



Generado desde: Editor CVN de FECYT
Fecha del documento: 01/10/2021
v 1.4.3
6a8407f83eac48ce9b084983574d342b

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.

Licenciado en Ciencias Químicas por la Universidad de Santiago de Compostela en 1993. Doctor en Ciencias Químicas por la misma universidad en 1998. Premio extraordinario de doctorado de la Facultad de Química de la Universidad de Santiago de Compostela el curso 1997-98. Beca postdoctoral de la Xunta de Galicia/Univ. de Santiago de Compostela. A partir de Noviembre de 1999 formo parte de la plantilla de personal de la Universidad de Santiago de Compostela, primero como profesor asociado a tiempo parcial (1999-2000), a continuación a tiempo completo (2000-2006) y a partir de 2006 como profesor contratado doctor. A partir de 2010 hasta la actualidad ocupo una plaza de profesor titular de universidad. Desde el 06/02/2015 he sido reconocido con la acreditación positiva de la ANECA para catedrático de universidad.

En cuanto a mis tareas docentes, he impartido docencia en todos los niveles universitarios (primer ciclo, segundo ciclo, cursos de doctorado, cursos de máster) y en diversas disciplinas (Química, Veterinaria, Ingeniería Técnica Industrial especialidad en Química Industrial, Ingeniería de Procesos Químicos Industriales ...). Como resultado, se me han concedido cuatro tramos docentes consecutivos: 1995-2016.

Mi trabajo de investigación se ha llevado a cabo en el campo de la química computacional, trabajando con la variedad de métodos teóricos disponibles en química cuántica, por lo que tengo una experiencia consolidada en el manejo de las diversas metodologías que permiten analizar gran variedad de problemas químicos. A lo largo de estos años, la mayor parte de mi investigación se ha centrado principalmente en el estudio teórico de las interacciones no covalentes y sus efectos en los sistemas químicos. Esta línea de investigación arranca durante mi periodo de tesis y ha continuado hasta la actualidad centrada en diferentes facetas del problema de la modelización de las interacciones no covalentes. El trabajo más reciente está relacionado con el estudio de la interacción en sistemas aromáticos curvos, de gran interés por su uso potencial como receptores de fullerenos para su aplicación en química supramolecular o ciencia de materiales.

La mayor parte de esta investigación se ha presentado en un buen número de comunicaciones a congresos internacionales y artículos publicados. Soy coautor de 110 artículos (68 Q1) en revistas internacionales, muchos de ellos como primer autor, que han sido citados un total de 1900 veces, por lo que tengo un índice de impacto de 25. He participado en diversos proyectos de I+D de ámbito nacional/autonómico, actuando como Investigador Principal en algunos de ámbito nacional, y he sido codirector de cinco tesis de doctorado presentadas entre los años 2008 y 2019. Además, he venido actuando de forma regular como revisor en varias revistas

**C****V****N**

CURRÍCULUM VÍTAE NORMALIZADO

6a8407f83eac48ce9b084983574d342b

de prestigio internacional, y he formado parte del comité organizador o científico en ocho congresos de carácter internacional.

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.

Cuatro sexenios de investigación reconocidos desde 1996 hasta 2019, ininterrumpidamente. Último concedido el 17 de Julio de 2020

17 publicaciones en los últimos 5 años (10 Q1, de acuerdo con el JCR Science Edition del año correspondiente)

110 publicaciones en total (68 Q1)

Citas totales 1900.

Promedio de citas en los últimos cinco años: 115.

Índice h: 25

Cinco tesis dirigidas:

“Estudio teórico de reacciones pericíclicas catalizadas por litio y cicloadiciones multicomponente catalizadas por rodio y rutenio” por M. Merced Montero Campillo, 2008.

“On the interaction between ions and complex aromatic systems: amino acid side chains, ion channels and buckybowls” por Alba Campo cacharrón, 2014.

"Tailoring buckybowls for fullerene recognition" por Daniela Josa, 2015

"Computational study of the capability of the side chains of amino acids for setting up cation- π interactions relevant in protein stability and structure" por Ana A. Rodríguez Sanz, 2015.

"Theoretical study of fullerene encapsulation by cycloparaphenylene-based carbon nanorings" por Iván González Veloso, 2019

Situación profesional actual

Entidad empleadora: Universidade de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad

Departamento: Facultade de Ciencias

Categoría profesional: Titular de universidad

Fecha de inicio: 28/06/2010

Modalidad de contrato: Funcionario/a

Régimen de dedicación: Tiempo completo

Primaria (Cód. Unesco): 230000 - Química

Secundaria (Cód. Unesco): 221023 - Teoría cuántica; 230615 - Mecanismos de reacción; 230618 - Estructuras de las moléculas orgánicas; 230700 - Química física

Funciones desempeñadas: En el momento actual, desarrollo mis labores docentes en la Facultad de Ciencias de la Universidad de Santiago de Compostela. En cuanto a la investigación, continúo con el trabajo desarrollado en los últimos años dedicado al estudio de las interacciones intermoleculares en sistemas que contienen especies aromáticas de interés, aplicando las herramientas de la Química Computacional. Ya en los últimos tiempos y de cara al futuro más inmediato, se espera continuar con el estudio de las interacciones intermoleculares en sistemas que presentan interacciones aromáticas cóncavo/convexo para ser aplicadas en la Química Supramolecular de atrapadores de fulerenos con un posible uso en el diseño de celdas fotovoltaicas orgánicas.

Identificar palabras clave: Estructural y espectroscopía; Química orgánica supramolecular; Química cuántica; Química computacional; Química inorgánica supramolecular

Cargos y actividades desempeñados con anterioridad

	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
1	Univ. de Santiago de Compostela	Profesor Contratado Doutor	01/01/2006
2	Universidad de Santiago de Compostela	Profesor Asociado a Tiempo Completo	01/10/2000
3	Universidade de Santiago de Compostela	Profesor asociado de universidade T3-P6	26/11/1999
4	XUNTA DE GALICIA	Profesor de Ensino Secundario	27/09/1999
5	Universidade de Santiago de Compostela	Profesor asociado de Universidade T3-Tc	16/10/1998
6	Universidade Universidade de Santiago de Compostela	Profesor Titular de Universidad	28/06/2010

1 Entidad empleadora: Univ. de Santiago de Compostela
Categoría profesional: Profesor Contratado Doutor
Fecha de inicio-fin: 01/01/2006 - 10/06/2010

2 Entidad empleadora: Universidad de Santiago de Compostela
Categoría profesional: Profesor Asociado a Tiempo Completo
Fecha de inicio-fin: 01/10/2000 - 31/12/2005



- 3** **Entidad empleadora:** Universidade de Santiago de Compostela
Categoría profesional: Profesor asociado de universidade T3-P6
Fecha de inicio-fin: 26/11/1999 - 30/09/2000
- 4** **Entidad empleadora:** XUNTA DE GALICIA
Categoría profesional: Profesor de Ensino Secundario
Fecha de inicio-fin: 27/09/1999 - 25/11/1999
- 5** **Entidad empleadora:** Universidade de Santiago de Compostela
Categoría profesional: Profesor asociado de Universidade T3-Tc
Fecha de inicio-fin: 16/10/1998 - 31/12/1998
- 6** **Entidad empleadora:** Universidade Universidade de Santiago de Compostela
Categoría profesional: Profesor Titular de Universidad
Fecha de inicio: 28/06/2010



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 Santiago de Compostela

Tipo de entidad: Universidad

Fecha de titulación: 06/1993

Doctorados

Programa de doctorado: Doctor en Ciencias Químicas

Entidad de titulación: Universidad de Santiago de Compostela

Tipo de entidad: Universidad

Fecha de titulación: 22/07/1998

Título de la tesis: Interacciones intermoleculares en fase gas. Aproximación teórica al estudio de sistemas moleculares que contienen nitrógeno

Director/a de tesis: Miguel A. Ríos Fernández

Calificación obtenida: Apto cum laude

Premio extraordinario doctor: Si

Fecha de obtención: 28/04/1999

Actividad docente

Dirección de tesis doctorales y/o proyectos fin de carrera

- Título del trabajo:** Theoretical study of fullerene encapsulation by cycloparaphenylenes-based carbon nanorings

Codirector/a tesis: Jesús Rodríguez Otero

Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela

Tipo de entidad: Universidad

Alumno/a: Iván González Veloso

Calificación obtenida: Sobresaliente cum Laude

Fecha de defensa: 14/10/2019

Doctorado Europeo: Si

Mención de calidad: Si
- Título del trabajo:** Computational Study of the Capability of the Side Chains of Amino Acids for Setting up Cation...? Interactions Relevant in Protein Stability and Structure

Codirector/a tesis: Jesús Rodríguez Otero

Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela

Tipo de entidad: Universidad



Alumno/a: Ana Angustias Rodríguez Sanz
Calificación obtenida: Sobresaliente cum Laude
Fecha de defensa: 16/10/2015
Doctorado Europeo: Si
Mención de calidad: Si

- 3 Título del trabajo:** Tesis de máster: "Estudio teórico de la microhidratación de complejos formados por cationes simples y fenol"
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela
Tipo de entidad: Universidad
Alumno/a: Alba Campo Cacharrón
Fecha de defensa: 07/2011

- 4 Título del trabajo:** On the interaction between ions and complex aromatic systems: amino acid side chains, ion channels and buckybowls
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela
Tipo de entidad: Universidad
Ciudad entidad realización: Lugo, Galicia, España
Alumno/a: Alba Campo Cacharrón
Calificación obtenida: Sobresaliente cum laude
Fecha de defensa: 12/12/2014
Mención de calidad: Si
Fecha de obtención: 2010

- 5 Título del trabajo:** Tailoring buckybowls for fullerene recognition
Codirector/a tesis: Jesús Rodríguez Otero
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela
Tipo de entidad: Universidad
Alumno/a: Daniela Josa
Calificación obtenida: Sobresaliente cum laude
Fecha de defensa: 16/07/2015
Mención de calidad: Si
Fecha de obtención: 2010

- 6 Título del trabajo:** Estudio teórico de reacciones pericíclicas catalizadas por litio y cicloadiciones multicomponente catalizadas por rodio y rutenio
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela
Tipo de entidad: Universidad
Ciudad entidad realización: Santiago de Compostela, Galicia, España
Alumno/a: Maria de la Merced Montero Campillo
Calificación obtenida: Sobresaliente sum Laude
Fecha de defensa: 04/12/2008
Mención de calidad: Si
Fecha de obtención: 2004

- 7 Título del trabajo:** Tesis de master: "Estudio computacional del efecto del disolvente en la interacción entre cationes amonio y especies aromáticas"
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela
Tipo de entidad: Universidad
Alumno/a: Ana A. Rodríguez Sanz
Fecha de defensa: 07/2001



- 8 Título del trabajo:** Tesina: "Estudio teórico de interacciones ion-disolvente en fase gas"
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Alba García Muruais
Fecha de defensa: 11/1998

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:** Consolidación e estructuración 2017. GRC GI-1905 Química teórica e computacional (QTEC) (2017-PG077)
Entidad de realización: Universidade de Santiago de Compostela
Ciudad entidad realización: Santiago de Compostela, Lugo, Galicia, España
Nº de investigadores/as: 9
Entidad/es financiadora/s:
Xunta de Galicia **Tipo de entidad:** Agencia Estatal
Ciudad entidad financiadora: España
Fecha de inicio-fin: 01/01/2017 - 31/12/2020
Cuantía total: 200.000 €
- 2 Nombre del proyecto:** Consolidación e estructuración. REDES 2016 GI-1595 RCMM: Red de Ciencias y Materiales Moleculares (2016-PG072) Ref.R2016/007
Entidad de realización: Universidade de Santiago de Compostela
Ciudad entidad realización: Santiago de Compostela, Lugo, Galicia, España
Nº de investigadores/as: 82
Fecha de inicio-fin: 01/01/2017 - 31/12/2018
Cuantía total: 120.000 €
- 3 Nombre del proyecto:** Consolidación e estructuración de unidades de investigación (redes de investigación)
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad
Nº de investigadores/as: 34
Fecha de inicio-fin: 24/06/2014 - 23/03/2016
Cuantía total: 120.000 €
- 4 Nombre del proyecto:** Consolidación e estructuración de unidades de investigación competitivas - REDES. (2012-PG208) Ref.CN 2012/314
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Enrique Guitián Rivera
Nº de investigadores/as: 87
Entidad/es financiadora/s:
Consellería de Cultura, Educación e Ordenación Universitaria



