcb943fa9

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/>



Resumen libre del currículum

Descripción breve de la trayectoria científica, los principales logros científico-técnicos obtenidos, los intereses y objetivos científico-técnicos a medio/largo plazo de la línea de investigación. Incluye también otros aspectos o peculiaridades importantes.

Prof. Silva graduated in Chemistry in 2001 at the Universidad de Vigo. He finished his degree with excellent academic performance, which was recognized with an award by the Ministry of Education of Spain as one of the most outstanding new graduates in the nation. Later he secured funding to pursue a PhD in Chemistry through a competitive call by the Ministerio de Educación within a program to promote and educate new faculty. This period ended in February 2006, with his dissertation on the structure and reactivity of polyenals and vinyl-allenes, which was also awarded by the Universidad de Vigo as one of the best thesis of that year. In March 2006 he moved to the University of Minnesota to join the research group of Prof. Darrin M. York to study catalytic processes in RNA. At the end of 2006 he moved back to Vigo with a competitive senior researcher position with a tenure-track structure funded by the State Government. During this period he kept a highly international profile, carrying out long term visits to the University of Minnesota, one of which was awarded with a fellowship by the Minnesota Supercomputer Institute (2007). He was also awarded a Young Chemist Award at the 42 IUPAC Congress in 2009. When the tenure track period expired he was promoted to permanent Professor of Organic Chemistry (Dec. 2011).

Once part of the permanent staff, Prof. Silva has been co-leading a research group pivoting around computational chemistry. This research group has potent scientific activity with tangible outputs mainly in the form of scientific articles, many of them in collaboration with international research groups. Currently, his research group at the Universidad de Vigo has been recently recognized by the state government with additional funding earmarked for research units with outstanding productivity. Prof. Silva has successfully supervised 4 PhD students so far and he has been principal investigator of competitive grants since 2009. To date, he has published about 100 research articles in top of the line journals and has participated in numerous symposia and scientific meetings. He frequently serves as referee to evaluate the merit of scientific articles for renowned journals and editorials (ACS, RSC, Wiley, etc) and to evaluate grant proposals for agencies belonging to the USA, Italy, France, Spain and Panama. In 2015 Prof. Silva joined the CATCO group, led by Profs. Cremer and Kraka as invited professor, and in 2019 he visited Rutgers, the State University of New Jersey, in a combined educational/research program under the auspices of the Fulbright Foundation. The State University of New Jersey is a top 100 educational institution according to the Shanghai ranking. In 2022 he was promoted to Full Professor of Organic Chemistry at the Universidad de Vigo.



Indicadores generales de calidad de la producción científica

Información sobre el número de sexenios de investigación y la fecha del último concedido, número de tesis doctorales dirigidas en los últimos 10 años, citas totales, promedio de citas/año durante los últimos 5 años (sin incluir el año actual), publicaciones totales en primer cuartil (Q1), índice h. Incluye otros indicadores considerados de importancia.

h-index: 26

Total citations: ~ 2000

Average citations/year (2016-2020): 125

Scientific publications > 100

Q1 publications: > 70

Supervised PhDs: 4

Sexenios: 3 (último 2020)



Carlos Silva Lopez

Apellidos: Silva Lopez
Nombre: Carlos
DNI: ██████████
ORCID: 0000-0003-4955-9844
ScopusID: 26433635900
Fecha de nacimiento: ██████████
Sexo: Hombre
Nacionalidad: España
Provincia de contacto: Pontevedra
Ciudad de nacimiento: Vigo
Dirección de contacto: Departamento de Química Orgánica; Facultad de Química
Resto de dirección contacto: Campus As Lagoas-Marcosende
Código postal: 36310
País de contacto: España
C. Autón./Reg. de contacto: Galicia
Ciudad de contacto: Vigo
Teléfono fijo: (+34) 986812632
Correo electrónico: carlos.silva@uvigo.es

Situación profesional actual

Entidad empleadora: Universidade de Vigo
Departamento: Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química
Categoría profesional: Catedrático de Universidad
Ciudad entidad empleadora: As Lagoas,
Teléfono: 986812632 **Correo electrónico:** carlos.silva@uvigo.es
Fecha de inicio: 2022
Modalidad de contrato: Plantilla Contratado Interino Becario
Identificar palabras clave: Catálisis; Química computacional

Cargos y actividades desempeñados con anterioridad

	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
1	Universidade de Vigo	Investigador Contratado	2006
2	Universidade de Vigo	Becario FPU	2002
3	Universidade de Vigo	Becario de Colaboración (MEC)	2000
4	Universidade de Vigo	Profesor Titular de Universidad	2011
5	University of Minnesota	Research Specialist	2006
6	Universidade de Vigo	Beca 3er Ciclo (Xunta de Galicia)	2001

1



Entidad empleadora: Universidade de Vigo
Categoría profesional: Investigador Contratado
Fecha de inicio-fin: 2006 - 2011

2 **Entidad empleadora:** Universidade de Vigo **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Becario FPU
Fecha de inicio-fin: 2002 - 2005

3 **Entidad empleadora:** Universidade de Vigo **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Becario de Colaboración (MEC)
Fecha de inicio-fin: 2000 - 2001

4 **Entidad empleadora:** Universidade de Vigo **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Profesor Titular de Universidad
Fecha de inicio: 2011 **Duración:** 11 años

5 **Entidad empleadora:** University of Minnesota
Categoría profesional: Research Specialist
Fecha de inicio: 2006

6 **Entidad empleadora:** Universidade de Vigo **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Beca 3er Ciclo (Xunta de Galicia)
Fecha de inicio: 2001



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 Química

Entidad de titulación: Universidade de Vigo

Fecha de titulación: 18/07/2001

Tipo de entidad: Universidad

Doctorados

Programa de doctorado: Doctor en Química

Entidad de titulación: Universidade de Vigo

Fecha de titulación: 10/02/2006

Entidad de titulación DEA: Universidade de Vigo

Fecha de obtención DEA: 19/12/2003

Tipo de entidad: Universidad

Conocimiento de idiomas

Idioma	Comprensión auditiva	Comprensión de lectura	Interacción oral	Expresión oral	Expresión escrita
Portugués	B1	B1	B1	B1	B1
Gallego	C2	C2	C2	C2	C2
Inglés	C2	C2	C2	C2	C2

Actividad docente

Dirección de tesis doctorales y/o proyectos fin de carrera

- Título del trabajo:** Empleo de la química supramolecular para la captura y detección selectiva de contaminantes ambientales

Entidad de realización: Universidade de Vigo **Tipo de entidad:** Universidad

Alumno/a: Angel Vidal Vidal

Fecha de defensa: 26/06/2020
- Título del trabajo:** COMPUTATIONAL DESIGN IN CATALYSIS

Entidad de realización: Universidade de Vigo **Tipo de entidad:** Universidad

Alumno/a: Marta Castiñeira Reis

Fecha de defensa: 22/03/2019



- 3 Título del trabajo:** MECANISMOS DE REACCIÓN EN LA FRONTERA DE LAS REGLAS DE WOODWARD-HOFFMANN
Entidad de realización: Universidad de vigo Facultad / Escuela: Facultad de Química
Alumno/a: Roberto Villar López
Fecha de defensa: 10/07/2017
- 4 Título del trabajo:** REACTIVITY OF PROPARGYLIC SYSTEMS UPON ACTIVATION WITH COINAGE METALS
Entidad de realización: Universidad de vigo Facultad / Escuela: Facultad de Química
Alumno/a: Marta González Comesaña
Fecha de defensa: 23/06/2017

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:** Synthesis, Spectroscopy and Simulation (Grupos de Referencia Competitiva)
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Magdalena Cid Fernández
Nº de investigadores/as: 5
Entidad/es financiadora/s:
XUNTA DE GALICIA
Fecha de inicio-fin: 01/01/2021 - 20/11/2024 **Duración:** 3 años - 11 meses - 30 días
Entidad/es participante/s: Universidade de Vigo
Cuantía total: 200.000 €
- 2 Nombre del proyecto:** Catálisis homogénea computacional: procesos de transferencia de oxígeno y activación de enlaces múltiples
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carlos Silva Lopez; Olalla Nieto Faza
Nº de investigadores/as: 4
Fecha de inicio-fin: 01/09/2021 - 31/08/2024
Cuantía total: 84.700 €
- 3 Nombre del proyecto:** Cluster de Investigación e Transferencia Agroalimentario do Campus da Auga (CITACA)
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Ana Torrado Agrasar
Nº de investigadores/as: 20
Entidad/es financiadora/s:
XUNTA DE GALICIA
Ciudad entidad financiadora: España
Fecha de inicio: 01/01/2018 **Duración:** 3 años
Entidad/es participante/s: Universidade de Vigo
Cuantía total: 424.000 €