Fecha de inicio-fin: 17/06/2012 - 16/06/2014

Cuantía total: 120.000 €

- 5 Nombre del proyecto:** Estudio computacional de la modulación de la modulación catión-pi por medio del entorno

Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Enrique M. Cabaleiro Lago

Nº de investigadores/as: 4

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Ciencia e Innovación

Fecha de inicio-fin: 01/01/2010 - 31/12/2012

Duración: 2 años - 11 meses - 30 días

Entidad/es participante/s: Universidade de Santiago de Compostela

Cuantía total: 87.120 €

- 6 Nombre del proyecto:** Estudio teórico de la interacción intermolecular con hidrocarburos policíclicos aromáticos que poseen superficies curvas (buckybowls))

Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesús Rodríguez Otero

Nº de investigadores/as: 4

Entidad/es financiadora/s:

XUNTA DE GALICIA

Ciudad entidad financiadora: España

Fecha de inicio-fin: 13/07/2009 - 01/12/2012

Duración: 2 años - 11 meses - 30 días

Entidad/es participante/s: Universidade de Santiago de Compostela

Cuantía total: 81.800 €

- 7 Nombre del proyecto:** Consolidación e estruturación de unidades de investigación (redes de investigación) (2009-PG406) Ref. 2009/029

Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Enrique Guitian Rivera

Nº de investigadores/as: 96

Entidad/es financiadora/s:

Xunta de Galicia (Consellería de Educación e ordenación Universitaria)

Fecha de inicio-fin: 01/01/2009 - 30/12/2010

Duración: 1 año - 11 meses - 30 días

Entidad/es participante/s: Universidade da Coruña; Universidade de Santiago de Compostela

Cuantía total: 120.000 €

- 8 Nombre del proyecto:** Grupos de referencia competitiva (2007-PG406)

Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus Rodriguez Otero

Nº de investigadores/as: 9

Entidad/es financiadora/s:

Consellería de Educación e Ordenación Universitaria

XUNTA DE GALICIA

Ciudad entidad financiadora: España



Fecha de inicio-fin: 01/09/2007 - 31/10/2010

Duración: 3 años - 2 meses

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

Cuantía total: 100.000 €

- 9** **Nombre del proyecto:** Estudio teórico de la interacción intermolecular en complejos que contienen moléculas aromáticas. Efecto de la coordinación sobre la aromaticidad

Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Enrique M. Cabaleiro Lago

Nº de investigadores/as: 3

Entidad/es financiadora/s:

MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA

Ciudad entidad financiadora: España

Fecha de inicio-fin: 01/10/2006 - 30/09/2009

Duración: 2 años - 11 meses - 29 días

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

Cuantía total: 48.400 €

- 10** **Nombre del proyecto:** Estudio mecanocuántico de reacciones pseudopericíclicas: Caracterización e búsqueda de sus factores determinantes (2004-PG139) Ref.PGIDIT04PXIC20904PN

Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesús Rodríguez Otero

Nº de investigadores/as: 5

Entidad/es financiadora/s:

XUNTA DE GALICIA

Ciudad entidad financiadora: España

Fecha de inicio-fin: 04/06/2004 - 03/06/2007

Duración: 2 años - 11 meses - 29 días

Entidad/es participante/s: Universidade de Santiago de Compostela

Cuantía total: 13.300 €

- 11** **Nombre del proyecto:** Estudios mecanocuántico de reacciones pseudopericíclicas: caracterización y búsqueda de sus factores determinantes (2003-PN023) Ref.BQU2003-01104

Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesús Rodríguez Otero

Nº de investigadores/as: 3

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Ciencia y Tecnología

Fecha de inicio-fin: 15/11/2003 - 14/11/2006

Duración: 2 años - 11 meses - 29 días

Entidad/es participante/s: Universidad de Santiago de Compostela; Universidade de Vigo

Cuantía total: 41.400 €

- 12** **Nombre del proyecto:** Estudio mecanocuántico de mecanismo de reacciones pericíclicas/pseudopericíclicas. Criterios válidos para su caracterización

Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesús Rodríguez Otero

Nº de investigadores/as: 4

Entidad/es financiadora/s:

XUNTA DE GALICIA



Ciudad entidad financiadora: España

Fecha de inicio-fin: 14/10/2002 - 13/08/2004

Duración: 1 año - 11 meses - 30 días

Entidad/es participante/s: Universidade de Santiago de Compostela

Cuantía total: 9.817 €

- 13 Nombre del proyecto:** Dinámica clásica de derivados de hidrocarburos sencillos en fase gas. Ref. BQU2000-0462

Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Saulo Ángel Vázquez Rodríguez

Nº de investigadores/as: 3

Entidad/es financiadora/s:

CENTRO DE ACUSTICA APLICADA Y
EVALUACION NO DESTRUCTIVA

Tipo de entidad: Asociaciones y Agrupaciones

Ministerio de educación y cultura

Fecha de inicio-fin: 20/12/2000 - 20/12/2003

Duración: 3 años

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

Cuantía total: 25.949,29 €

- 14 Nombre del proyecto:** Equipo informático de gran potencia de cálculo. (2000-AF027)

Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad

Nº de investigadores/as: 3

Entidad/es financiadora/s:

Xunta de Galicia

Fecha de inicio-fin: 23/06/2000 - 31/12/2000

Cuantía total: 42.671,85 €

- 15 Nombre del proyecto:** Estudio teórico de propiedades de resonancia de espín electrónico

Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Berta Fernández Rodríguez

Nº de investigadores/as: 2

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de educación y cultura

Fecha de inicio-fin: 01/11/1996 - 31/10/1999

Duración: 3 años

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

Cuantía total: 18.000 €



Actividades científicas y tecnológicas

Producción científica

Índice H: 25

Fecha de aplicación: 15/09/2021

Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1** Sergio Pérez-Tabero; Berta Fernández; Enrique M. Cabaleiro-Lago; Emilio Martínez-Núñez; Saulo A. Vázquez. New Approach for Correcting Noncovalent Interactions in Semiempirical Quantum Mechanical Methods: The Importance of Multiple-Orientation Sampling. *Journal of Chemical Theory and Computation*. 17 - 9, pp. 5556 - 5567. 2021. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/acs.jctc.1c00365>>. ISSN 1549-9618
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 2** Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jesús Rodríguez-Otero. Curvature and size effects hinder halogen bonds with extended π systems. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 22 - 38, pp. 21988 - 22002. 2020. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/D0CP03466E>>. ISSN 1463-9076
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 3** Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jesús Rodríguez-Otero; Saulo A. Vázquez. The relative position of π - π interacting rings notably changes the nature of the substituent effect. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 22 - 21, pp. 12068 - 12081. 2020. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/D0CP01253J>><https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2020/cp/d0cp01253j>>. ISSN 1463-9076
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 4** Iván González-Veloso; Jesús Rodríguez-Otero; Enrique M. Cabaleiro-Lago. Endohedral alkali cations promote charge transfer transitions in complexes of C 60 with [10]cycloparaphenylenes. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 21 - 30, pp. 16665 - 16675. 2019. Disponible en Internet en: <<http://xlink.rsc.org/?DOI=C9CP02625H>>. DOI: 10.1039/C9CP02625H
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 5** Iván González-Veloso; Jesús Rodríguez-Otero; Enrique M. Cabaleiro-Lago. Size and shape effects on complexes of fullerenes with carbon nanorings: C50 and C76 as [10]CPP and [6]CPPA guests. *Structural Chemistry*. 30 - 3, pp. 647 - 656. 2019. Disponible en Internet en: <<http://link.springer.com/10.1007/s11224-018-1209-y>>. DOI: 10.1007/s11224-018-1209-y
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 6** Iván González-Veloso; Jesús Rodríguez-Otero; Enrique M. Cabaleiro-Lago. Assessment of electronic transitions involving intermolecular charge transfer in complexes formed by fullerenes and donor-acceptor nanohoops. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 13 - 14, pp. 6388 - 6388. 2018. Disponible en Internet en: <<http://xlink.rsc.org/?DOI=c0cp02394a>><http://pubs.rsc.org/en/Content/ArticleLanding/2018/CP/C8CP04119A>><http://xlink.rsc.org/?DOI=C8CP04119A>>. DOI: 10.1039/C8CP04119A
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista

- 7** Enrique M. Cabaleiro-Lago; Berta Fernández; Jesús Rodríguez-Otero. Dissecting the concave-convex π - π interaction in corannulene and sumanene dimers: SAPT(DFT) analysis and performance of DFT dispersion-corrected methods. *Journal of Computational Chemistry*. 39, pp. 93 - 104. 2018. Disponible en Internet en: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/jcc.25084>>.
DOI: 10.1002/jcc.25084
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 8** Ivan Gonzalez-veloso; Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jesus Rodriguez-Otero. Fullerene Size Controls the Selective Complexation of [11]CPP with Pristine and Endohedral Fullerenes. *Physical Chemistry Chemical Physics*. pp. 39 - 44. 2018. Disponible en Internet en: <<http://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2018/cp/c8cp00503f>>.
DOI: 10.1039/c8cp00503f
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 9** David Ferro-Costas; Emilio Martínez-Núñez; Jesús Rodríguez-Otero; Enrique Cabaleiro-Lago; Carlos M. Estévez; Berta Fernández; Antonio Fernández-Ramos; Saulo A. Vázquez. Influence of Multiple Conformations and Paths on Rate Constants and Product Branching Ratios. Thermal Decomposition of 1-Propanol Radicals. *The Journal of Physical Chemistry A*. 122 - 21, pp. 4790 - 4800. 2018. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpca.8b02949>>.
DOI: 10.1021/acs.jpca.8b02949
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 10** Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jesús Rodríguez-Otero. On the Nature of σ - σ , σ - π , and π - π Stacking in Extended Systems. *ACS Omega*. 3 - 8, pp. 9348 - 9359. 2018. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsomega.8b01339>>.
DOI: 10.1021/acsomega.8b01339
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 11** Ángel Vidal-Vidal; Enrique M. Cabaleiro-Lago; Carlos Silva López; Olalla Nieto Faza. Rational Design of Efficient Environmental Sensors: Ring-Shaped Nanostructures Can Capture Quat Herbicides. *ACS Omega*. 3 - 12, pp. 16976 - 16988. 2018. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsomega.8b02673>>.
DOI: 10.1021/acsomega.8b02673
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 12** Enrique M. Cabaleiro-Lago; J. Rodríguez-Otero; Jorge A. Carrazana-García. A theoretical study of complexes between fullerenes and concave receptors with interest in photovoltaics. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 19, pp. 26787 - 26798. 2017. Disponible en Internet en: <<https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2017/cp/c7cp03665e>>.
DOI: 10.1039/c7cp03665e
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 13** Jorge A. Carrazana-García; Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jesús Rodríguez-Otero. A theoretical study of complexes formed between cations and curved aromatic systems: electrostatics does not always control cation- π interaction. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 19, pp. 10543 - 10553. 2017. Disponible en Internet en: <<https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2017/cp/c7cp01491k>>.
DOI: 10.1039/c7cp01491k
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 14** Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jesús Rodríguez-Otero. σ - σ , σ - π , and π - π Stacking Interactions between Six-Membered Cyclic Systems. Dispersion Dominates and Electrostatics Commands. *ChemistrySelect*. 2, pp. 5157 - 5166. 2017. Disponible en Internet en: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/slct.201700671>> <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/slct.201700671>>.
DOI: 10.1002/slct.201700671
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista

- 15** Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jesús Rodríguez-Otero. A through-space description of substituent effects leads to inaccurate molecular electrostatic potentials and cation $\cdots \pi$ interactions in extended aromatic systems. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 18, pp. 13750 - 13753. 2016. Disponible en Internet en: <<https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2016/cp/c6cp00934d>>.
DOI: 10.1039/C6CP00934D
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 16** Iván González-Veloso; Jesús Rodríguez-Otero; Enrique M. Cabaleiro-Lago. Carbon-nanorings ([10]CPP and [6]CPPA) as fullerene (C 60 and C 70) receptors: a comprehensive dispersion-corrected DFT study. *Phys. Chem. Chem. Phys.* pp. 31670 - 31679. 2016. Disponible en Internet en: <<https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2016/cp/c6cp06209a>>.
DOI: 10.1039/C6CP06209A
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 17** Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jesús Rodríguez-Otero; Adrià Gil. Comment on "Theoretical studies on a carbonaceous molecular bearing: association thermodynamics and dual-mode rolling dynamics" by H. Isobe, K. Nakamura, S. Hitosugi, S. Sato, H. Tokoyama, H. Yamakado, K. Ohno and H. Kono, *Chem. Sci.*, 2015, 6 , 2746. *Chem. Sci.* 7, pp. 2924 - 2928. 2016. Disponible en Internet en: <<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC6054031/pdf/SC-007-C5SC04676A.pdf>>.
DOI: 10.1039/c5sc04676a
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 18** Javier Martínez; Enrique M. Cabaleiro-Lago; Juan M. Ortigueira; M. Teresa Pereira; Pablo Frieiro; Fátima Lucio; José M. Vila. Synthesis and reactivity of thiosemicarbazone palladacycles. Crystal structure analysis and theoretical calculations. *Inorganica Chimica Acta*. 449, pp. 20 - 30. 2016. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S0020169316301475/1-s2.0-S0020169316301475-main.pdf?_tid=643dcd57-b617-43e6-a061-54f8b707a8c4&acdnat=1538133598_3d975737d7bb32e27dc718e1d9203144>.
DOI: 10.1016/j.ica.2016.03.044
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 19** Daniela Josa; Jesus Rodriguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago. Fullerene recognition with molecular tweezers made up of efficient buckybowl: a dispersion-corrected DFT study. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 17, pp. 13206 - 13214. 2015. Disponible en Internet en: <<https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2015/cp/c5cp00407a>>. ISSN 1463-9076
DOI: 10.1039/c5cp00407a
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 20** I Gonzalez-Veloso; J A Carrazana-Garcia; D Josa; J Rodriguez-Otero; E M Cabaleiro-Lago. NCI analysis of the interaction cation center dot center dot center dot pi in complexes with molecular bowls derived from fullerene. *Computational and Theoretical Chemistry*. 1053, pp. 123 - 129. 2015. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S2210271X14004605/1-s2.0-S2210271X14004605-main.pdf?_tid=8976b908-53fa-4df5-96ac-d33b9ee3d320&acdnat=1538133621_f26114efc1de468a88bfa52db0e84801>. ISSN 2210-271X
DOI: 10.1016/j.comptc.2014.10.012
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 21** Ana A. Rodríguez-Sanz; Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jesús Rodríguez-Otero. On the interaction between the imidazolium cation and aromatic amino acids. A computational study. *Org. Biomol. Chem.* 13, pp. 7961 - 7972. 2015. Disponible en Internet en: <<https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2015/ob/c5ob01108f>>.
DOI: 10.1039/c5ob01108f
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 22** Daniela Josa; Iván González-Veloso; Jesús Rodríguez-Otero; Enrique M. Cabaleiro-Lago. Tailoring buckybowl for fullerene recognition. A dispersion-corrected DFT study. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 17, pp. 6233 - 6241. 2015. Disponible en Internet en: <<https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2015/cp/c4cp05406g>>.



DOI: 10.1039/c4cp05406g

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 23** J A Carrazana-Garcia; E M Cabaleiro-Lago; A Campo-Cacharron; J Rodriguez-Otero. A theoretical study of ternary indole-cation-anion complexes. *Organic & Biomolecular Chemistry*. 12, pp. 9145 - 9156. 2014. Disponible en Internet en: <<https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2014/ob/c4ob01879f>>. ISSN 1477-0520

DOI: 10.1039/c4ob01879f

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 24** A A Rodriguez-Sanz; E M Cabaleiro-Lago; J Rodriguez-Otero. Cation center dot center dot center dot pi interaction and microhydration effects in complexes formed by pyrrolidinium cation and aromatic species in amino acid side chains. *Organic & Biomolecular Chemistry*. 12, pp. 2938 - 2949. 2014. Disponible en Internet en: <<https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2014/ob/c3ob42388c>>. ISSN 1477-0520

DOI: 10.1039/c3ob42388c

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 25** A A Rodriguez-Sanz; E M Cabaleiro-Lago; J Rodriguez-Otero. Effect of stepwise microhydration on the guanidinium center dot center dot center dot pi interaction. *Journal of Molecular Modeling*. 20, pp. 10 - 10. 2014. Disponible en Internet en: <<https://link.springer.com/content/pdf/10.1007%2Fs00894-014-2209-5.pdf>>. ISSN 1610-2940

DOI: 10.1007/s00894-014-2209-5

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 26** Alba Campo-Cacharron; Enrique M Cabaleiro-Lago; Jesus Rodriguez-Otero. Interaction between ions and substituted buckybowls: A comprehensive computational study. *J. Comput. Chem.* 35, pp. 1533 - 1544. 2014. Disponible en Internet en: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/jcc.23644>>. ISSN 0192-8651

DOI: 10.1002/jcc.23644

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 27** A A Rodriguez-Sanz; E M Cabaleiro-Lago; J Rodriguez-Otero. Interaction between the guanidinium cation and aromatic amino acids. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 16, pp. 22499 - 22512. 2014. Disponible en Internet en: <<https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2014/cp/c4cp02630f>>. ISSN 1463-9076

DOI: 10.1039/C4CP02630F

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 28** A Campo-Cacharron; E M Cabaleiro-Lago; I Gonzalez-Veloso; J Rodriguez-Otero. Interaction of Anions with Substituted Buckybowls. The Anion's Nature and Solvent Effects. *Journal of Physical Chemistry A*. 118, pp. 6112 - 6124. 2014. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp5058463>>. ISSN 1089-5639

DOI: 10.1021/jp5058463

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 29** A Campo-Cacharron; E M Cabaleiro-Lago; J A Carrazana-Garcia; J Rodriguez-Otero. Interaction of Aromatic Units of Amino Acids with Guanidinium Cation: The Interplay of pi...pi, X-H center dot center dot center dot pi, and M+ center dot center dot center dot pi Contacts. *Journal of Computational Chemistry*. 35, pp. 1290 - 1301. 2014. Disponible en Internet en: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/jcc.23623>>. ISSN 0192-8651

DOI: 10.1002/jcc.23623

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 30** Daniela Josa; Lucas Azevedo dos Santos; Iván González-Veloso; Jesús Rodríguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago; Teodorico de Castro Ramalho. Ring-annulated corannulenes as fullerene receptors. A DFT-D study. *RSC Advances*. 4, pp. 29826 - 29826. 2014. Disponible en Internet en: <<http://pubs.rsc.org/en/Content/ArticleLanding/2014/RA/C4RA02744B>>. ISSN 2046-2069

DOI: 10.1039/c4ra02744b

**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 31** Daniela Josa; Jesús Rodríguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago; Lucas A Santos; Teodorico C Ramalho. Substituted corannulenes and sumanenes as fullerene receptors. A dispersion-corrected density functional theory study. The journal of physical chemistry. A. 118, pp. 9521 - 8. 2014. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp5061107>>.

DOI: 10.1021/jp5061107**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 32** Ceila Fong-Padron; Enrique M Cabaleiro-Lago; Jesus Rodriguez-Otero. Water interaction with ion pairs from ionic liquids. Computational study and performance assessment of several common functionals. Chem. Phys. Lett. 593, pp. 181 - 188. 2014. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S0009261414000153/1-s2.0-S0009261414000153-main.pdf?_tid=373013c4-7d2e-4f7a-acd0-969eefb54218&acdnat=1538133845_3fd95b3e37ad4f6920c7aa45f99b5ef5>. ISSN 0009-2614

DOI: 10.1016/j.cplett.2014.01.013**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 33** Marta Sanchez-Lozano; Enrique M Cabaleiro-Lago; Jose M Hermida-Ramon; Carlos M Estevez. A computational study of the protonation of simple amines in water clusters. Phys. Chem. Chem. Phys. 15, pp. 18204 - 18216. 2013. Disponible en Internet en: <<https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2013/cp/c3cp51668g>>. ISSN 1463-9076

DOI: 10.1039/c3cp51668g**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 34** D Josa; J Rodriguez-Otero; E M Cabaleiro-Lago; M Rellán-Pineiro. Analysis of the performance of DFT-D, M05-2X and M06-2X functionals for studying pi center dot center dot center dot pi interactions. Chemical Physics Letters. 557, pp. 170 - 175. 2013. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S0009261412014364/1-s2.0-S0009261412014364-main.pdf?_tid=84bd69b2-ab6a-463f-991a-6a99f214c2ef&acdnat=1538133666_88a348e5805b9295af3110c12553de38>. ISSN 0009-2614

DOI: 10.1016/j.cplett.2012.12.017**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 35** Marcos Rellán-Pineiro; Jesus Rodriguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago; Daniela Josa. DFT and MP2 study of the interaction between corannulene and alkali cations. J. Mol. Model. 19, pp. 2049 - 2055. 2013. Disponible en Internet en: <<https://link.springer.com/content/pdf/10.1007%2Fs00894-012-1632-8.pdf>>. ISSN 0948-5023

DOI: 10.1007/s00894-012-1632-8**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 36** A Rodriguez-Sanz; J Carrazana-Garcia; E M Cabaleiro-Lago; J Rodriguez-Otero. Effect of stepwise microhydration on the methylammonium center dot center dot center dot phenol and ammonium center dot center dot center dot phenol interaction. Journal of Molecular Modeling. 19, pp. 1985 - 1994. 2013. Disponible en Internet en: <<https://link.springer.com/content/pdf/10.1007%2Fs00894-012-1579-9.pdf>>. ISSN 1610-2940

DOI: 10.1007/s00894-012-1579-9**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 37** Daniela Josa; Angeles Pena-Gallego; Jesus Rodriguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago. Theoretical study of the decomposition of ethyl and ethyl 3-phenyl glycidate. J. Mol. Model. 19, pp. 315 - 320. 2013. Disponible en Internet en: <<https://link.springer.com/content/pdf/10.1007%2Fs00894-012-1545-6.pdf>>. ISSN 0948-5023

DOI: 10.1007/s00894-012-1545-6**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 38** Jorge A Carrazana-Garcia; Jesus Rodriguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago. A Computational Study of Anion-Modulated Cation- π Interactions. J. Phys. Chem. B. 116, pp. 5860 - 5871. 2012. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp302271y>>. ISSN 1520-5207

DOI: 10.1021/jp302271y**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 39** Alba Campo-Cacharron; Enrique M Cabaleiro-Lago; Jesus Rodriguez-Otero; Alba Campo-Cacharrón; Jesús Rodríguez-Otero. A DFT study of the interaction between microhydrated anions and naphthalendiimides. *Chemphyschem : a European journal of chemical physics and physical chemistry*. 13, pp. 570 - 7. 2012. Disponible en Internet en: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/cphc.201100678>>. ISSN 1439-4235

DOI: 10.1002/cphc.201100678**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 40** Angeles Pena-Gallego; Jesus Rodriguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago. A MP2 and DFT study of the influence of complexation on the aromatic character of phosphole. *J. Mol. Model.* 18, pp. 765 - 770. 2012. Disponible en Internet en: <<https://link.springer.com/content/pdf/10.1007%2Fs00894-011-1107-3.pdf>>. ISSN 0948-5023

DOI: 10.1007/s00894-011-1107-3**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 41** Alba Campo-Cacharron; Enrique M Cabaleiro-Lago; Jesus Rodriguez-Otero. Effects of microhydration on the characteristics of cation-phenol complexes. *Theor. Chem. Acc.* 131, pp. 1 - 13. 2012. Disponible en Internet en: <<https://link.springer.com/content/pdf/10.1007%2Fs00214-012-1290-z.pdf>>. ISSN 1432-2234