- 4** **Nombre del proyecto:** Synthesis, Spectroscopy and Simulation (Grupos de Referencia Competitiva)
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Magdalena Cid Fernández
Nº de investigadores/as: 5
Entidad/es financiadora/s:
XUNTA DE GALICIA
Fecha de inicio: 01/01/2017 **Duración:** 3 años - 11 meses - 30 días
Entidad/es participante/s: Universidade de Vigo
Cuantía total: 200.000 €
- 5** **Nombre del proyecto:** Catalisis in-silico para el desarrollo de nuevas metodologias sinteticas sostenibles
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carlos Silva López y Olalla Nieto Faza
Nº de investigadores/as: 2
Entidad/es financiadora/s:
Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)
Fecha de inicio: 30/12/2016 **Duración:** 3 años - 11 meses - 30 días
Entidad/es participante/s: Universidade de Vigo
Cuantía total: 36.300 €
- 6** **Nombre del proyecto:** Catálisis computacional: aplicación de la modelización molecular para desarrollar nuevos sistemas catalíticos basados en oro, molibdeno o ácidos de Bronsted
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carlos Silva López y Olalla Nieto Faza
Nº de investigadores/as: 2
Entidad/es financiadora/s:
Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)
Fecha de inicio: 01/10/2014 **Duración:** 2 años - 11 meses - 30 días
Entidad/es participante/s: Universidade de Vigo
Cuantía total: 36.300 €
- 7** **Nombre del proyecto:** Synthesis, Spectroscopy and Simulation (Grupos con Potencial de Crecimiento)
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Maria Magdalena Cid Fernández
Nº de investigadores/as: 5
Entidad/es financiadora/s:
XUNTA DE GALICIA
Fecha de inicio: 01/01/2014 **Duración:** 2 años - 11 meses - 30 días
Entidad/es participante/s: Universidade de Vigo
Cuantía total: 70.000 €
- 8** **Nombre del proyecto:** Design and Synthesis of Chiral Spiro Macromolecules for Molecular Recognition
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jose Lorenzo Alonso Gomez
Nº de investigadores/as: 6
Entidad/es financiadora/s:
XUNTA DE GALICIA
Fecha de inicio: 08/08/2013 **Duración:** 1 año - 3 meses - 22 días
Entidad/es participante/s: Universidade de Vigo
Cuantía total: 30.200 €
- 9** **Nombre del proyecto:** PIRSES-GA-2012-318930 - InTechSE. International network on integrated techniques in structural elucidation
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Maria Magdalena Cid Fernández



Nº de investigadores/as: 6

Entidad/es financiadora/s:

Commission of the European Communities (FP7-PEOPLE 2012)

Fecha de inicio: 01/09/2012

Duración: 2 años - 2 meses - 29 días

Entidad/es participante/s: Universidade de Vigo

Cuantía total: 21.000 €

10 Nombre del proyecto: Simulation in Organic Chemistry (SimOC 2011)

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carlos Silva Lopez

Nº de investigadores/as: 4

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Ciencia e Innovacion (MICINN)

Fecha de inicio: 01/07/2011

Duración: 11 meses - 30 días

Entidad/es participante/s: Universidade de Vigo

Cuantía total: 3.000 €

11 Nombre del proyecto: Computational design of novel synthetic routes for the preparation of biologically active alkaloids. Biological activity of Kinamycine.

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carlos Silva Lopez

Nº de investigadores/as: 4

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Ciencia e Innovacion (MICINN)

Fecha de inicio: 01/01/2010

Duración: 2 años - 11 meses - 30 días

Entidad/es participante/s: Universidade de Vigo

Cuantía total: 29.040 €

12 Nombre del proyecto: Selection rules and stereoelectronic effects in radical reactions.

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carlos Silva Lopez

Nº de investigadores/as: 2

Entidad/es financiadora/s:

INCITE (Xunta de Galicia)

Fecha de inicio: 02/12/2009

Duración: 1 año - 10 meses - 29 días

Entidad/es participante/s: Universidade de Vigo

Cuantía total: 51.113 €

13 Nombre del proyecto: Computational study of the electronic properties and reactivity of kinamycins and their interaction modes with DNA strands

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Olalla Nieto Faza

Nº de investigadores/as: 4

Entidad/es financiadora/s:

INO (Diputación de Orense)

Fecha de inicio: 01/01/2009

Duración: 11 meses - 30 días

Entidad/es participante/s: Universidade de Vigo

Cuantía total: 4.500 €

14 Nombre del proyecto: Mellora, ampliación e aplicación de software especializado en RMN

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Armando Navarro Vázquez

Nº de investigadores/as: 4

Entidad/es financiadora/s:



INCITE (Xunta de Galicia)

Fecha de inicio: 01/01/2009

Duración: 2 años - 10 meses

Entidad/es participante/s: Universidade de Vigo

Cuantía total: 90.000 €

15 Nombre del proyecto: Actividad biológica de diferentes polifenoles presentes en vinos de las D.O. de la provincia de Ourense

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Olalla Nieto Faza

Nº de investigadores/as: 4

Entidad/es financiadora/s:

INOUE (Diputación de Ourense)

Fecha de inicio: 20/06/2007

Duración: 6 meses - 11 días

Entidad/es participante/s: Universidade de Vigo

Cuantía total: 5.700 €

16 Nombre del proyecto: Multi-scale Quantum Models for Ribozyme Catalysis

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Darrin M. York

Nº de investigadores/as: 12

Entidad/es financiadora/s:

National Institute of Health (NIH)

Fecha de inicio: 01/06/2006

Duración: 4 años

Entidad/es participante/s: University of Minnesota

Cuantía total: 979.643 €

17 Nombre del proyecto: Síntesis de nuevos oligómeros a partir de derivados de norestatinas, estatinas y diaminoalcoholes

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Luis Muñoz López

Nº de investigadores/as: 4

Entidad/es financiadora/s:

MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA

Fecha de inicio: 01/11/2002

Duración: 3 años

Entidad/es participante/s: Universidade de Vigo

Cuantía total: 47.150 €

Contratos, convenios o proyectos de I+D+i no competitivos con Administraciones o entidades públicas o privadas

1 Nombre del proyecto: Estudio de simulación química (Reacciones catalíticas)

Grado de contribución: Servicio Tecnológico

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carlos Silva López

Nº de investigadores/as: 2

Entidad/es participante/s: CTAG; Universidade de Vigo

Entidad/es financiadora/s:

CTAG

Fecha de inicio: 01/11/2010

Duración: 1 mes - 30 días

Cuantía total: 12.000 €



- 2** **Nombre del proyecto:** Simulación de reacciones catalíticas y acoplamiento del software de simulación química con el de CFD
Grado de contribución: Servicio Tecnológico
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carlos Silva López
Nº de investigadores/as: 2
Entidad/es participante/s: CTAG; Universidade de Vigo
Entidad/es financiadora/s:
CTAG
Fecha de inicio: 01/10/2010 **Duración:** 1 año - 2 meses - 30 días
Cuantía total: 11.500 €

Actividades científicas y tecnológicas

Producción científica

Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1** J. Alvarez-García; R. García-Lago; J.L. Alonso-Gómez; C.S. López; M.M. Cid. Accessible triplet excited states in the photoisomerization of allenes with extended conjugation. Dalton Transactions. 51 - 4, pp. 1357 - 1363. 2022.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 2** Riccardo Pedrazzani; Angela Pintus; Roberta De Ventura; Marianna Marchini; Paola Ceroni; Carlos Silva López; Magda Monari; Marco Bandini. Boosting Gold(I) Catalysis via Weak Interactions: New Fine-Tunable Impy Ligands. ACS Organic & Inorganic Au. 2 - 3, pp. 229 - 235. 2022.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 3** Lorenzo Lombardi; Alessandro Cerveri; Riccardo Giovanelli; Marta Castiñeira Reis; Carlos Silva López; Giulio Bertuzzi; Marco Bandini. Direct Synthesis of α -Aryl- α -Trifluoromethyl Alcohols via Nickel Catalyzed Cross-Electrophile Coupling. Angewandte Chemie International Edition. 61 - 47, pp. e202211732 - e202211732. 2022. Disponible en Internet en: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/anie.202211732>>.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 4** Ioannis Stylianakis; Iraklis Litinas; Antonios Kolocouris; Carlos Silva López. Formation and Intramolecular Capture of α -Imino Gold Carbenoids in the Au(I)-Catalyzed [3 + 2] Reaction of Anthranils, 1,2,4-Oxadiazoles, and 4,5-Dihydro-1,2,4-Oxadiazoles with Ynamides. Catalysis. 12 - 8, 2022. ISSN 2073-4344
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 5** I. Stylianakis; I. Litinas; O. Nieto Faza; A. Kolocouris; C. Silva López. On the mechanism of the Au(I)-mediated addition of alkynes to anthranils to furnish 7-acylindoles. Journal of Physical Organic Chemistry. 2022.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 6** H. Santalla; O. Nieto Faza; G. Gómez; Y. Fall; C.S. López. On the mechanism of the dyotropic expansion of hydrindanes into decalins. Organic and Biomolecular Chemistry. 20 - 5, pp. 1073 - 1079. 2022.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 7** A. Cerveri; R. Giovanelli; D. Sella; R. Pedrazzani; M. Monari; O. Nieto Faza; C.S. López; M. Bandini. Enantioselective CO₂ Fixation Via a Heck-Coupling/Carboxylation Cascade Catalyzed by Nickel. Chemistry - A European Journal. 27 - 28, pp. 7657 - 7662. 2021.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 8** P. Besada; M. Gallardo-Gómez; T. Pérez-Márquez; L. Patiño-álvarez; S. Pantano; C. Silva-López; C. Terán; A. Arevalo-Goméz; A. Ruz-Zafra; J. Fernández-Martín; S. Ortolano. The new pharmacological chaperones pbxs increase a-galactosidase a activity in fabry disease cellular models. *Biomolecules*. 11 - 12, 2021.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 9** Y.C.A. Sokolovicz; O. Nieto Faza; D. Specklin; B. Jacques; C.S. López; J.H.Z. Dos Santos; H.S. Schrekker; S. Dagorne. Acetate-catalyzed hydroboration of CO₂ for the selective formation of methanol-equivalent products. *Catalysis Science and Technology*. 10 - 8, pp. 2407 - 2414. 2020. Disponible en Internet en: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85084341275&doi=10.1039%2fd0cy00118j&partnerID=40&md5=0fe356d49594519cb8000034d4a3154d>>.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 10** M. Castiñeira Reis; M. Marín-Luna; N. Janković; O. Nieto Faza; C. Silva López. Au(III) catalyzes the cross-coupling between activated methylenes and alkene derivatives. *Journal of Catalysis*. 392, pp. 159 - 164. 2020. Disponible en Internet en: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85094623035&doi=10.1016%2fj.jcat.2020.09.030&partnerID=40&md5=ad02cdf1a68b5e52bbb29e9d56eb4de4>>.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 11** C.S. Lopez; R. Sanz; C. Feberero; C. Sedano; S. Suarez-Pantiga. Experimental and computational study of the 1,5-o → n carbamoyl sneieckus-fries-type rearrangement. *Journal of Organic Chemistry*. 85 - 19, pp. 12561 - 12578. 2020.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 12** J. Álvarez-García; V. Rubio-Pisabarro; C. Silva-López; M.M. Cid. Photochemically Driven Tandem Process in the Construction of a Biscyclopropylcage from 2,5-Dimethoxy-p-benzoquinone and Terminal Acetylenes. *Organic Letters*. 22 - 11, pp. 4527 - 4531. 2020. Disponible en Internet en: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85085742609&doi=10.1021%2fac.orglett.0c01554&partnerID=40&md5=b04172aae2d2972f8a916dad835f179b>>.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 13** J. An; R. Pedrazzani; M. Monari; M. Marin-Luna; C.S. Lopez; M. Bandini. Site-selective synthesis of 1,3-dioxin-3-ones: Via a gold(i) catalyzed cascade reaction. *Chemical Communications*. 56 - 56, pp. 7734 - 7737. 2020. Disponible en Internet en: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85088180175&doi=10.1039%2fd0cc02703k&partnerID=40&md5=b1dfcec3d9ea4cb1e07b5d2126b92a02>>.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 14** K. Saadat; R. Villar López; A. Shiri; O. Nieto Faza; C. Silva López. The effect of solvation in torquoselectivity: Ring opening of monosubstituted cyclobutenes. *Organic and Biomolecular Chemistry*. 18 - 32, pp. 6287 - 6296. 2020. Disponible en Internet en: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85089712584&doi=10.1039%2fd0ob01229g&partnerID=40&md5=d7f491162e6319bb738a10be1734c40a>>.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 15** I. Stylianakis; O. Nieto Faza; C.S. López; A. Kolocouris. The key role of protodeauration in the gold-catalyzed reaction of 1,3-diyne with pyrrole and indole to form complex heterocycles. *Organic Chemistry Frontiers*. 7 - 8, pp. 997 - 1005. 2020. Disponible en Internet en: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85083467027&doi=10.1039%2fc9qo01544b&partnerID=40&md5=9c1be81687b1f110b6dcc0dc9c5ea456>>.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 16** C. Virumbrales; S. Suárez-Pantiga; M. Marín-Luna; C. Silva López; R. Sanz. Unlocking the 5-exo Pathway with the AuI-Catalyzed Alkoxy cyclization of 1,3-Dien-5-yne. *Chemistry - A European Journal*. 26 - 38, pp. 8443 - 8451. 2020. Disponible en Internet en: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85087119417&doi=10.1002%2fchem.202001296&partnerID=40&md5=57fafd89b707abfc3a6916f013460bc5>>.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 17** M.M. Cid; M. Lago-Silva; M.G. Comesaña; O. Nieto Faza; C.S. López. Computational and experimental studies on Cu/Au-catalyzed stereoselective synthesis of 1,3-disubstituted allenes. *Org. Chem. Front.*6 - 11, pp. 1780 - 1786. 2019.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 18** S. Castro-Fernández; J. Álvarez-García; L. García-Río; C. Silva-López; M.M. Cid. Double Protonation of a cis-Bipyridoallenophane Detected via Chiral-Sensing Switch: The Role of Ion Pairs. *Org. Lett.*21 - 15, pp. 5898 - 5902. 2019.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 19** Cintia Virumbrales; Marta Solas; Samuel Suárez-Pantiga; Manuel A. Fernández-Rodríguez; Marta Marín-Luna; Carlos Silva López; Roberto Sanz. Gold(i)-catalyzed nucleophilic cyclization of β -monosubstituted o-(alkynyl)styrenes: a combined experimental and computational study. *Org. Biomol. Chem.*17, pp. 9924 - 9932. 2019.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 20** Á. Vidal-Vidal; C. Silva López; O.N. Faza. Lennard-Jones Intermolecular Potentials for the Description of 6-Membered Aromatic Heterocycles Interacting with the Isoelectronic CO₂ and CS₂. *J. Phys. Chem. A.* 123 - 20, pp. 4475 - 4485. 2019.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 21** M. Marín-Luna; I. Bolaño; C. Silva López; O. Nieto Faza. Methanol directing the dual reactivity of 1,3-dien-5-yne under gold(I) catalysis: A computational study. *Comput. Theor. Chem.*1148, pp. 33 - 37. 2019.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 22** Ángel Vidal Vidal; Luis de Vicente Poutás; Olalla Nieto Faza; Carlos Silva López. On the Use of Popular Basis Sets: Impact of the Intramolecular Basis Set Superposition Error. *Molecules.* 24 - 20, pp. 3810 - 3810+11. 2019. ISSN 1420-3049
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 23** A. Cerveri; O.N. Faza; C.S. López; S. Grilli; M. Monari; M. Bandini. Phosphine-Catalyzed Stereoselective Dearomatization of 3-NO₂-Indoles with Allenates. *J. Org. Chem.*84 - 10, pp. 6347 - 6355. 2019.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 24** Castiñeira Reis, M.; Silva López, C.; and Faza, O.; Tantillo, D.. Pushing the limits of concertedness. A waltz of wandering carbocations. *Chem. Sci.*10.1039 - C8SC03567A, pp. 2159 - 2170. Ranking JCR., 2019.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 25** A. Parodi; S. Battaglioli; Y. Liu; M. Monari; M. Marín-Luna; C. Silva-López; M. Bandini. Scandium catalysed stereoselective thio-allylation of allenyl-imidates. *Chemical Communications.* 55 - 65, pp. 9669 - 9672. 2019. Disponible en Internet en: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85070478848&doi=10.1039%2fc9cc04302k&partnerID=40&md5=21baed3295dae31dcaadc1d4fc908019>>.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 26** Castiñeira Reis, M.; Marín-Luna, M.; Silva López, C.; and Faza, O.. Mechanism of the Molybdenum-Mediated Cadogan Reaction. *ACS Omega.* 3, pp. 7019 - 7026. Ranking JCR., 2018.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 27** Yang Liu; Alessandro Cerveri; Assunta De Nisi; Magda Monari; Olalla Nieto Faza; Carlos Silva Lopez and Marco Bandini. Nickel catalyzed regio- and stereoselective arylation and methylation of allenamides via coupling reactions. An experimental and computational study. *Org. Chem. Front.*5, pp. 3231 - 3239. Ranking JCR., 2018.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 28** Vidal-Vidal, Á.; Silva López, C.; and Faza, O.. Nitrogen doped nano hoops as promising CO₂ capturing devices. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20, pp. 8607 - 8615. Ranking JCR:, 2018.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 29** Á. Vidal-Vidal; E.M. Cabaleiro-Lago; C. Silva López; O.N. Faza. Rational Design of Efficient Environmental Sensors: Ring-Shaped Nanostructures Can Capture Quat Herbicides. *ACS Omega.* 3 - 12, pp. 16976 - 16988. 2018.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 30** Vidal-Vidal, Á.; Faza, O.; and Silva López, C.. CO₂ Complexes with Five-Membered Heterocycles: Structure, Topology, and Spectroscopic Characterization. *J. Phys. Chem. A.* 121, pp. 9118 - 9130. Ranking JCR:, 2017.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 31** Villar López, R.; Nieto Faza, O.; Matito, E.; and López, C.. Cycloreversion of the CO₂ trimer: a paradigmatic pseudopericyclic [2 + 2 + 2] cycloaddition reaction. *Org. Biomol. Chem.* 15, pp. 435 - 441. Ranking JCR:, 2017.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 32** Villar López, R.; Faza, O.; and Silva López, C.. Dynamic Effects Responsible for High Selectivity in a [3,3] Sigmatropic Rearrangement Featuring a Bispericyclic Transition State. *J. Org. Chem.* 82, pp. 4758 - 4765. Ranking JCR:, 2017.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 33** Santalla, H.; Faza, O.; Gómez, G.; Fall, Y.; and Silva López, C.. From Hydrindane to Decalin: A Mild Transformation through a Dyotropic Ring Expansion. *Org. Lett.* 19, pp. 3648 - 3651. Ranking JCR:, 2017.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 34** An, J.; Parodi, A.; Monari, M.; Reis, M.; Lopez, C.; and Bandini, M.. Gold-Catalyzed Dearomatization of 2-Naphthols with Alkynes. *Chem. Eur. J.* 23, pp. 17473 - 17477. Ranking JCR:, 2017.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 35** Kiriakidi, S.; Nieto Faza, O.; Kolocouris, A.; and López, C.. Governing effects in the mechanism of the gold-catalyzed cycloisomerization of allenic hydroxylamine derivatives. *Org. Biomol. Chem.* 15, pp. 5920 - 5926. Ranking JCR:, 2017.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 36** Vidal-Vidal, Á.; Silva López, C.; and Faza, O.. Lennard-Jones Potentials for the Interaction of CO₂ with Five-Membered Aromatic Heterocycles. *J. Phys. Chem. A.* 121, pp. 9518 - 9530. Ranking JCR:, 2017.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 37** Silva López, C.; Faza, O.; Mansell, A.; Theis, Z.; and Bellert, D.. Three Reaction Channels with Signature Proton Transfers in the Ni(I)-Catalyzed Decomposition of Ethyl Acetate. *Organometallics.* 36, pp. 761 - 766. Ranking JCR:, 2017.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 38** Castiñeira Reis, M.; Marín-Luna, M.; Silva López, C.; and Faza, O.. [MoO₂]²⁺-Mediated Oxygen Atom Transfer via an Unusual Lewis Acid Mechanism. *Inorg. Chem.* 56, pp. 10570 - 10575. Ranking JCR:, 2017.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 39** De Vicente Poutás, L.; Castiñeira Reis, M.; Sanz, R.; López, C.; and Faza, O.. A Radical Mechanism for the Vanadium-Catalyzed Deoxydehydration of Glycols. *Inorg. Chem.* 55, pp. 11372 - 11382. Ranking JCR: 4/46 Q1, 2016.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 40** Silva Lopez, C.; Nieto Faza, O.; De Proft, F.; and Kolocouris, A.. Assessing the attractive/repulsive force balance in axial cyclohexane C–Hax···Yax contacts: A combined computational analysis in monosubstituted cyclohexanes. *J. Comput. Chem.* pp. 2647 - 2658. Ranking JCR: 53/166 Q2, 2016.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 41** Roberto Villar; Olalla Nieto Faza; Carlos Silva López. Conformational control allows for [3,3]-sigmatropic rearrangements to proceed with torquoselectivity. *RSC Advances*.6, pp. 59181 - 59184. Ranking JCR: 59/166 Q2, 2016.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 42** González Comesaña, M.; Nieto Faza, O.; Cid, M.; and Silva López, C. Copper-Catalyzed Skeletal Rearrangement of O-Propargyl Oximes: A Mechanistic Manifold. *ChemCatChem*. 8, pp. 2696 - 2703. Ranking JCR: 29/146 Q1, 2016.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 43** Velasco, R.; Silva López, C.; Nieto Faza, O.; and Sanz, R.. Exploring the Reactivity of η -Lithiated Aryl Benzyl Ethers: Inhibition of the [1,2]-Wittig Rearrangement and the Mechanistic Proposal Revisited. *Chem. Eur. J.*22, pp. 15058 - 15068. Ranking JCR: 29/166 Q1, 2016.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 44** Castiñeira Reis, M.; López, C.; Kraka, E.; Cremer, D.; and Faza, O.. Rational Design in Catalysis: A Mechanistic Study of η -Hydride Eliminations in Gold(I) and Gold(III) Complexes Based on Features of the Reaction Valley. *Inorg. Chem.*55, pp. 8636 - 8645. Ranking JCR: 4/46 Q1, 2016.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 45** Carlos Silva López; Olalla Nieto Faza; Marek Freindorf; Elfi Kraka and Dieter Cremer. Solving the Pericyclic? Pseudopericyclic Puzzle in the Ring-Closure Reactions of 1,2,4,6-Heptatetraene Derivatives. *J. Org. Chem.*81, pp. 404 - 414. Ranking JCR: 8/59 Q1, 2016.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 46** Mansell, A.; Theis, Z.; Gutierrez, M.; Faza, O.; Lopez, C.; and Bellert, D. Submerged Barriers in the Ni⁺ Assisted Decomposition of Propionaldehyde. *J. Phys. Chem. A*. 120, pp. 2275 - 2284. Ranking JCR: 13/36 Q2, 2016.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 47** Costa, I.; Marín-Luna, M.; Comesaña, M.; Faza, O.; and Silva López, C. The Outer-Sphere Mechanism of Nitrene Transfer onto Gold(I) Alkyne Complexes. *ChemCatChem*.8, pp. 2387 - 2392. Ranking JCR: 29/146 Q1, 2016.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 48** Roberto Villar Lopez; Olalla Nieto Faza and Carlos Silva López. Accounting for Diradical Character through DFT. The Case of Vinyl Allene Oxide Rearrangement. *J. Org. Chem.*80, pp. 11206 - 11211. Ranking JCR: 7/59 Q1, 2015.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 49** Estela Álvarez; Olalla Nieto Faza; Carlos Silva López; Manuel A. Fernández-Rodríguez; and Roberto Sanz. Brønsted Acid-Catalyzed Cascade Reactions Involving 1,2-Indole Migration. *Chem. Eur. J.*21, pp. 12889 - 12893. Ranking JCR: 24/163 Q1, 2015.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 50** Roberto Villar Lopez; Olalla Nieto Faza and Carlos Silva López. Diradical ring closing reactions displaying Woodward–Hoffmann behaviour and torquoselectivity. *RSC Advances*. 5, pp. 30405 - 30408. Ranking JCR: 49/163 Q2, 2015.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 51** Gilles Schnee; Olalla Nieto Faza; David Specklin; Béatrice Jacques; Lydia Karmazin; Richard Welter; Carlos Silva López; and Samuel Dagorne. Normal-to-Abnormal NHC Rearrangement of AlIII, GaIII, and InIIItrialkyl Complexes: Scope, Mechanism, Reactivity Studies, and H₂ Activation. *Chem. Eur. J.* 21, pp. 17959 - 17972. Ranking JCR: 24/163 Q1, 2015.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 52** Silvia Castro-Fernández; María Magdalena Cid; Carlos Silva López; and Jose? Lorenzo Alonso-Gómez. Opening Access to New Chiral Macrocycles: From Allenes to Spiranes. *J. Phys. Chem. A.* 119, pp. 1747 - 1753. Ranking JCR: 11/35 Q2, 2015.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 53** Faza; O.N.; López C.S.. Computational Approaches to Homogeneous Gold Catalysis. *Top. Curr. Chem.* 357, pp. 213 - 284. Ranking JCR: 29/157 Q1, 2014.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 54** Núñez; C.; López; C.S.; Faza; O.N.; Fernández-Lodeiro; J.; Diniz; M.; Bastida; R.; Capelo; J.L.; Lodeiro; C.. Bis(o-methylserotonin)-containing iridium(III) and ruthenium(II) complexes as new cellular imaging dyes: synthesis, applications, and photophysical and computational studies. *J. Biol. Inorg. Chem.* 18, pp. 679 - 692. Ranking JCR: 9/45 Q1, 2013.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 55** Faza; O.N.; López; C.S.. Computational Study of Gold-Catalyzed Homo- and Cross-Coupling Reactions. *J. Org. Chem.* 78, pp. 4929 - 4939. Ranking JCR: 8/58 Q1, 2013.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 56** Faza; O.N.; Fernandez; I.; López; C.S.. Computational insights on the mechanism of the catalytic hydrogenation with BINAP-amine-Ru complexes: the role of base and origin of selectivity. *Chem. Commun.* 49, pp. 4277 - 4279. Ranking JCR: 20/148 Q1, 2013.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 57** Faza; O.N.; López C.S.; Fernandez; I.. Noyori Hydrogenation: Aromaticity, Synchronicity, and Activation Strain Analysis. *J. Org. Chem.* 78, pp. 5669 - 5676. Ranking JCR: 8/58 Q1, 2013.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 58** Gonzalez; M.; Rodríguez; R.A.; Cid; M.; López; C.S.. A stepwise retro-imino-ene as a key step in the mechanism of allene formation via the Crabbé acetylene homologation. *J. Comput. Chem.* 33, pp. 1236 - 1239. Ranking JCR: 34/152 Q1, 2012.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 59** Javier Fernández-Lodeiro; Cristina Núñez; Olalla N. Faza; Jose L. Capelo; Carlos Lodeiro; J. Sérgio Seixas de Melo; Carlos S. López. Novel Emissive Podands based on 8-OH-Quinoline: Synthesis, Fluorescence Materials, DFT and Complexation Studies. *Inorg. Chim. Acta.* 381, pp. 218 - 228. Ranking JCR: 22/44 Q2, 2012.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 60** Rodríguez; R.A.; Lahoz; I.R.; Faza; O.N.; Cid; M.; López; C.S.. Theoretical and experimental exploration of the photochemistry of resveratrol: beyond the simple double bond isomerization. *Org. Biomol. Chem.* 10, pp. 9175 - 9182. Ranking JCR: 12/57 Q1, 2012.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 61** López; CS; de Lera A.R.. Bond ellipticity as a measure of electron delocalization in structure and reactivity. *Curr. Org. Chem.* 15, pp. 3576 - 3593. Ranking JCR: 15/56 Q2, 2011.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 62** González Pérez; A.B.; Souto; J.A.; Silva López; C.; De Lera; A.R.. Computational study of the intramolecular pericyclic reactions of aldazines and some pseudopericyclic variants. *Eur. J. Org. Chem.