DOI: 10.1007/s00214-012-1290-z**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 42** Patxi Garcia-Novo; Alba Campo-Cacharron; Enrique M Cabaleiro-Lago; Jesus Rodriguez-Otero. Interaction between anions and substituted molecular bowls. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 14, pp. 104 - 112. 2012. Disponible en Internet en: <<https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2012/cp/c1cp22823d>>. ISSN 1463-9076

DOI: 10.1039/c1cp22823d**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 43** Daniela Josa; J Rodríguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago. A DFT study of substituent effects in corannulene dimers. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 13, pp. 21139 - 21145. 2011. Disponible en Internet en: <<https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2011/cp/c1cp23021b>>. ISSN 1463-9076

DOI: 2011/cp/c1cp23021b**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 44** Daniela Josa; Angeles Pena-Gallego; Jesus Rodriguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago. A MP2 and DFT study of the aromatic character of polyphosphaphospholes. Is the pyramidity the only factor to take into consideration?. *J. Mol. Model.* 17, pp. 1267 - 1272. 2011. Disponible en Internet en: <<https://link.springer.com/content/pdf/10.1007%2Fs00894-010-0827-0.pdf>>. ISSN 0948-5023

DOI: 10.1007/s00894-011-1107-3**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 45** V Erastova; J Rodriguez-Otero; E M Cabaleiro-Lago; A Pena-Gallego. A computational study of the mechanism of the unimolecular elimination of alpha,beta-unsaturated aldehydes in the gas phase. *Journal of Molecular Modeling*. 17, pp. 21 - 26. 2011. Disponible en Internet en: <<https://link.springer.com/content/pdf/10.1007%2Fs00894-010-0700-1.pdf>>. ISSN 1610-2940

DOI: 10.1007/s00894-010-0700-1**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 46** Enrique M Cabaleiro-Lago; Jesus Rodriguez-Otero; Angeles. Pena-Gallego. Computational study of the interaction of indole-like molecules with water and hydrogen sulfide. *Journal of Chemical Physics*. 135, pp. 134310/1 - 134310/8. 2011. Disponible en Internet en: <<https://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/1.3643840>>.

DOI: 10.1063/1.3643840

**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 47** Jorge A Carrazana-Garcia; Jesus Rodriguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago. DFT Study of the Interaction between Alkaline Cations and Molecular Bowls Derived from Fullerene. *Journal of Physical Chemistry B*. 115, pp. 2774 - 2782. 2011. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp109654e>>. ISSN 1520-5207

DOI: 10.1021/jp109654e**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 48** Enrique M Cabaleiro-Lago; Jesus Rodriguez-Otero; Angeles Pena-Gallego. Effect of microhydration on the guanidinium center dot center dot center dot benzene interaction. *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*. 135, 2011. Disponible en Internet en: <<https://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/1.3663277>>.

DOI: 10.1063/1.3663277**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 49** Enrique M Cabaleiro-Lago; Jesus Rodriguez-Otero; Angeles. Pena-Gallego. Study of the interaction between aniline and CH₃CN, CH₃Cl and CH₃F. *Theoretical Chemistry Accounts*. 128, pp. 531 - 539. 2011. Disponible en Internet en: <<https://link.springer.com/content/pdf/10.1007%2Fs00214-010-0789-4.pdf>>.

DOI: 10.1007/s00214-010-0789-4**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 50** M Merced Montero-Campillo; Jesus Rodriguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago. An Alternative Mechanism to Explain the Ruthenium(II)-Catalyzed [2 + 2 + 2] Cycloaddition of 1,6-Diynes and Tricarbonyl Compounds. *J. Phys. Chem. A*. 113, pp. 9180 - 9184. 2009. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp900962d>>. ISSN 1089-5639

DOI: 10.1021/jp900962d**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 51** Jesus Rodriguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago; Angeles Pena-Gallego; M Merced Montero-Campillo. Study of the ferrocene-lithium cation interaction by DFT calculations: an in-depth analysis of the existence of a planetary system. *Tetrahedron*. 65, pp. 2368 - 2371. 2009. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S0040402009000210/1-s2.0-S0040402009000210-main.pdf?_tid=82dc884c-9aa7-48a4-86cf-7284dcac44fb&acdnat=1538133793_a7756c3fae453bdafa2b03fedee4a6ff>. ISSN 0040-4020

DOI: 10.1016/j.tet.2008.12.081**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 52** Enrique M Cabaleiro-Lago; Jorge A Carrazana-García; Jesús Rodríguez-Otero. Study of the interaction between water and hydrogen sulfide with polycyclic aromatic hydrocarbons. *The Journal of Chemical Physics*. 130, pp. 234307/1 - 234307/11. 2009. Disponible en Internet en: <<https://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/1.3152577>>.

DOI: 10.1063/1.3152577**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 53** M Merced Montero-Campillo; Enrique M Cabaleiro-Lago; Jesus Rodriguez-Otero. A Density Functional Theory Study of Rhodium-Catalyzed Hetero-[5+2]-cycloaddition of Cyclopropyl Imine Derivatives and Alkynes. *J. Phys. Chem. A*. 112, pp. 9068 - 9074. 2008. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp803785e>>. ISSN 1089-5639

DOI: 10.1021/jp803785e**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 54** M Merced Montero-Campillo; Enrique M Cabaleiro-Lago; Jesus Rodriguez-Otero. A Theoretical Study of Pericyclic Rearrangements Catalyzed by Lithium. *J. Phys. Chem. A*. 112, pp. 5218 - 5223. 2008. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp801130s>>. ISSN 1089-5639



DOI: 10.1021/jp801130s

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 55** Jesus Rodriguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago; Angeles Pena-Gallego. Cation- π and anion- π interactions: Changes in aromaticity upon complexation. Chem. Phys. Lett. 452, pp. 49 - 53. 2008. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S0009261407017198/1-s2.0-S0009261407017198-main.pdf?_tid=c6a530c8-bca1-4eef-aa43-8036c8537899&acdnat=1538133775_fb7f3bc52fd1b7b3649991bf2c055f12>. ISSN 0009-2614

DOI: 10.1016/j.cplett.2007.12.046

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 56** Enrique M Cabaleiro-Lago; Jesús Rodríguez-Otero; Ángeles Peña-Gallego. Characteristics of the interaction of azulene with water and hydrogen sulfide: A computational study. The Journal of Chemical Physics. 129, pp. 84305 - 84308. 2008. Disponible en Internet en: <<https://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/1.2973632>>.

DOI: 10.1063/1.2973632

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 57** Jesus Rodriguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago; Angeles Pena-Gallego. Comment on "A Theoretical Investigation of the Interactions between Water Molecules and Ionic Liquids". J. Phys. Chem. B. 112, pp. 13465 - 13466. 2008. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp8052983>>. ISSN 1520-6106

DOI: 10.1021/jp8052983

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 58** E A Cabaleiro-Lago; J Rodriguez-Otero; A Pena-Gallego. Computational study on the characteristics of the interaction in naphthalene center dot center dot center dot (H₂X)(n=1,2) (X = O, S) clusters. Journal of Physical Chemistry A. 112, pp. 6344 - 6350. 2008. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp8021979>>. ISSN 1089-5639

DOI: 10.1021/jp8021979

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 59** Jesus Rodriguez-Otero; M Merced Montero-Campillo; Enrique M Cabaleiro-Lago. Density Functional Theory Study of Ruthenium (II)-Catalyzed [2+2+2] Cycloaddition of 1,6-Diynes with Tricarbonyl Compounds. J. Phys. Chem. A. 112, pp. 8116 - 8120. 2008. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp802763m>>. ISSN 1089-5639

DOI: 10.1021/jp802763m

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 60** M Merced Montero-Campillo; Jesus Rodriguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago. On the mechanism of rhodium-catalyzed [6+2] cycloaddition of 2-vinylcyclobutanones and alkenes. Tetrahedron. 64, pp. 6215 - 6220. 2008. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S0040402008008570/1-s2.0-S0040402008008570-main.pdf?_tid=4d446ffb-8dbc-4337-ae89-80187e6176a1&acdnat=1538133835_0884cb38237f4eafc7e68e3957c4282a>. ISSN 0040-4020

DOI: 10.1016/j.tet.2008.04.118

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 61** Enrique M Cabaleiro-Lago; Ángeles Peña-Gallego; Jesús Rodríguez-Otero. Study of the interaction in clusters formed by phenol and CH₃X(X=CN,F,Cl) molecules. The Journal of Chemical Physics. 128, pp. 194311/1 - 194311/8. 2008. Disponible en Internet en: <<https://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/1.2919128>>.