*16, pp. 2933 - 2939. Ranking JCR: 14/56 Q1, 2011.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 63** Lahoz; I.R.; López; C.S.; Navarro-Vázquez; A.; Cid; M.-M.. Experimental and computational exploration of indoliziny carbene generation. A route to Biindolizines. *J. Org. Chem.*76, pp. 3266 - 3273. Ranking JCR: 9/56 Q1, 2011.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 64** Fernández-Lodeiro; J.; Nuñez; C.; Carreira; R.; Santos; H.M.; López; C.S.; Mejuto; J.C.; Capelo; J.L.; Lodeiro; C.. Novel versatile imine - Enamine chemosensor based on 6-nitro-4-oxo-4H- chromene for ion detection in solution, solid and gas-phase: Synthesis, emission, computational and MALDI-TOF-MS studies. *Tetrahedron.* 67, pp. 326 - 333. Ranking JCR: 16/56 Q2, 2011.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 65** Faza; O.N.; López; C.S.; De Lera; A.R.. On the memory of chirality in gold(I)-catalyzed intramolecular carboalkoxylation of alkynes. *J. Org. Chem.*76, pp. 3791 - 3796. Ranking JCR: 9/56 Q1, 2011.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 66** Faza; O.N.; Rodríguez; R.A.; López; C.S.. Performance of density functional theory on homogeneous gold catalysis. *Theor. Chem. Acc.*128, pp. 647 - 661. Ranking JCR: 63/134 Q2, 2011.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 67** Souto; J.A.; Pérez; M.; Silva López; C.; Álvarez; R.; Torrado; A.; De Lera; A.R.. Competing thermal electrocyclic ring-closure reactions of (2Z)-Hexa-2,4,5-trienals and their schiff bases. Structural, kinetic, and computational studies. *J. Org. Chem.*75, pp. 4453 - 4462. Ranking JCR: 8/56 Q1, 2010.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 68** Faza; O.N.; Feldman; K.S.; Silva López; C.. Cyclization cascade of allenyl azides: Synergy between theory and experiment. *Curr. Org. Chem.*14, pp. 1646 - 1657. Ranking JCR: 17/56 Q2, 2010.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 69** Silva López; C.. Molecular simulations in organic chemistry. *Curr. Org. Chem.*14, pp. 1523 - 1523. Ranking JCR: 17/56 Q2, 2010.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 70** Feldman; K.S.; Hester; D.K.; Iyer; M.R.; Munson; P.J.; Silva López; C.; Faza; O.N.. Allenyl Azide Cycloaddition Chemistry. 2,3-Cyclopentennelated Indole Synthesis through Indolidene Intermediates. *J. Org. Chem.*74, pp. 4958 - 4974. Ranking JCR: 8/57 Q1, 2009.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 71** Silva Lopez; C.; Álvarez; R.; Domínguez; M.; Nieto Faza; O.; de Lera; A. R.. Complex Thermal Behavior of 11-cis-Retinal, the Ligand of the Visual Pigments. *J. Org. Chem.*74, pp. 1007 - 1013. Ranking JCR: 8/57 Q1, 2009.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 72** Silva Lopez; C.; Nieto Faza; O.; de Lera; A. R.. Electrocyclic Ring Opening of Charged cis-Bicyclo[3.2.0]heptadiene and Heterocyclic Derivatives. The Anti-Woodward--Hoffmann Quest (II). *J. Org. Chem.*74, pp. 2396 - 2402. Ranking JCR: 8/57 Q1, 2009.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 73** Pérez; A.G.; Silva López; C.; Marco-Contelles; J.; Faza; O.N.; Soriano; E.; De Lera; A.R.. Mechanism of the gold-catalyzed rearrangement of (3-acyloxyprop-1-ynyl) oxiranes: A dual role of the catalyst. *J. Org. Chem.*74, pp. 2982 - 2991. Ranking JCR: 8/57 Q1, 2009.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 74** Lahoz; I.R.; Sicre; C.; Navarro-Vázquez; A.; Silva López; C.; Cid; M.. Mechanistic Investigation on the Formation of Indolizines from 2-Enynylpyridines. *Org. Lett.*11, pp. 4802 - 4805. Ranking JCR: 4/57 Q1, 2009.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 75** Nieto Faza; O.; Silva Lopez; C.; Álvarez; R.; de Lera; A. R.. Regio-, Peri-, and Torquoselectivity in Hydroxy Heptatrienyl Cation Electrocyclizations: The Iso/Homo-Nazarov Reaction. *Chem. Eur. J.*15, pp. 1944 - 1956. Ranking JCR: 17/140 Q1, 2009.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 76** Nieto Faza; O.; Silva Lopez; C.; González Pérez; A.; Pérez Rodríguez; M.; de Lera; A. R.. Torquoselectivity in the electrocyclic ring-opening of cyclopropyl anions. *J. Phys. Org. Chem.*22, pp. 378 - 385. Ranking JCR: 32/57 Q3, 2009.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 77** Feldman; K. S.; Hester; D. K.; Silva Lopez; C.; Nieto Faza; O.. Allenyl azide cycloaddition chemistry. photochemical initiation and CuI mediation leads to improved regioselectivity. *Org. Lett.*10, pp. 1665 - 1668. Ranking JCR: 7/55 Q1, 2008.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 78** Feldman; K. S.; Iyer; M. R.; Silva Lopez; C.; Nieto Faza; O.. Allenyl azide cycloaddition chemistry: Exploration of the scope and mechanism of cyclopentennelated dihydropyrrole synthesis through azatrimethylenemethane intermediates. *J. Org. Chem.*13, pp. 5090 - 5099. Ranking JCR: 7/55 Q1, 2008.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 79** Silva Lopez; C.; Nieto Faza; O.; de Lera; A. R.. Characterization of the switch in the mechanism of an intramolecular Diels-Alder reaction. *J. Org. Chem.*73, pp. 467 - 473. Ranking JCR: 7/55 Q1, 2008.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 80** Silva Lopez; C.; Pérez-Balado; C.; Rodríguez-Graña; P.; de Lera; A. R.. Mechanistic insights into the stereocontrolled synthesis of hexahydropyrrolo[2,3-b]indoles by electrophilic activation of tryptophan derivatives. *Org. Lett.*10, pp. 77 - 80. Ranking JCR: 4/55 Q1, 2008.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 81** Tai-Sung Lee; Carlos Silva-López; Giambasu; G. M.; Monika Martick; William G. Scott; Darrin M. York. Role of Mg²⁺ in hammerhead ribozyme catalysis from molecular simulation. *J. Am. Chem. Soc.*130, pp. 3053 - 3064. Ranking JCR: 7/127 Q1, 2008.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 82** Silva Lopez; C.; Nieto Faza; O.; Feldman; K. S.; Iyer; M. R.; Hester; D. K.. Cyclization cascade of allenyl azides: A dual mechanism. *J. Am. Chem. Soc.*129, pp. 7638 - 7646. Ranking JCR: 7/128 Q1, 2007.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 83** Silva Lopez; C.; Nieto Faza; O.; de Lera; A.R.. Electrocyclic ring opening of cis-bicyclo[m.n.0]alkenes: The anti-woodward-hoffmann quest. *Chem. Eur. J.*13, pp. 5009 - 5017. Ranking JCR: 10/128 Q1, 2007.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 84** Tai-Sung Lee; Carlos Silva-López; Monika Martick; William G. Scott; Darrin M. York. Insight into the role of Mg²⁺ in hammerhead ribozyme catalysis from X-ray crystallography and molecular dynamics simulation. *J. Chem. Theory Comput.*3, pp. 325 - 327. Ranking JCR: 16/128 Q1, 2007.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 85** Nieto Faza; O.; Silva Lopez; C.; Souto; J. A.; Alvarez; R.; de Lera; A. R.. Pseudopericyclic design drives antara-antara [1,5] methylene sigmatropic shifts from a stepwise to a concerted mechanism. *J. Comput. Chem.*28, pp. 1411 - 1416. Ranking JCR: 17/128 Q1, 2007.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 86** Nieto Faza; O.; Silva Lopez; C.; de Lera; A. R.. Sulfoxide-induced stereoselection in [1,5]-sigmatropic hydrogen shifts of vinylallenes. A computational study. *J. Org. Chem.*72, pp. 2617 - 2624. Ranking JCR: 9/56 Q1, 2007.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 87** Alvarez; R; Nieto Faza; O; Silva Lopez; C. de Lera; A. R.. Computational characterization of a complete palladium-catalyzed cross-coupling process: The associative transmetalation in the Stille reaction. *Org. Lett.*8, pp. 35 - 38. Ranking JCR: 5/56 Q1, 2006.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 88** Silva Lopez; C.; Nieto Faza; O.; de Lera; A.R.. Computational study and analysis of the kinetic isotope effects of the rearrangement of cis-bicyclo[4.2.0]oct-7-ene to cis,cis-cycloocta-1,3-diene. *Org. Lett.*8, pp. 2055 - 2058. Ranking JCR: 5/56 Q1, 2006.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 89** Silva Lopez; C.; Nieto Faza; O.; Alvarez; R.; de Lera; A. R.. Cycloisomerization of activated 2-E-4-Z-heptatrienoate and its relevance to crispatene (bio)synthesis. A case of concerted and stepwise uncertainty. *J. Org. Chem.*71, pp. 4497 - 4501. Ranking JCR: 8/56 Q1, 2006.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 90** Range; K.; Silva Lopez; C.; Moser; A.; York; D. M.. Multilevel and Density Functional Electronic Structure Calculations of Proton Affinities and Gas-Phase Basicities Involved in Biological Phosphoryl Transfer. *J. Phys. Chem. A.* 110, pp. 791 - 797. Ranking JCR: 5/31 Q1, 2006.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 91** Timothy J. Giese; Brent A. Gregersen; Yun Liu; Evelyn Mayaan; Adam Moser; Kevin Range; Olalla Nieto Faza; Carlos Silva Lopez; Angel R. de Lera; Xabier Lopez; Gijs Schaftenaar; Tai-Sung Lee; George Karypis; Darrin M. York.. QCRNA 1.0: A database of Quantum Calculations for RNA catalysis. *J. Mol. Graph. Model.*25, pp. 423 - 433. Ranking JCR: 7/87 Q1, 2006.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 92** Susana López; Virginia Rodríguez; Javier Montenegro; Carlos Saá; Rosana Alvarez; Carlos Silva López; Angel R. de Lera; Rosana Simón; Tzvetana Lazarova; Esteve Padrós. Synthesis of N-Heteroaryl Retinals and their Artificial Bacteriorhodopsins. *ChemBioChem.* 6, pp. 2078 - 2087. Ranking JCR: 6/35 Q1, 2006.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 93** Nieto Faza; O; Silva Lopez; C.; Alvarez; R.; de Lera; A. R.. The mechanism of the gold(I) catalyzed Rautenstrauch rearrangement: a center-to-helix-to-center chirality transfer. *J. Am. Chem. Soc.*128, pp. 2434 - 2437. Ranking JCR: 7/124 Q1, 2006.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 94** Souto; J.A.; Silva Lopez; C.; Nieto Faza; O.; Alvarez; R.; de Lera; A.R.. : 2-Alkylidenesulfol-3-enes by (Regio- and Stereoselective Cheletropic Addition of SO₂ to (Di)vinylallenes. *Org. Lett.*7, pp. 1565 - 1568. Ranking JCR: 5/55 Q1, 2005.



Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 95** Silva Lopez; C.; Nieto Faza; O.; Lopez; S.; de Lera; A.R.. Computation of vertical excitation energies of retinal and analogs: scope and limitations. *J. Comput. Chem.* 27, pp. 116 - 123. Ranking JCR: 13/125 Q1, 2005.

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 96** Silva Lopez; C.; Nieto Faza; O.; Cossio; F.P.; York; D.M.; de Lera; A.R.. Ellipticity: A convenient tool to characterize electrocyclic reactions. *Chem. Eur. J.* 11, pp. 1734 - 1738. Ranking JCR: 8/125 Q1, 2005.

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 97** Nieto Faza; O.; Silva Lopez; C.; Alvarez; R.; de Lera; A.R.. Mechanistic subtleties in the cyclopentannulation of allenolate allyl carbamates: the origin of the center-to-center chirality transfer. *Chem. Commun.* 34, pp. 4285 - 4287. Ranking JCR: 9/125 Q1, 2005.

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 98** Silva Lopez; C.; Nieto Faza; O.; de Lera; A.R.; York; D.M.. Pseudorotation barriers of biological oxyphosphoranes: a challenge for simulations of ribozyme catalysis. *Chem. Eur. J.* 11, pp. 2081 - 2093. Ranking JCR: 8/125 Q1, 2005.

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 99** Silva Lopez; C.; Alvarez; R.; Vaz; B.; Nieto Faza; O.; de Lera; A.R.. Simple Diastereoselectivity of the BF₃ OEt₂-Catalyzed Vinylogous Mukaiyama Aldol Reaction of 2-(Trimethylsiloxy)furans with Aldehydes. *J. Org. Chem.* 70, pp. 3654 - 3659. Ranking JCR: 7/55 Q1, 2005.

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 100** Nieto Faza; O.; Silva Lopez; C.; Alvarez; R.; de Lera; A. R.. Conrotatory ring opening reactions of cyclopropyl anions in monocyclic and tricyclic systems. *Org. Lett.* 6, pp. 901 - 904. Ranking JCR: 5/58 Q1, 2004.

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 101** Silva Lopez; C.; Nieto Faza; O.; Gregersen; B.; Lopez; X. de Lera; A.R.; York; D.M.. Pseudorotation of natural and chemically modified biological phosphoranes: implications for RNA catalysis. *ChemPhysChem.* 5, pp. 1045 - 1049. Ranking JCR: 18/108 Q1, 2004.

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 102** Nieto Faza; O.; Silva Lopez; C.; Alvarez; R.; de Lera; A.R.. Solvolytic Ring-Opening Reactions of Cyclopropyl Bromides. An Assessment of the Woodward-Hoffmann-De Puy. *J. Org. Chem.* 69, pp. 9002 - 9010. Ranking JCR: 7/58 Q1, 2004.

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 103** Nieto Faza; O.; Silva López; C.; Alvarez; R.; de Lera; A. R.. The Woodward-Hoffmann-DePuy rule revisited. *Org. Lett.* 6, pp. 905 - 908. Ranking JCR: 5/58 Q1, 2004.

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 104** Nieto Faza; O.; Silva Lopez; C.; Alvarez; R.; de Lera; A.R.. Theoretical study of the electrocyclic ring closure of hydroxypentadienyl cations. *Chem. Eur. J.* 10, pp. 4324 - 4333. Ranking JCR: 10/125 Q1, 2004.

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 105** Silva Lopez; C.; Nieto Faza; O.; York; D.M.; de Lera; A.R.. Theoretical study of the vinyl allene oxide to cyclopent-2-en-1-one rearrangement: mechanism, torquoselectivity and solvent effects. *J. Org. Chem.* 69, pp. 3635 - 3644. Ranking JCR: 7/58 Q1, 2004.

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista



106 Carlos Silva Lopez; Olalla Nieto Faza. Solvation. Applied Theoretical Organic Chemistry. Capítulo - 4, pp. 97 - 146. World Scientific, 2018.

Tipo de producción: Capítulo de libro

Tipo de soporte: Libro

107 Tai-Sung Lee; George M. Giambasu; Adam Moser; Kwangho Nam; Carlos Silva-Lopez; Francesca Guerra; Olalla Nieto-Faza; Timothy J. Giese; Jiali Gao and Darrin M. York. Multi-scale Quantum Models for Biocatalysis: Modern Techniques and Applications. 7, pp. 377 - 408. New YorkSpringer, 2009.

Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

1 **Título del trabajo:** Cajas misteriosas como herramienta de motivación: una vision constructivista a través de casos de toxicología forense

Nombre del congreso: XXIII Encontro Galego-Portugués de Química

Ciudad de celebración: Ferrol, España

Fecha de celebración: 15/11/2017

Fecha de finalización: 17/11/2017

Angel Vidal Vidal; Olalla Nieto Faza; Carlos Silva López.

2 **Título del trabajo:** Potential Energy Landscape And Spectroscopical Characterization Of Aza-Nanohoops: Promising Structures For Gas Capture

Nombre del congreso: 11th European Conference on Theoretical and Computational Chemistry

Ciudad de celebración: Barcelona, España

Fecha de celebración: 04/09/2017

Fecha de finalización: 07/09/2017

Angel Vidal Vidal; Olalla Nieto Faza; Carlos Silva López.

3 **Título del trabajo:** Computational Design Of New Catalysts For Biomass Valorization

Nombre del congreso: XXXVI Reunión Bienal de la RSEQ

Ciudad de celebración: Sitges, España

Fecha de celebración: 25/06/2017

Fecha de finalización: 29/06/2017

Marta Castiñeira Reis; Luis Carlos de Vicente Poutás; Marta Marín Luna; Carlos Silva López; Olalla Nieto Faza.

4 **Título del trabajo:** Exploring The Limits Of Concertness: An Orchestra Of Terpenoid Carbocations.

Nombre del congreso: XXXVI Reunión Bienal de la RSEQ

Ciudad de celebración: Sitges, España

Fecha de celebración: 25/06/2017

Fecha de finalización: 29/06/2017

Marta Castiñeira Reis; Dean Tantillo; Carlos Silva López; Olalla Nieto Faza.

5 **Título del trabajo:** Transition Metal Catalysis Without Environment Effects. What to Expect

Nombre del congreso: XXXVI Reunión Bienal de la RSEQ

Ciudad de celebración: Sitges, España

Fecha de celebración: 25/06/2017

Fecha de finalización: 29/06/2017

Carlos Silva López; Olalla Nieto Faza.



- 6** **Título del trabajo:** Computational Insights Into Gold-Catalyzed Cross-Coupling Reactions
Nombre del congreso: XXXIV Reunión Bienal de la RSEQ
Ciudad de celebración: Santander, España
Fecha de celebración: 15/09/2013
Fecha de finalización: 18/09/2013
Olalla Nieto Faza; Carlos Silva López.
- 7** **Título del trabajo:** Selection Rules in Radical Cyclizations
Nombre del congreso: XXXIV Reunión Bienal de la RSEQ
Ciudad de celebración: Santander, España
Fecha de celebración: 15/09/2013
Fecha de finalización: 18/09/2013
Roberto Villar; Carlos Silva López; Olalla Nieto Faza.
- 8** **Título del trabajo:** Surveying The Mechanism Of Kinamycin Cytotoxicity
Nombre del congreso: XXXIV Reunión Bienal de la RSEQ
Ciudad de celebración: Santander, España
Fecha de celebración: 15/09/2013
Fecha de finalización: 18/09/2013
Carlos Silva López; Roi Alvarez Rodriguez; Olalla Nieto Faza.
- 9** **Título del trabajo:** Mechanism of Metal Catalyzed Propargyl Ester Migrations
Nombre del congreso: 8th Congress on Electronic Structure, Principles and Applications (ESPA 2012)
Ciudad de celebración: Barcelona, España
Fecha de celebración: 26/06/2012
Fecha de finalización: 29/06/2012
Antón Brión Rios; Olalla Nieto Faza; Carlos Silva López.
- 10** **Título del trabajo:** On the Ni and Co-Mediated Mechanism of Acetone Decomposition
Nombre del congreso: 8th Congress on Electronic Structure, Principles and Applications (ESPA 2012)
Ciudad de celebración: Barcelona, España
Fecha de celebración: 26/06/2012
Fecha de finalización: 29/06/2012
Carlos Silva López; Olalla Nieto Faza.
- 11** **Título del trabajo:** Stepwise mechanism for the Au-catalyzed cyclization of monoallylic diols
Nombre del congreso: 8th Congress on Electronic Structure, Principles and Applications (ESPA 2012)
Ciudad de celebración: Barcelona, España
Fecha de celebración: 26/06/2012
Fecha de finalización: 29/06/2012
Olalla Nieto Faza; Carlos Silva López.
- 12** **Título del trabajo:** Computational Study of the Mechanism of Formation of B-Lactams from O-Propargyl Arylaldoximes
Nombre del congreso: XXXIII Reunión Bienal de la RSEQ
Ciudad de celebración: Valencia, España
Fecha de celebración: 25/07/2011
Fecha de finalización: 28/07/2011
Carlos Silva López y Olalla Nieto Faza.