DOI: 10.1063/1.2919128

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista



- 62** M Merced Montero-Campillo; Jesus Rodriguez-Otero; Enrique Cabaleiro-Lago. Theoretical Study of the [2+2+2+1] Cycloaddition Mechanism of Enediynes and Carbon Monoxide Catalyzed by Rhodium. *J. Phys. Chem. A.* 112, pp. 2423 - 2427. 2008. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp077693r>>. ISSN 1089-5639
DOI: 10.1021/jp077693r
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 63** A Pena-Gallego; J Rodriguez-Otero; E M Cabaleiro-Lago. A Comparative Theoretical Study of the Pericyclic-pseudopericyclic Character in a Group of Cyclizations of Dienylketenes to Cyclohexadienones. *J. Phys. Chem. A.* 111, pp. 2935 - 2940. 2007. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp068772q>>. ISSN 1089-5639
DOI: 10.1021/jp068772q
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 64** Angeles Pena-Gallego; Jesus Rodriguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago. A DFT study of the [4+2] cycloadditions of conjugated ketenes (vinylketene, imidoalkene and formylketene) with formaldehyde. The pericyclic or pseudopericyclic character from magnetic properties. *Tetrahedron.* 63, pp. 4937 - 4943. 2007. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S004040200700573X/1-s2.0-S004040200700573X-main.pdf?_tid=e8190229-ebc9-4189-a8c1-06d05b8cd43d&acdnat=1538133842_83f0fca2675777f6eadabf110df00e5d>. ISSN 0040-4020
DOI: 10.1016/j.tet.2007.03.142
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 65** Enrique M Cabaleiro-Lago; Jesus Rodriguez-Otero; Angeles Pena-Gallego. A computational study of the electrocycloaddition of o-divinylbenzene and derivatives. *J. Mol. Struct.: THEOCHEM.* 811, pp. 141 - 151. 2007. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S0166128007000498/1-s2.0-S0166128007000498-main.pdf?_tid=92beb9be-1e6e-4d80-8a5d-a8d8a2ba0e14&acdnat=1538133878_992ce73ba11e8ebe4af00dff7c2ce711>. ISSN 0166-1280
DOI: 10.1016/j.theochem.2006.12.058
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 66** Angeles Pena-Gallego; Jesus Rodriguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago. A theoretical study of the influence of BF₃ on the reaction path of the [4 + 2] cycloaddition of vinylketene with formaldehyde. *Tetrahedron.* 63, pp. 11617 - 11621. 2007. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S0040402007015700/1-s2.0-S0040402007015700-main.pdf?_tid=54e4cd75-54e9-4fbc-9db1-b681a240409c&acdnat=1538133804_713684764e1d0deb51d8b3d3a3469d1e>. ISSN 0040-4020
DOI: 10.1016/j.tet.2007.09.005
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 67** M Merced Montero-Campillo; Jesus Rodriguez-Otero; E M Cabaleiro-Lago. Ab initio and DFT study of the aromaticity of some fulvalenes derived from methylenecyclopropabenzene. *J. Mol. Model.* 13, pp. 919 - 926. 2007. Disponible en Internet en: <<https://link.springer.com/content/pdf/10.1007%2Fs00894-007-0211-x.pdf>>. ISSN 0948-5023
DOI: 10.1007/s00894-007-0211-x
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 68** Jesus Rodriguez-Otero; Jose M Hermida-Ramon; Enrique M Cabaleiro-Lago. DFT study of the nucleophilic addition of water to ketenes. *Eur. J. Org. Chem.* pp. 2344 - 2351. 2007. Disponible en Internet en: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/ejoc.200600932>>. ISSN 1434-193X
DOI: 10.1002/ejoc.200600932
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 69** Jesus Rodriguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago; Angeles Pena-Gallego. Theoretical study of the walk rearrangement in perfluorotetramethyl (Dewar thiophene) exo-S-oxide. *Tetrahedron*. 63, pp. 2191 - 2198. 2007. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S0040402007000117/1-s2.0-S0040402007000117-main.pdf?_tid=bcdc60a8-fca2-492b-afb3-4118a3719a6a&acdnt=1538133826_150ffc8e61060997b87ff6424a197c9c>. ISSN 0040-4020
DOI: 10.1016/j.tet.2006.12.089
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 70** Enrique M Cabaleiro-Lago; Jesus Rodriguez-Otero; Ivan Gonzalez-Lopez; Angeles Pena-Gallego; Jose M Hermida-Ramon. A DFT Study of the Pericyclic/Pseudopericyclic Character of Cycloaddition Reactions of Ethylene and Formaldehyde to Buta-1,3-dien-1-one and Derivatives. *J. Phys. Chem. A*. 109, pp. 5636 - 5644. 2005. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp050624x>>. ISSN 1089-5639
DOI: 10.1021/jp050624x
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 71** Angeles Pena-Gallego; Jesus Rodriguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago. A DFT study of the concerted cyclisation of 3-azidopropenal to isoxazole: Is it a pseudopericyclic reaction according to its magnetic properties?. *Eur. J. Org. Chem.* pp. 3228 - 3232. 2005. Disponible en Internet en: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/ejoc.200500083>>. ISSN 1434-193X
DOI: 10.1002/ejoc.200500083
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 72** E M Cabaleiro-Lago; J Rodriguez-Otero; R M Garcia-Lopez; A Pena-Gallego; J M Hermida-Ramon. A density functional theory study on the electrocyclization of 1,2,4,6-heptatetraene analogues: Converting a pericyclic to a pseudopericyclic reaction. *Chemistry-a European Journal*. 11, pp. 5966 - 5974. 2005. Disponible en Internet en: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/chem.200401234>>. ISSN 0947-6539
DOI: 10.1002/chem.200401234
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 73** Enrique M Cabaleiro-Lago; Jesus Rodriguez-Otero; Santiago M Varela-Varela; Angeles Pena-Gallego; Jose M Hermida-Ramon. Are Electrocyclization Reactions of (3Z)-1,3,5-Hexatrienone and Nitrogen Derivatives Pseudopericyclic? A DFT Study. *J. Org. Chem.* 70, pp. 3921 - 3928. 2005. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jo0477695>>. ISSN 0022-3263
DOI: 10.1021/jo0477695
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 74** Jose M Hermida-Ramon; Enrique M Cabaleiro-Lago; Jesus Rodriguez-Otero. Theoretical characterization of structures and energies of benzene-(H₂S)_n and (H₂S)_n (n=1-4) clusters. *J. Chem. Phys.* 122, pp. 204315/1 - 204315/5. 2005. Disponible en Internet en: <<https://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/1.1901566>>. ISSN 0021-9606
DOI: 0.1063/1.1901566
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 75** A Pena-Gallego; J Rodriguez-Otero; E M Cabaleiro-Lago. A DFT study of the Boulton-Katritzky rearrangement of (5R)-4-nitrosobenz c isoxazole and its anion: Pseudopericyclic reactions with aromatic transition states. *Journal of Organic Chemistry*. 69, pp. 7013 - 7017. 2004. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jo0491509>>. ISSN 0022-3263
DOI: 10.1021/jo0491509
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 76** M Luisa Ferreiro; Jesus Rodriguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago. Ab Initio and DFT Study of the Influence of the Allene Group on the Diels-Alder Reaction. *Struct. Chem.* 15, pp. 323 - 326. 2004. Disponible en Internet en: <<https://link.springer.com/content/pdf/10.1023%2FB%3ASTUC.0000026747.11856.1a.pdf>>. ISSN 1040-0400
DOI: 10.1023/B:STUC.0000026747.11856.1a

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 77** M M Montero-Campillo; J Rodriguez-Otero; E M Cabaleiro-Lago. Ab initio and DFT study of the reaction mechanism of diformylketene with formamide. *Journal of Physical Chemistry A*. 108, pp. 8373 - 8377. 2004. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp048672p>>. ISSN 1089-5639
DOI: 10.1021/jp048672p

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 78** Jose M Hermida-Ramon; Enrique M Cabaleiro-Lago; Jesus Rodriguez-Otero. Computational study of the dissociation of oxalic acid in water clusters. *Chem. Phys.* 302, pp. 53 - 60. 2004. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S0301010404000886/1-s2.0-S0301010404000886-main.pdf?_tid=49f4da2f-cf42-4e20-a486-402a5fa89b1d&acdnat=1538133787_bcf8cf8fc13e7f586301d7fde5a9d2d5>. ISSN 0301-0104
DOI: 10.1016/j.chemphys.2004.02.021

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 79** E M Cabaleiro-Lago; J M Hermida-Ramon; J Rodriguez-Otero. Computational study of the interaction in (CH₃)₂X dimer and trimer (X = O, S). *Journal of Physical Chemistry A*. 108, pp. 4923 - 4929. 2004. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp0377679>>. ISSN 1089-5639
DOI: 10.1021/jp0377679

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 80** J M Hermida-Ramon; J Rodriguez-Otero; E M Cabaleiro-Lago. Ab initio MP2 and DFT study of the thermal Syn elimination reaction in ethyl formate. *Journal of Physical Chemistry A*. 107, pp. 1651 - 1654. 2003. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp027509w>>. ISSN 1089-5639
DOI: 10.1021/jp027509w

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 81** E M Cabaleiro-Lago; J M Hermida-Ramon; J Rodriguez-Otero. Computational study of the interaction in X-(CH₃NH₂)(n) clusters (X = F, Cl; n=1-4). The balance between ion-molecule and molecule-molecule interactions. *Journal of Physical Chemistry A*. 107, pp. 10184 - 10190. 2003. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp036104o>>. ISSN 1089-5639
DOI: 10.1021/jp036104o

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 82** J Rodriguez-Otero; E M Cabaleiro-Lago. Criteria for the elucidation of the pseudopericyclic character of the cyclization of (Z)-1,2,4,6-heptatetraene and its heterosubstituted analogues: Magnetic properties and natural bond orbital analysis. *Chemistry-a European Journal*. 9, pp. 1837 - 1843. 2003. Disponible en Internet en: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/chem.200390211>>. ISSN 0947-6539
DOI: 10.1002/chem.200390211

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 83** Jesus Rodriguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago; Jose M Hermida-Ramon; Angeles Pena-Gallego. DFT Study of Pericyclic and Pseudopericyclic Thermal Cheletropic Decarbonylations. Evaluation of Magnetic Properties. *J. Org. Chem.* 68, pp. 8823 - 8830. 2003. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp034526o>>. ISSN 0022-3263
DOI: 10.1021/jp034526o

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 84** E M Cabaleiro-Lago; J Rodriguez-Otero; J M Hermida-Ramon. Evaluation of magnetic properties as a criterion for the elucidation of the pseudopericyclic character of 1,5-electrocyclizations in nitrile ylides. *Journal of Physical Chemistry A*. 107, pp. 4962 - 4966. 2003. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp034579%2B>>. ISSN 1089-5639
DOI: 10.1021/jp034579+

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 85** E M Cabaleiro-Lago; J R Otero. Ab Initio and density functional theory study of the interaction in formamide and thioformamide dimers and trimers. Journal of Chemical Physics. 117, pp. 1621 - 1632. 2002. Disponible en Internet en: <<https://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/1.1485722>>. ISSN 0021-9606

DOI: 10.1063/1.1485722**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 86** E M Cabaleiro-Lago; J Rodriguez-Otero. An ab initio study of $M+(\text{CH}_3\text{OH})(n)$ clusters ($M = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$). Competition between interior and surface structures. Journal of Physical Chemistry A. 106, pp. 7195 - 7203. 2002. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp020713z>>. ISSN 1089-5639

DOI: 10.1021/jp020713z**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 87** Enrique M Cabaleiro-Lago; Jesus Rodriguez-Otero. An ab initio study of the potential energy surface of methylamine dimer. J. Mol. Struct.: THEOCHEM. 586, pp. 225 - 234. 2002. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S0166128002000684/1-s2.0-S0166128002000684-main.pdf?_tid=023612c3-8354-44a0-9bd6-558dc9338064&acdnat=1538133866_6def8d7d3295cdea72da74a036a54e4e>. ISSN 0166-1280

DOI: 10.1016/S0166-1280(02)00068-4**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 88** Enrique M Cabaleiro-Lago; Jose M Hermida-Ramon; Jesus Rodriguez-Otero. Computational study of the dissociation of H-X acids ($X = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) in water clusters. J. Chem. Phys. 117, pp. 3160 - 3168. 2002. Disponible en Internet en: <<https://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/1.1493770>>. ISSN 0021-9606

DOI: 10.1063/1.1493770**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 89** Jesus Rodriguez-Otero; Enrique M Cabaleiro-Lago. Electrocyclization of (Z)-1,2,4,6-heptatetraene and its heterosubstituted analogues: pericyclic or pseudopericyclic? comments. Angew. Chem., Int. Ed. 41, pp. 1147 - 1150. 2002. Disponible en Internet en: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/1521-3773%2820020402%2941%3A7%3C1147%3A%3AAID-ANIE1147%3E3.0.CO%3B2-J>>. ISSN 1433-7851

DOI: 10.1002/1521-3773(20020402)41:7<1147::AID-ANIE1147>3.0.CO;2-J**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 90** Enrique M Cabaleiro-Lago; Jesus Rodriguez-Otero. Methanethiol Dimer and Trimer. An ab Initio and DFT Study of the Interaction. J. Phys. Chem. A. 106, pp. 7440 - 7447. 2002. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp021001b>>. ISSN 1089-5639

DOI: 10.1021/jp021001b**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 91** J M Hermida-Ramon; A Pena-Gallego; E Martinez-Nunez; A Fernandez-Ramos; E M Cabaleiro-Lago. A quantum chemical study of aniline/ammonia clusters. Thermodynamic properties and frequency analysis. J. Mol. Struct.: THEOCHEM. 497, pp. 105 - 113. 2000. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S0166128099002018/1-s2.0-S0166128099002018-main.pdf?_tid=843d23d1-23de-402c-9ea8-37a7e69824c5&acdnat=1538133798_8513c85695a9d294fd96323c48642295>. ISSN 0166-1280

DOI: 10.1016/S0166-1280(99)00201-8**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 92** E M Cabaleiro-Lago; M A Rios. Ab initio study of $M(\text{CH}_3\text{CN})_n$ clusters ($M = \text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{Mg}^{2+}$) in the gas phase. Chem. Phys. 254, pp. 11 - 23. 2000. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S0301010400000070/1-s2.0-S0301010400000070-main.pdf?_tid=051bcbd7-545d-4ed5-9b23-a3dbc394bfd8&acdnat=1538133765_1b2a4ad70b4b53d4baaaec666e3dc718>. ISSN 0301-0104
DOI: 10.1016/S0301-0104(00)00007-0
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 93** Enrique M Cabaleiro-Lago; Miguel A Rios. Ab initio study of interactions in methylamine clusters. The significance of cooperative effects. The Journal of Chemical Physics. 112, pp. 2155 - 2163. 2000. Disponible en Internet en: <<https://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/1.480781>>.
DOI: 10.1063/1.480781
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 94** E M Cabaleiro-Lago; M A Rios. An ab initio study of the interaction in dimethylamine dimer and trimer. Journal of Chemical Physics. 113, pp. 9523 - 9531. 2000. Disponible en Internet en: <<https://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/1.1321314>>. ISSN 0021-9606
DOI: 10.1063/1.1321314
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 95** A Fernandez-Ramos; E Cabaleiro-Lago; J M Hermida-Ramon; E Martinez-Nunez; A Pena-Gallego. DFT conformational study of cysteine in gas phase and aqueous solution. J. Mol. Struct.: THEOCHEM. 498, pp. 191 - 200. 2000. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S0166128099002614/1-s2.0-S0166128099002614-main.pdf?_tid=00e691fa-763b-4339-b419-e22c65b96f56&acdnat=1538133814_6d0054b545f95351293b92c9beafb4a5>. ISSN 0166-1280
DOI: 10.1016/S0166-1280(99)00261-4
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 96** E M Cabaleiro-Lago; J M Hermida-Ramon; A Pena-Gallego; E Martinez-Nunez; A Fernandez-Ramos. Intermolecular interactions and cooperative effects in acetonitrile clusters. An ab initio molecular orbital study. J. Mol. Struct.: THEOCHEM. 498, pp. 21 - 28. 2000. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S0166128099002079/1-s2.0-S0166128099002079-main.pdf?_tid=309accb2-fed4-4550-b406-601b3a9b0fd1&acdnat=1538133820_8dd0cce800ee6d5fed5a6209fbd1f4ce>. ISSN 0166-1280
DOI: 10.1016/S0166-1280(99)00207-9
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 97** A Garcia-Muruais; E M Cabaleiro-Lago; J M Hermida-Ramon; M A Rios. The study of $A(\text{CH}_3\text{OH})_{1-6}$ ($A = \text{Li}^+, \text{Na}^+$) in the gas phase based on ab initio calculations, analysis of the solvation process. Chem. Phys. 254, pp. 109 - 123. 2000. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S0301010400000082/1-s2.0-S0301010400000082-main.pdf?_tid=2afbb9b0-565c-4126-a4ff-982fc8dce439&acdnat=1538133858_a28d30065faa183f1f8bafcb9cf8d910>. ISSN 0301-0104
DOI: 10.1016/S0301-0104(00)00008-2
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 98** E Martinez-Nunez; E M Cabaleiro-Lago; A Fernandez-Ramos; J M Hermida-Ramon; A Pena-Gallego. A DFT study of a model compound of vitamin D. J. Mol. Struct.: THEOCHEM. 492, pp. 143 - 150. 1999. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S0166128099001451/1-s2.0-S0166128099001451-main.pdf?_tid=bd30b98c-0569-4276-95f3-872b0ff86f31&acdnat=1538133770_1af385d8b5857afcd8ac950ec44713a4>. ISSN 0166-1280
DOI: 10.1016/S0166-1280(99)00145-1
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 99** E M Cabaleiro-Lago; M A Rios. A cooperative mechanism as the main source of the marked structural differences between solid and gaseous HCN center dot center dot center dot BF_3 (vol 294, pg 272, 1998). Chemical Physics Letters. 299, pp. 358 - 358. 1999. ISSN 0009-2614

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 100** Enrique M Cabaleiro-Lago; Miguel A Rios. Ab Initio Study of Interactions in Hydrazine Clusters of One To Four Molecules: Cooperativity in the Interaction. J. Phys. Chem. A. 103, pp. 6468 - 6474. 1999. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp9913564>>. ISSN 1089-5639
DOI: 10.1021/jp9913564

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 101** A Pena-Gallego; E M Cabaleiro-Lago; A Fernandez-Ramos; J M Hermida-Ramon; E Martinez-Nunez. An ab initio study of a model compound of penicillins. J. Mol. Struct.: THEOCHEM. 491, pp. 177 - 185. 1999. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S0166128099001086/1-s2.0-S0166128099001086-main.pdf?_tid=ed29c706-f345-4cc2-8fad-7dc9cbf78fe1&acdnat=1538133830_9b64e9a990d6b6c5a9ee238168d2fa12>. ISSN 0166-1280
DOI: 10.1016/S0166-1280(99)00108-6

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 102** E M Cabaleiro-Lago; M A Rios. Development of an intermolecular potential function for interactions in formamide clusters based on ab initio calculations. Journal of Chemical Physics. 110, pp. 6782 - 6791. 1999. Disponible en Internet en: <<https://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/1.478582>>. ISSN 0021-9606
DOI: 10.1063/1.478582

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 103** Enrique M Cabaleiro-Lago; Miguel A Rios. Intermolecular potential for acetonitrile based on ab initio calculations. Mol. Phys. 96, pp. 309 - 321. 1999. Disponible en Internet en: <<https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00268979909482965>>. ISSN 0026-8976
DOI: 10.1080/00268979909482965

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 104** Enrique M Cabaleiro-Lago; Miguel A. Ríos. A cooperative mechanism as the main source of the marked structural differences between solid and gaseous $\text{HCN} \cdots \text{BF}_3$. Chemical Physics Letters. 294, pp. 272 - 276. 1998. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S0009261498008768/1-s2.0-S0009261498008768-main.pdf?_tid=636a7cf0-2c37-4baa-bb8b-1ae90b6af146&acdnat=1538133724_1df88831ff1daa62eeeb07fda9fc3aee>. ISSN 0009-2614
DOI: 10.1016/S0009-2614(98)00876-8

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 105** E M Cabaleiro-Lago; M A Rios. A potential function for describing intermolecular interactions in the hydroxylamine dimer. Journal of Physical Chemistry A. 102, pp. 10358 - 10365. 1998. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp982619h>>. ISSN 1089-5639
DOI: 10.1021/jp982619h

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 106** E Cabaleiro-Lago; M A Rios. An intermolecular potential function for Na^+ -acetonitrile obtained from ab initio calculations. Application to liquid simulations. Chemical Physics. 236, pp. 235 - 242. 1998. Disponible en Internet en: <https://ac.els-cdn.com/S030101049800216X/1-s2.0-S030101049800216X-main.pdf?_tid=6e8a6949-e8b3-4523-ba55-3ea26b1e496a&acdnat=1538133676_1a530f8714303d1bdb2344ef351e1fe2>. ISSN 0301-0104
DOI: 10.1016/s0301-0104(98)00216-x

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 107** M P Hodges; A J Stone; E C Lago. Analytical potentials for HF dimer and larger HF clusters from ab initio calculations. Journal of Physical Chemistry A. 102, pp. 2455 - 2465. 1998. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp972148j>>. ISSN 1089-5639
DOI: 10.1021/jp972148j

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista



- 108** E M Cabaleiro-Lago; M A Rios. Development of a potential function for describing the properties of HCN clusters. *Journal of Chemical Physics*. 108, pp. 3598 - 3607. 1998. Disponible en Internet en: <<https://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/1.475754>>. ISSN 0021-9606
DOI: 10.1063/1.475754
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 109** Enrique M Cabaleiro-Lago; Miguel A Rios. Potential functions for describing intermolecular interactions in cyanoacetylene clusters. *J. Chem. Phys.* 109, pp. 8398 - 8406. 1998. Disponible en Internet en: <<https://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/1.477502>>. ISSN 0021-9606
DOI: 10.1063/1.477502
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 110** E M Cabaleiro-Lago; M A Rios. A potential function for intermolecular interaction in the acetonitrile dimer constructed from ab initio data. *Journal of Physical Chemistry A*. 101, pp. 8327 - 8334. 1997. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp971084%2B>>. ISSN 1089-5639
DOI: 10.1021/jp971084+
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista

Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

- 1** **Título del trabajo:** On the nature of the substituent effect in slipped π - π structures
Nombre del congreso: The 23rd International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry
Ciudad de celebración: Basel, Suiza
Fecha de celebración: 01/11/2020
Fecha de finalización: 30/11/2020
Entidad organizadora: MDPI/USC
Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jorge A. Carrazana-García; Jesús Rodríguez-Otero.
- 2** **Título del trabajo:** Computational study of stacked complexes of aliphatic and aromatic species
Nombre del congreso: The 23rd International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry
Ciudad de celebración: Basel, Suiza
Fecha de celebración: 01/11/2019
Fecha de finalización: 30/11/2019
Entidad organizadora: MDPI/USC
Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jorge A. Carrazana-García; Iván González-Veloso; Jesús Rodríguez-Otero.
- 3** **Título del trabajo:** Theoretical study on cation- π interaction in graphene fragments
Nombre del congreso: The 23rd International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry
Ciudad de celebración: Basel, Suiza
Fecha de celebración: 01/11/2019
Fecha de finalización: 30/11/2019
Entidad organizadora: MDPI/USC
Jorge A. Carrazana-García; Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jesús Rodríguez-Otero.
- 4** **Título del trabajo:** Alkali endofullerenes encapsulated by nanorings
Nombre del congreso: 2nd International Vigo Meeting on Advanced Computational Chemistry
Ciudad de celebración: Vigo, Galicia, España
Fecha de celebración: 06/06/2019
Fecha de finalización: 07/06/2019

Iván González Veloso; Enrique M. Cabaleiro Lago; Jesús Rodríguez Otero.

- 5 Título del trabajo:** Theoretical study of halogen bond with aromatic residues with biological interest
Nombre del congreso: 2nd International Vigo Meeting on Advanced Computational Chemistry
Ciudad de celebración: Vigo, Galicia, España
Fecha de celebración: 06/06/2019
Fecha de finalización: 07/06/2019
Jorge A. Carrazana García; Enrique M. Cabaleiro Lago; Jesús Rodríguez Otero.
- 6 Título del trabajo:** Diseño racional in silico de nuevas nanoestructuras de tipo dador-aceptor en forma de anillo para una captura eficiente de herbicidas de amonio cuaternario
Nombre del congreso: Termo 2018: XVI encuentro inter-bienal del grupo especializado de termodinámica (GET)
Tipo evento: Congreso
Ciudad de celebración: Santa Cruz, Oleiros, Galicia, España
Fecha de celebración: 16/09/2018
Fecha de finalización: 18/09/2018
Publicación en acta congreso: Si
Ángel Vidal Vidal; Enrique M. Cabaleiro Lago; L. Sanchez Guirao; Olalla Nieto Faza; Carlos Silva López. "La investigación del grupo especializado de Termodinámica de las reales sociedades españolas de física y química. Vol. 9. Año 2018". (España): ISBN 978-84-9749-734-3
Depósito legal: C 2329-2019
- 7 Título del trabajo:** Profundización teórica sobre interacciones intermoleculares que involucran un sigma-hole. La electrostática no siempre controla el enlace calcógeno
Nombre del congreso: Termo 2018: XVI encuentro inter-bienal del grupo especializado de termodinámica (GET)
Tipo evento: Congreso
Ciudad de celebración: Santa Cruz, Oleiros, Galicia, España
Fecha de celebración: 16/09/2018
Fecha de finalización: 18/09/2018
Publicación en acta congreso: Si
Ángel Vidal Vidal; Carlos Silva López; Olalla Nieto Faza; Enrique M. Cabaleiro Lago. "La investigación del grupo especializado de Termodinámica de las reales sociedades españolas de física y química. Vol. 9. Año 2018". (España): ISBN 978-84-9749-734-3
Depósito legal: C 2329-2019
- 8 Título del trabajo:** Fullerenes or endofullerenes inside nanorings, the importance of the size
Nombre del congreso: 11th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2018)
Ciudad de celebración: Toledo, Castilla-La Mancha, España
Fecha de celebración: 17/07/2018
Fecha de finalización: 19/07/2018
Iván González Veloso; Enrique M. Cabaleiro Lago; Jesús Rodríguez Otero; Jorge A. Carrazana García.
- 9 Título del trabajo:** On the nature of pi-pi, sigma-pi, and sigma-sigma stacking in extended systems
Nombre del congreso: 11th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2018)
Ciudad de celebración: Toledo, Castilla-La Mancha, España
Fecha de celebración: 17/07/2018
Fecha de finalización: 19/07/2018
Enrique M. Cabaleiro Lago; Iván González Veloso; Jorge A. Carrazana García; Jesús Rodríguez Otero.