- 13** **Título del trabajo:** Modeling Homogeneous Gold Catalysis
Nombre del congreso: XXXIII Reunión Bienal de la RSEQ
Ciudad de celebración: Valencia, España
Fecha de celebración: 25/07/2011
Fecha de finalización: 28/07/2011
Olalla Nieto Faza y Carlos Silva López.
- 14** **Título del trabajo:** Computational Exploration of the Five-Bond-Breaking Catalytic Mechanism
Nombre del congreso: World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 17/06/2011
Fecha de finalización: 22/06/2011
Carlos Silva López y Olalla Nieto Faza.
- 15** **Título del trabajo:** Homogeneous catalysis with just gold. A Mechanistic study
Nombre del congreso: World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 17/06/2011
Fecha de finalización: 22/06/2011
Olalla Nieto Faza y Carlos Silva López.
- 16** **Título del trabajo:** Computational Studies in Homogeneous Gold Catalysis
Nombre del congreso: II Simposio Iberoamericano de Química Orgánica (SIBEAQO II)
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 08/09/2010
Fecha de finalización: 12/09/2010
Olalla Nieto Faza; Roi Alvarez Rodriguez; Carlos Silva López.
- 17** **Título del trabajo:** Theoretical and Experimental Study of Resveratrol Photoisomerization: Characterization of 2,4,6-trihydroxyphenanthrene as a Photoproduct
Nombre del congreso: 23 Reunión Bienal de Química Orgánica
Ciudad de celebración: Murcia, España
Fecha de celebración: 16/06/2010
Fecha de finalización: 18/06/2010
Roi Alvarez; Inma R. Lahoz; Olalla Nieto Faza; Magdalena Cid; Carlos Silva López.
- 18** **Título del trabajo:** Estudio computacional del mecanismo de formación de B-Lactamas a partir de O-Propargil Arilaloximas
Nombre del congreso: Segundo Encuentro Gallego de Cinética y Catálisis (II ECG2)
Ciudad de celebración: Lugo, España
Fecha de celebración: 29/01/2010
Fecha de finalización: 31/01/2010
Olalla Nieto Faza; Carlos Silva López.
- 19** **Título del trabajo:** Sinergia entre experimento y computación: nuevas herramientas sintéticas para la preparación de alcaloides con actividad biológica
Nombre del congreso: Segundo Encuentro Gallego de Cinética y Catálisis (II ECG2)
Ciudad de celebración: Lugo, España
Fecha de celebración: 29/01/2010
Fecha de finalización: 31/01/2010
Carlos Silva López; Olalla Nieto Faza.



- 20** **Título del trabajo:** Synthesis of indolizines from 2-enynylpyridines via a pseudocoarctate reaction
Nombre del congreso: 10th Tetrahedron Symposium
Ciudad de celebración: Paris, Francia
Fecha de celebración: 23/01/2009
Fecha de finalización: 26/01/2009
Magdalena Cid; Inma R. Lahoz; Cristina Sicre; Armando Navarro-Vázquez; Carlos Silva López.
- 21** **Título del trabajo:** Estudio computacional de la isomerización fotoquímica de derivados del estilbena
Nombre del congreso: Encuentro Gallego de Cinética y Catálisis (ECG2)
Ciudad de celebración: Orense, España
Fecha de celebración: 12/12/2008
Fecha de finalización: 14/12/2008
Roi Alvarez Rodriguez; Carlos Silva López; Olalla Nieto Faza.
- 22** **Título del trabajo:** Mecanismo de Catálisis de la Ribozima Hammerhead
Nombre del congreso: Encuentro Gallego de Cinética y Catálisis (ECG2)
Ciudad de celebración: Orense, España
Fecha de celebración: 12/12/2008
Fecha de finalización: 14/12/2008
Carlos Silva López; Tai-Sung Lee; Darrin M. York.
- 23** **Título del trabajo:** Selectividad en reacciones catalizadas por oro
Nombre del congreso: Encuentro Gallego de Cinética y Catálisis (ECG2)
Ciudad de celebración: Orense, España
Fecha de celebración: 12/12/2008
Fecha de finalización: 14/12/2008
Olalla Nieto Faza; Carlos Silva López; Angel R. de Lera.
- 24** **Título del trabajo:** Complexity under Control: A Theoretical Mechanistic Study of Gold and Platinum Catalyzed Rearrangements
Nombre del congreso: World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)
Ciudad de celebración: Sydney, Australia
Fecha de celebración: 14/09/2008
Fecha de finalización: 19/09/2008
Olalla Nieto Faza; Carlos Silva López; Adán B. González; Angel R. de Lera.
- 25** **Título del trabajo:** Thermal Isomerization of 11-cis-Retinal. An Unexpected Manifold
Nombre del congreso: World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)
Ciudad de celebración: Sydney, Australia
Fecha de celebración: 14/09/2008
Fecha de finalización: 19/09/2008
Carlos Silva López; Rosana Alvarez; Marta Domínguez; Olalla Nieto Faza; Angel R. de Lera.
- 26** **Título del trabajo:** Torquoselectivity in the electrocyclic ring-opening of cyclopropyl anions
Nombre del congreso: 19th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC)
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 13/06/2008
Fecha de finalización: 18/06/2008
Olalla Nieto Faza; Adán González Pérez; Martín Pérez Rodríguez; Carlos Silva López; Angel R. de Lera.



- 27** **Título del trabajo:** Electrocyclic ring opening of fused cyclobutenes. The Anti-Woodward-Hoffmann Quest
Nombre del congreso: 42nd IUPAC Congress
Ciudad de celebración: Glasgow,
Fecha de celebración: 02/08/2007
Fecha de finalización: 07/08/2007
Carlos Silva López; Olalla Nieto Faza; Angel R. de Lera.
- 28** **Título del trabajo:** Theoretical Study of Bis(Pseudo)Pericyclic Reactions in Symmetrical Azines
Nombre del congreso: Electronic Structure, Principles and Applications (ESPA)
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 18/07/2006
Fecha de finalización: 21/07/2006
Adan González Pérez; Carlos Silva López; Olalla Nieto Faza; Angel R. de Lera.
- 29** **Título del trabajo:** A computational approach to selection rules in organic chemistry
Nombre del congreso: 24th Austin Symposium on Molecular Structure and Dynamics
Ciudad de celebración: Dallas,
Fecha de celebración: 03/2006
Olalla Nieto Faza; Carlos Silva López; Angel R. de Lera; Roberto Villar López.
- 30** **Título del trabajo:** Modeling copper catalysis to synthesize heterocyclic alkaloids. A story of synergistic collaboration between theory and experiment
Nombre del congreso: 24th Austin Symposium on Molecular Structure and Dynamics
Ciudad de celebración: Dallas,
Fecha de celebración: 03/2006
Carlos Silva López; Olalla Nieto Faza.
- 31** **Título del trabajo:** Reaction Mechanisms in Catalysis for Biomass Valorization
Nombre del congreso: 27th Austin Symposium on Molecular Structure and Dynamics
Ciudad de celebración: Dallas,
Fecha de celebración: 03/2005
Olalla Nieto Faza; Carlos Silva López; Marta Castiñeira Reis; Luis Carlos de Vicente Poutás; Marta Marín Luna.
- 32** **Título del trabajo:** Twisting the Concept of Torquoselectivity. From Sigmatropic Processes to Dynamics
Nombre del congreso: 27th Austin Symposium on Molecular Structure and Dynamics
Ciudad de celebración: Dallas,
Fecha de celebración: 03/2005
Carlos Silva López; Roberto Villar; Olalla Nieto Faza.
- 33** **Título del trabajo:** Mechanistic characterization of the hydrolysis of methyl ethylene phosphate and the phosphoryl transfer reaction catalyzed by phosphoglucomutase
Nombre del congreso: Computational Chemical Dynamics: from gas-phase to condensed-phase systems
Ciudad de celebración: Minneapolis,
Fecha de celebración: 07/10/2004
Fecha de finalización: 09/10/2004
Olalla Nieto Faza; Carlos Silva López; Angel R. de Lera; Darrin M. York.
- 34** **Título del trabajo:** Phosphate hydrolysis in solution and the transphosphorilation in phosphoglucomutase
Nombre del congreso: Computational Chemical Dynamics: from gas-phase to condensed-phase systems
Ciudad de celebración: Minneapolis,



Fecha de celebración: 07/10/2004

Fecha de finalización: 09/10/2004

Olalla Nieto Faza; Carlos Silva López; Angel R. de Lera; Darrin M. York.

35 Título del trabajo: Pseudorotation of natural and chemically modified biological phosphoranes: implications for RNA catalysis

Nombre del congreso: Computational Chemical Dynamics: from gas-phase to condensed-phase systems

Ciudad de celebración: Minneapolis,

Fecha de celebración: 07/10/2004

Fecha de finalización: 09/10/2004

Carlos Silva López; Olalla Nieto Faza; Angel R. de Lera; Darrin M. York.

36 Título del trabajo: Synthesis and biological evaluation of new merocyanine-type retinal analogues

Nombre del congreso: Twelfth FEChem Conference on Heterocycles in Bio-organic Chemistry

Ciudad de celebración: Siena, Italia

Fecha de celebración: 20/06/2004

Fecha de finalización: 24/06/2004

Susana López; Virginia Rodríguez; Javier Montenegro; Carlos Saá; Angel R. De Lera; Rosana Álvarez; Carlos Silva; Esteve Padrós; Rosana Simón.