- 10 Título del trabajo:** The influence of multiple conformations and paths on rate constants and product branching ratios. Thermal decomposition of 1-propanol radicals
Nombre del congreso: 11th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2018)
Ciudad de celebración: Toledo, Castilla-La Mancha, España
Fecha de celebración: 17/07/2018
Fecha de finalización: 19/07/2018
David Ferro Costas; Emilio Martínez Núñez; Jesús Rodríguez Otero; Enrique M. Cabaleiro Lago; Carlos Estévez Valcárcel; Berta Fernández; Antonio Fernández Ramos; Saulo Vázquez.
- 11 Título del trabajo:** Theoretical study on the nature of several non-covalent interactions involving π systems
Nombre del congreso: 11th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2018)
Ciudad de celebración: Toledo, Castilla-La Mancha, España
Fecha de celebración: 17/07/2018
Fecha de finalización: 19/07/2018
Jorge A. Carrazana García; Enrique M. Cabaleiro Lago; Iván González Veloso; Jesús Rodríguez Otero.
- 12 Título del trabajo:** Complexes of fullerenes C78 and Sc3N@C78 with concave receptors
Nombre del congreso: The 21st International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry
Ciudad de celebración: Basel, Suiza
Fecha de celebración: 01/11/2017
Fecha de finalización: 30/11/2017
Entidad organizadora: MDPI/USC
Enrique M. cabaleiro-Lago; Jorge A. Carrazana-García; Iván González-Veloso; Jesús Rodríguez-Otero.
- 13 Título del trabajo:** Carbon nanorings as fullerene receptors
Nombre del congreso: 1st International Vigo Meeting on Advanced Computational Chemistry
Ciudad de celebración: Vigo, Galicia, España
Fecha de celebración: 01/06/2017
Fecha de finalización: 02/06/2017
Iván González Veloso; Jesús Rodríguez Otero; Enrique M. Cabaleiro Lago.
- 14 Título del trabajo:** On the nature of cation- π interaction: reconsidering the role of the electrostatic contribution
Nombre del congreso: 1st International Vigo Meeting on Advanced Computational Chemistry
Ciudad de celebración: Vigo, Galicia, España
Fecha de celebración: 01/06/2017
Fecha de finalización: 02/06/2017
Jorge A. Carrazana García; Enrique M. Cabaleiro Lago; Jesús Rodríguez Otero.
- 15 Título del trabajo:** Computational study of the interaction between sumanene and cations in function of the cation- π separation.
Nombre del congreso: The 20th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry (ECSOC-20)
Autor de correspondencia: No
Ciudad de celebración: Basel,
Fecha de celebración: 01/11/2016
Fecha de finalización: 30/11/2016
Jorge A. Carrazana García; Enrique M. Cabaleiro Lago; Jesús Rodríguez Otero.



- 16 Título del trabajo:** Interactions study between fullerene and nanorings
Nombre del congreso: 9th Congress on Electronic Structure Principles and Applications.
Ciudad de celebración: Badajoz, España
Fecha de celebración: 02/07/2014
Fecha de finalización: 04/07/2014
I. González-Veloso; J. Rodríguez-Otero; D. Josa; E. M. Cabaleiro-Lago.
- 17 Título del trabajo:** Ring-annelated corannulenes as fullerene receptors. A DFT-D study
Nombre del congreso: 9th Congress on Electronic Structure Principles and Applications.
Ciudad de celebración: Badajoz, España
Fecha de celebración: 02/07/2014
Fecha de finalización: 04/07/2014
D. Josa; L. A. Santos; J. Rodríguez-Otero; E.M. Cabaleiro-Lago; I. González-Veloso; T. C. Ramalho.
- 18 Título del trabajo:** Analysis of the interaction between ions and substituted buckybowls
Nombre del congreso: 9th European Conference on Computational Chemistry.
Ciudad de celebración: Sopron, Hungría
Fecha de celebración: 01/09/2013
Fecha de finalización: 05/09/2013
Alba Campo-Cacharrón; Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jesús Rodríguez-Otero.
- 19 Título del trabajo:** Interaction between halogen anions and heterasumanenes
Nombre del congreso: 9th European Conference on Computational Chemistry.
Ciudad de celebración: Sopron, Hungría
Fecha de celebración: 01/09/2013
Fecha de finalización: 05/09/2013
Fabiola E. Medina; Jesús Rodríguez-Otero; Enrique M. Cabaleiro-Lago.
- 20 Título del trabajo:** A DFT-D study of stacking interactions between buckybowls and fullerenes
Nombre del congreso: XXXIX CONGRESO INTERNACIONAL DE QUÍMICOS TEÓRICOS DE EXPRESIÓN LATINA.
Ciudad de celebración: Granada, España
Fecha de celebración: 30/06/2013
Fecha de finalización: 05/07/2013
D. Josa; J. Rodríguez-Otero; E.M. Cabaleiro-Lago; I. González-Veloso; L.A. Santos; T.C. Ramalho.
- 21 Título del trabajo:** Computational study of the interaction between halogen anions and heterasumanenes
Nombre del congreso: XXXIX CONGRESO INTERNACIONAL DE QUÍMICOS TEÓRICOS DE EXPRESIÓN LATINA.
Ciudad de celebración: Granada, España
Fecha de celebración: 30/06/2013
Fecha de finalización: 05/07/2013
J. Rodríguez Otero; F.E. Medina; E.M. Cabaleiro Lago; I. Gonzalez Veloso; D. Josa.
- 22 Título del trabajo:** Interaction between chloride anion and substituted buckybowls
Nombre del congreso: XXXIX CONGRESO INTERNACIONAL DE QUÍMICOS TEÓRICOS DE EXPRESIÓN LATINA.
Ciudad de celebración: Granada, España
Fecha de celebración: 30/06/2013
Fecha de finalización: 05/07/2013
A. Campo-Cacharrón; E.M. Cabaleiro-Lago; J. Rodríguez-Otero.



- 23 Título del trabajo:** A DFT-D STUDY OF STACKING INTERACTIONS OF SUBSTITUED BUCKYBOWLS WITH FULLERENES
Nombre del congreso: XXXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina. QUITEL 2012.
Ciudad de celebración: Natal, Brasil
Fecha de celebración: 02/12/2012
Fecha de finalización: 07/12/2012
D. Josa; J. Rodríguez-Otero; E. M. Cabaleiro-Lago; M. Rellán-Piñeiro; L. Azevedo-Santos; T. Castro-Ramalho.
- 24 Título del trabajo:** Effect of stepwise microhydration on the imidazolium...indole interaction
Nombre del congreso: 16th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry.
Ciudad de celebración: Basel,
Fecha de celebración: 01/11/2012
Fecha de finalización: 30/11/2012
A. A. Rodríguez-Sanz; A. Campo-Cacharrón; J. Carrazana-García¹; E. M. Cabaleiro-Lago; J. Rodríguez-Otero.
- 25 Título del trabajo:** STUDY OF THE CATION- π INTERACTION IN TERNARY SYSTEMS INVOLVING AROMATIC UNITS OF AMINO ACIDS
Nombre del congreso: 16th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry.
Ciudad de celebración: Basel,
Fecha de celebración: 01/11/2012
Fecha de finalización: 30/11/2012
A. Campo-Cacharrón; E. M. Cabaleiro-Lago; J. Carrazana-García; A.A. Rodríguez-Sanz; J. Rodríguez-Otero.
- 26 Título del trabajo:** COMPUTATIONAL STUDY OF THE INTERACTIONS BETWEEN COCAINE MOLECULE AND DIFFERENT MONOMERS IN MOLECULARLY IMPRINTED POLYMERS
Nombre del congreso: Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC-2012).
Ciudad de celebración: Pavia, Italia
Fecha de celebración: 02/09/2012
Fecha de finalización: 07/09/2012
A. Peña-Gallego; J. Rodríguez-Otero; E. Cabaleiro-Lago; O. Bermejo; A. Moreda.
- 27 Título del trabajo:** Computational study of the interaction of corannulene and a perfluoro-ortho-phenylenemercury
Nombre del congreso: Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC-2012).
Ciudad de celebración: Pavia, Italia
Fecha de celebración: 02/09/2012
Fecha de finalización: 07/09/2012
J. Rodríguez-Otero; I. González-veloso; M. Rellán-Piñeiro; A. Peña-Gallego; E. m. Cabaleiro-Lago.
- 28 Título del trabajo:** INTERACTIONS BETWEEN CATIONIC AND AROMATIC AMINO ACIDS. COMPLEXES FORMED WITH GUANIDINIUM CATION
Nombre del congreso: Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC-2012).
Ciudad de celebración: Pavia, Italia
Fecha de celebración: 02/09/2012
Fecha de finalización: 07/09/2012
E. M. Cabaleiro-Lago; J. A. Carrazana-garcía; A. A. Rodríguez Sanz; J. Rodríguez Otero.



- 29** **Título del trabajo:** MICROHYDRATION EFFECTS ON THE INTERACTION OF GUANIDINIUM WITH BENZENE, PHENOL AND INDOLE
Nombre del congreso: Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC-2012).
Ciudad de celebración: Pavia, Italia
Fecha de celebración: 02/09/2012
Fecha de finalización: 07/09/2012
A. A. Rodríguez-Sanz; J. Carrazana-García; E. M. Cabaleiro-Lago; J. Rodríguez-Otero.
- 30** **Título del trabajo:** STUDY OF THE CATION...PI INTERACTION IN TERNARY SYSTEMS INVOLVING AROMATIC UNITS OF AMINO ACIDS
Nombre del congreso: Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC-2012).
Ciudad de celebración: Pavia, Italia
Fecha de celebración: 02/09/2012
Fecha de finalización: 07/09/2012
A. Campo-Cacharrón; E. M. Cabaleiro-Lago; J. Carrazana-García; J. Rodríguez-Otero.
- 31** **Título del trabajo:** THEORETICAL STUDY OF TERNARY INDOLE-M+-X--COMPLEXES
Nombre del congreso: Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC-2012).
Ciudad de celebración: Pavia, Italia
Fecha de celebración: 02/09/2012
Fecha de finalización: 07/09/2012
J. A. Carrazana-García; E. M. Cabaleiro-Lago; A. A. Rodríguez-Sanz; A. Campo-Cacharrón; J. Rodríguez-Otero.
- 32** **Título del trabajo:** THEORETICAL STUDY OF THE INTERACTION BETWEEN Ru(II) METAL CLUSTER AND BUCKYBOWLS
Nombre del congreso: Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC-2012).
Ciudad de celebración: Pavia, Italia
Fecha de celebración: 02/09/2012
Fecha de finalización: 07/09/2012
M. Rellán; D. Josa; I. González-Veloso; J. Rodríguez-Otero; E. M. Cabaleiro-Lago.
- 33** **Título del trabajo:** ESTUDIO AB INITIO Y DFT DE LA INTERACCIÓN ENTRE EL CORANULENO Y CATIONES ALCALINOS
Nombre del congreso: XXXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina.
Ciudad de celebración: Playa del Carmen, México
Fecha de celebración: 04/12/2011
Fecha de finalización: 09/12/2011
Marcos Rellán-Piñeiro; D. Josa; J. Rodríguez-Otero; E. M. Cabaleiro-Lago; A. Campo-Cacharrón; A. A. Rodríguez-Sanz; .
- 34** **Título del trabajo:** ESTUDIO AB INITIO Y DFT DEL SUMANENO
Nombre del congreso: XXXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina.
Ciudad de celebración: Playa del Carmen, México
Fecha de celebración: 04/12/2011
Fecha de finalización: 09/12/2011
J. Rodríguez-Otero; M- L- Mella-Louzao; Marcos Rellán-Piñeiro; E. M. Cabaleiro-Lago; A. Campo-Cacharrón; A. A. Rodríguez-Sanz.
- 35** **Título del trabajo:** Efecto de la microhidratación en la interacción del catión pirrolidinio con especies aromáticas.
Nombre del congreso: XXXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina.



Ciudad de celebración: Playa del Carmen, México

Fecha de celebración: 04/12/2011

Fecha de finalización: 09/12/2011

E. M. Cabaleiro-Lago; A. Campo-Cacharrón; A. A. Rodríguez-Sanz; Marcos Rellán-Piñeiro; J. Rodríguez-Otero.

- 36 Título del trabajo:** Estudio computacional del efecto de la microhidratación sobre la interacción cation- π entre el catión guanidinio y sistemas aromáticos

Nombre del congreso: XXXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

Ciudad de celebración: Playa del Carmen, México

Fecha de celebración: 04/12/2011

Fecha de finalización: 09/12/2011

A. Rodríguez-Sanz; A. Campo-Cacharrón; Marcos Rellán-Piñeiro; E. M. Cabaleiro-Lago; J. Rodríguez-Otero.

- 37 Título del trabajo:** Estudio de la interacción catión- π en trímeros formados con especies aromáticas.