37 Título del trabajo: Artificial pigments of bacteriorhodopsin with N-heterocyclic aromatic retinal analogues

Nombre del congreso: VIth European Symposium of the Protein Society

Ciudad de celebración: Barcelona, España

Fecha de celebración: 30/04/2004

Rosana Simón, Susana López; Virginia Rodríguez; Javier Montenegro; Carlos Saá; Angel R. De Lera; Rosana Álvarez; Carlos Silva; Tzvetana Lazarova; Esteve Padrós.

38 Título del trabajo: On the Crabbé Homologation of Terminal Alkynes. Limitations and Scope of New Catalysts

Nombre del congreso: 9th Congress on Electronic Structure, Principles and Applications (ESPA 2014)

Ciudad de celebración: Badajoz, España

Fecha de celebración: 02/2004

Marta González Comesaña; Olalla Nieto Faza; Magdalena Cid Fernández; Carlos Silva López.

39 Título del trabajo: A computational approach to selection rules in organic chemistry

Nombre del congreso: 25th Austin Symposium on Molecular Structure and Dynamics

Ciudad de celebración: Dallas,

Fecha de celebración: 01/2004

Olalla Nieto Faza; Carlos Silva López; Roberto Villar López.

40 Título del trabajo: Unexpected Isomerization in a N-Heterocyclic Carbene Frustrated Base

Nombre del congreso: 25th Austin Symposium on Molecular Structure and Dynamics

Ciudad de celebración: Dallas,

Fecha de celebración: 01/2004

Carlos Silva López; Olalla Nieto Faza; Samuel Dagorne.



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

Comités científicos, técnicos y/o asesores

- 1 Título del comité:** Comisión de expertos para la evaluación de proyectos financiados por el Ministero dell'Università e della Ricerca
Entidad de afiliación: Ministero dell'Università e della Ricerca (República Italiana)
Fecha de inicio: 2018
- 2 Título del comité:** ACS Petroleum Research Fund Panel
Entidad de afiliación: ACS Petroleum Research Fund
Fecha de inicio: 2012
- 3 Título del comité:** Comisión de expertos para la evaluación de proyectos financiados por el Ministerio de Ciencia e Innovación
Entidad de afiliación: Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva (ANEP)
Fecha de inicio: 2012
- 4 Título del comité:** Comisión de evaluación de proyectos de I+D+i
Entidad de afiliación: Secretaria Nacional de Educación Superior, Ciencia, Tecnología e Innovación (República de Ecuador)
Fecha de inicio: 2010
- 5 Título del comité:** Foro evaluador de las convocatorias de I+D y de colaboración internacional en I+D
Entidad de afiliación: Secretaria Nacional de Ciencia, Tecnología e Innovación (República de Panamá)
Fecha de inicio: 2007

Organización de actividades de I+D+i

- 1 Título de la actividad:** Advanced Spectroscopic Tools in Biomolecular Research (SpecBioTools)
Tipo de actividad: Congreso/Workshop **Ámbito geográfico:** Internacional
Fecha de inicio: 2018
- 2 Título de la actividad:** Simulations in Organic Chemistry (SimOC 2011)
Tipo de actividad: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Fecha de inicio: 2016



Otros méritos

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

- Entidad de realización:** Rutgers University
Facultad, instituto, centro: Laboratory for Biomolecular Simulation Research // Cyberlearning Innovation and Research Center
Ciudad entidad realización: Piscataway, Estados Unidos de América
Fecha de inicio: 01/04/2019 **Duración:** 5 meses
Nombre del programa: Innovación docente en química desde un punto de vista científico. Revisión del mecanismo de replicación de la ribozima HHR
Objetivos de la estancia: Invitado/a
- Entidad de realización:** South Methodist University
Ciudad entidad realización: Dallas,
Fecha de inicio: 01/04/2015 **Duración:** 140 días
Nombre del programa: Unified Reaction Valley Approach
Objetivos de la estancia: Invitado/a
- Entidad de realización:** University of Minnesota. Institute of Technology
Ciudad entidad realización: Minneapolis, Estados Unidos de América
Fecha de inicio: 01/07/2010 **Duración:** 56 días
Nombre del programa: Multi-Scale Quantum Models for Ribozyme Catalysis
Objetivos de la estancia: Invitado/a
- Entidad de realización:** University of Minnesota. Institute of Technology
Ciudad entidad realización: Minneapolis, Estados Unidos de América
Fecha de inicio: 01/08/2008 **Duración:** 168 días
Nombre del programa: Metodos hibridos QM/MM aplicados o mecanismo de autocatalisis de ribozimas
Objetivos de la estancia: Invitado/a
- Entidad de realización:** University of Minnesota. Institute of Technology
Ciudad entidad realización: Minneapolis, Estados Unidos de América
Fecha de inicio: 01/08/2007 **Duración:** 168 días
Nombre del programa: Estudio QM/MM del proceso de autocatálisis de RNA en ribozimas
Objetivos de la estancia: Invitado/a
- Entidad de realización:** University of Minnesota. Institute of Technology
Ciudad entidad realización: Minneapolis, Estados Unidos de América
Fecha de inicio: 22/02/2006 **Duración:** 280 días
Nombre del programa: Estudio QM/MM del proceso de autocatálisis de RNA en ribozimas
Objetivos de la estancia: Contratado/a
- Entidad de realización:** University of Minnesota. Institute of Technology
Ciudad entidad realización: Minneapolis, Estados Unidos de América
Fecha de inicio: 01/06/2005 **Duración:** 56 días
Nombre del programa: Afinidades de protón y basicidad en fase gas de moléculas relacionadas con la catálisis de ARN. Hacia la construcción de un nuevo hamiltoniano semiempírico

**Objetivos de la estancia:** Doctorado/a

- 8 Entidad de realización:** University of Minnesota. Institute of Technology
Ciudad entidad realización: Minneapolis, Estados Unidos de América
Fecha de inicio: 01/06/2004 **Duración:** 140 días
Nombre del programa: Reactividad de fosforanos en RNA, efecto tio
Objetivos de la estancia: Doctorado/a
- 9 Entidad de realización:** University of Minnesota. Institute of Technology
Ciudad entidad realización: Minneapolis, Estados Unidos de América
Fecha de inicio: 01/06/2003 **Duración:** 112 días
Nombre del programa: Pseudorotacion de fosforanos relevantes en autocatalisis de ARN
Objetivos de la estancia: Doctorado/a
- 10 Entidad de realización:** Universidad del País Vasco. Departamento de Química Orgánica
Ciudad entidad realización: San Sebastián, España
Fecha de inicio: 01/06/2002 **Duración:** 84 días
Nombre del programa: Estudio mecanístico de la biosíntesis de prostaglandinas a partir de vinil alenos
Objetivos de la estancia: Doctorado/a

Resumen de otros méritos

- 1 Descripción del mérito:** Acreditación ACSUG como Profesor Contratado Doctor
- 2 Descripción del mérito:** Actividad docente en dos asignaturas (Recursos básicos na Formación do Licenciado en Química y Experimentación en Química Orgánica) del plan piloto de adaptación al Marco Europeo de Educación Superior (Bolonia), material didáctico y acción tutorial.
- 3 Descripción del mérito:** Ciclo Superior de Inglés en la Escuela Oficial de Idiomas
- 4 Descripción del mérito:** Curso de Perfeccionamento de Lingua Galega (75 horas) (2007)
- 5 Descripción del mérito:** Elaboración de material docente de la nueva asignatura multidepartamental (Química Física, Química Orgánica, Química Analítica, Química Inorgánica) de contenidos transversales Recursos básicos na Formación do Licenciado en Química integrada en el Plan de Acción Tutorial de adaptación al Marco Europeo de Educación Superior.
- 6 Descripción del mérito:** Mención Especial Premio Nacional de Fin de Carrera (2002)
- 7 Descripción del mérito:** Minnesota Supercomputing Institute Research Scholar (2008)



- 8 Descripción del mérito:** Participación en un proyecto de innovación educativa en la Facultad de Química consistente en un programa de divulgación a través de posters sobre la vida de científicos eminentes (2007-2008)
- 9 Descripción del mérito:** Premio Extraordinario de Doctorado de la Universidad de Vigo (2008)
- 10 Descripción del mérito:** Tesis de Licenciatura, Departamento de Química Orgánica, Universidade de Vigo. Síntesis de Análogos Fluorescentes para el Estudio de la Visión. Diciembre 2002. Calificación: Sobresaliente
- 11 Descripción del mérito:** Young Chemist Award. 42nd IUPAC Congress (2009)
- 12 Descripción del mérito:** • Asistencia al 3er Ciclo de Conferencias: Docencia e Innovación Educativa en el Escenario de los Nuevos Planes de Estudio Universitarios Vicerrectorado de Formación en Innovación Educativa, Universidade de Vigo (10 horas) 2009
- 13 Descripción del mérito:** • Curso Mathematics of Chemistry Institute for Mathematics and its Applications, University of Minnesota. 2008.
- 14 Descripción del mérito:** • Curso de Aptitud Pedagógica (CAP) Universidad Complutense de Madrid. Instituto de Ciencias de la Educación (180 horas). Curso 2003/04
- 15 Descripción del mérito:** • Curso de Formación en Xénero Vicerrectorado de Formación en Innovación Educativa, Universidade de Vigo (14 horas) 2007
- 16 Descripción del mérito:** • Curso en Técnicas de Aprendizaje Colaborativo y Aprendizaje Basado en Problemas Vicerrectorado de Formación en Innovación Educativa, Universidade de Vigo (14 horas) 2009
- 17 Descripción del mérito:** • Tercera Escuela de Química Teórica Departamento de Química, Universidad de las Islas Baleares. (40 horas) 2001. Calificación de Sobresaliente