Nombre del congreso: XXXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

Ciudad de celebración: Playa del Carmen, México

Fecha de celebración: 04/12/2011

Fecha de finalización: 09/12/2011

A. Campo-Cacharrón; A. A. Rodríguez-Sanz; Marcos Rellán-Piñeiro; E. M. Cabaleiro-Lago; J. Rodríguez-Otero.

- 38 Título del trabajo:** A computational study of phenylalanine interaction with guanidinium cation

Nombre del congreso: 15th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry (November 2011) ECSOC-15.

Ciudad de celebración: Basel,

Fecha de celebración: 01/11/2011

Fecha de finalización: 30/11/2011

E. M. Cabaleiro-Lago; Alba Campo-Cacharrón; Ana A. Rodríguez-Sanz; J. Rodríguez-Otero.

- 39 Título del trabajo:** A computational study of the role of water molecules on cation- π interactions

Nombre del congreso: 15th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry (November 2011) ECSOC-15.

Ciudad de celebración: Basel,

Fecha de celebración: 01/11/2011

Fecha de finalización: 30/11/2011

A. Campo-Cacharrón; A. A. Rodríguez-Sanz; E. M. Cabaleiro-Lago; J. Rodríguez-Otero.

- 40 Título del trabajo:** AB INITIO AND DFT STUDY OF INTERACTION BETWEEN CORANNULENE AND ALKALI CATIONS

Nombre del congreso: 15th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry (November 2011) ECSOC-15.

Ciudad de celebración: Basel,

Fecha de celebración: 01/11/2011

Fecha de finalización: 30/11/2011

M. Rellán-Piñeiro; J. Rodríguez-Otero; E. M. Cabaleiro-Lago; D. Josa.

- 41 Título del trabajo:** Computational study on the effect of microhydration on ammonium-phenol and methylammonium-phenol complexes

Nombre del congreso: 15th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry (November 2011) ECSOC-15.



Ciudad de celebración: Basel,

Fecha de celebración: 01/11/2011

Fecha de finalización: 30/11/2011

A. A. Rodríguez-Sanz; A. Campo-Cacharrón; E. M. Cabaleiro-Lago; J. Rodríguez-Otero.

42 Título del trabajo: Influence of the substitution on the inversion barrier of corannulene: a theoretical study

Nombre del congreso: 15th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry (November 2011) ECSOC-15.

Ciudad de celebración: Basel,

Fecha de celebración: 01/11/2011

Fecha de finalización: 30/11/2011

Jorge A. Carrazana-García; Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jesús Rodríguez-Otero.

43 Título del trabajo: Theoretical study of the decomposition of ethyl and ethyl 3-phenyl glycidate

Nombre del congreso: 15th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry (November 2011) ECSOC-15.

Ciudad de celebración: Basel,

Fecha de celebración: 01/11/2011

Fecha de finalización: 30/11/2011

D. Josa A. Peña-Gallego; J. Rodríguez-Otero; E.M. Cabaleiro-Lago.

44 Título del trabajo: AB INITIO AND DFT STUDY OF INTERACTION BETWEEN CORANNULENE AND ALKALI CATIONS

Nombre del congreso: Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists. WATOC2011.

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha de celebración: 17/07/2011

Fecha de finalización: 22/07/2011

M. Rellán-Piñeiro; J. Rodríguez-Otero; E. M. Cabaleiro-Lago.

45 Título del trabajo: AB INITIO AND DFT STUDY OF SUMANENE

Nombre del congreso: Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists. WATOC2011.

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha de celebración: 17/07/2011

Fecha de finalización: 22/07/2011

J. Rodríguez-Otero; E. M. Cabaleiro-Lago; A. Peña-Gallego.

46 Título del trabajo: ANALYSIS OF THE PERFORMANCE OF DFT-D, M05-2X AND M06-2X FOR STUDYING π - π INTERACTIONS

Nombre del congreso: Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists. WATOC2011.

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha de celebración: 17/07/2011

Fecha de finalización: 22/07/2011

D. Josa; J. Rodríguez-Otero; E. M. Cabaleiro-Lago.

47 Título del trabajo: COMPUTATIONAL STUDY OF PROGRESSIVE HYDRATION OF AMINES IN GAS PHASE

Nombre del congreso: Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists. WATOC2011.

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España



Fecha de celebración: 17/07/2011

Fecha de finalización: 22/07/2011

M. Sánchez-Lozano; E. M. Cabaleiro-Lago; J. M. Hermida-Ramón.

48 Título del trabajo: EFFECT OF STEPWISE MICROHYDRATION ON THE METHYLAMMONIUM...PHENOL INTERACTION

Nombre del congreso: Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists. WATOC2011.

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha de celebración: 17/07/2011

Fecha de finalización: 22/07/2011

A. A. Rodríguez-Sanz; A. Campo-Cacharrón; E. M. Cabaleiro-Lago; J. Rodríguez-Otero.

49 Título del trabajo: ENERGETIC ANALYSIS OF THE GUANIDINIUM-BENZENE INTERACTION MODULATED BY ANIONS

Nombre del congreso: Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists. WATOC2011.

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha de celebración: 17/07/2011

Fecha de finalización: 22/07/2011

J. A. Carrazana-García; E. M. Cabaleiro-Lago; J. Rodríguez-Otero.

50 Título del trabajo: INTERMOLECULAR FORCES AND STRUCTURES OF IONIC LIQUIDS IN ION PAIRS AND SMALL CLUSTERS

Nombre del congreso: Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists. WATOC2011.

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha de celebración: 17/07/2011

Fecha de finalización: 22/07/2011

C. M. Fong-Padrón; J. Rodríguez-Otero; E. M. Cabaleiro-Lago.

51 Título del trabajo: STUDY OF THE INTERACTION OF PHENYLALANINE AND GUANIDINIUM CATION

Nombre del congreso: Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists. WATOC2011.

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha de celebración: 17/07/2011

Fecha de finalización: 22/07/2011

E. M. Cabaleiro-Lago; J. Rodríguez-Otero; Á. Peña-Gallego.

52 Título del trabajo: Study of cation...pi interactions modulated by the environment

Nombre del congreso: Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists. WATOC2011.

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha de celebración: 17/07/2011

Fecha de finalización: 22/07/2011

A. Campo-Cacharrón; A. A. Rodríguez-Sanz; E. M. Cabaleiro-Lago; J. Rodríguez-Otero.

53 Título del trabajo: Cation - p complexes between alkaline cations and molecular bowls related with fullerene: a DFT study

Nombre del congreso: 14th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry.

Ciudad de celebración: Basel,

Fecha de celebración: 01/11/2010



Fecha de finalización: 30/11/2010

Jorge A. Carrazana-García; Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jesús Rodríguez-Otero.

54 Título del trabajo: Interaction between anions and naphthalendiimides

Nombre del congreso: 14th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry.

Ciudad de celebración: Basel,

Fecha de celebración: 01/11/2010

Fecha de finalización: 30/11/2010

Alba Campo-Cacharrón; Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jesús Rodríguez-Otero.

55 Título del trabajo: DFT Study Of The Complex Formation Between Alkaline Cations And Curved π Systems Derived from Fullerene

Nombre del congreso: 7th ERA-Chemistry Flash Conference, Bioinspired Chemistry.

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha de celebración: 24/10/2010

Fecha de finalización: 27/10/2010

Jorge A. Carrazana García; Enrique M. Cabaleiro Lago; Jesús Rodríguez Otero.

56 Título del trabajo: Ab Initio and DFT Study of the Structure. Bowl-to-Bowl Inversion Barrier, and aromaticity of corannulene

Nombre del congreso: Electronic Structure: principles and Applications. ESPA2010.

Ciudad de celebración: Oviedo, España

Fecha de celebración: 29/06/2010

Fecha de finalización: 02/07/2010

J. Rodríguez-Otero; E. M. Cabaleiro-Lago; A. Peña-Gallego.

57 Título del trabajo: Computational Study of the Hydration Effect upon the Interaction Between Pyrrolidinium Cation and Aromatic Systems

Nombre del congreso: Electronic Structure: principles and Applications. ESPA2010.

Ciudad de celebración: Oviedo, España

Fecha de celebración: 29/06/2010

Fecha de finalización: 02/07/2010

Cabaleiro-Lago; E. M. Rodríguez-Otero; J. Peña-gallego; A.

58 Título del trabajo: DFT Study of Corannulene Dimers

Nombre del congreso: Electronic Structure: principles and Applications. ESPA2010.

Ciudad de celebración: Oviedo, España

Fecha de celebración: 29/06/2010

Fecha de finalización: 02/07/2010

D. Josa; J. Rodríguez-Otero; E. Cabaleiro-Lago.

59 Título del trabajo: Estimated CBS CCSD(T) limit of the interaction energy between water and some ionic liquids

Nombre del congreso: Electronic Structure: principles and Applications. ESPA2010.

Ciudad de celebración: Oviedo, España

Fecha de celebración: 29/06/2010

Fecha de finalización: 02/07/2010

Fong-Padrón; C. Cabaleiro-Lago; E. M. Rodríguez-Otero; J.



- 60** **Título del trabajo:** A Computational study of the mechanism of the unimolecular elimination of α,β -unsaturated aldehydes in the gas phase
Nombre del congreso: 13th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry.
Ciudad de celebración: Lugo, España
Fecha de celebración: 01/11/2009
Fecha de finalización: 30/11/2009
Valentina Erastova; Jesús Rodríguez-Otero; Enrique Cabaleiro-Lago; Ángeles Peña-Gallego.
- 61** **Título del trabajo:** A theoretical study of the aromatic character of polyphosphaphospholes. Is the pyramidalicity the only factor to take into consideration?
Nombre del congreso: 13th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry.
Ciudad de celebración: Lugo, España
Fecha de celebración: 01/11/2009
Fecha de finalización: 30/11/2009
D. Josa; A. Peña-Gallego; J. Rodríguez-Otero; E. M. Cabaleiro- Lago.
- 62** **Título del trabajo:** Interaction between anions and substituted molecular bowls
Nombre del congreso: 13th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry.
Ciudad de celebración: Lugo, España
Fecha de celebración: 01/11/2009
Fecha de finalización: 30/11/2009
Enrique Cabaleiro-Lago; Jesús Rodríguez-Otero; Ángeles Peña-Gallego.
- 63** **Título del trabajo:** A DFT study of carbohydrate- π interactions
Nombre del congreso: 13th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics.
Ciudad de celebración: Lyon, Francia
Fecha de celebración: 31/08/2009
Fecha de finalización: 04/09/2009
A. Peña-Gallego; E. Cabaleiro-Lago; C. Fong-Padron; D. Josa; J. Rodríguez-Otero.
- 64** **Título del trabajo:** A DFT study of the Diels-Alder reaction of butadiene and acrylaldehyde catalyzed by an ionic liquid
Nombre del congreso: 13th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics.
Ciudad de celebración: Lyon, Francia
Fecha de celebración: 31/08/2009
Fecha de finalización: 04/09/2009
C. Fong-Padrón; D. Josa; E.M. Cabaleiro-Lago; A. Peña-Gallego; J. Rodríguez-Otero.
- 65** **Título del trabajo:** A DFT study of the decomposition of ethyl and ethyl 3-phenyl glycidate
Nombre del congreso: 13th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics.
Ciudad de celebración: Lyon, Francia
Fecha de celebración: 31/08/2009
Fecha de finalización: 04/09/2009
D. Josa; E. Cabaleiro-Lago; C. Fong-Padron; A. Peña-Gallego; J. Rodríguez-Otero.
- 66** **Título del trabajo:** A DFT study of the Diels-Alder reaction of butadiene and acrylaldehyde catalyzed by an ionic liquid
Nombre del congreso: 10th Iberian joint meeting on Atomic and Molecular Physics.



Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha de celebración: 12/07/2009

Fecha de finalización: 15/07/2009

Ceila Fong-Padrón; Daniela Josa; Enrique M. Cabaleiro-Lago; Ángeles Peña-Gallego; Jesús Rodríguez-Otero.

67 Título del trabajo: Computational study of complexes formed by molecular bowls and alkalyne cations

Nombre del congreso: 10th Iberian joint meeting on Atomic and Molecular Physics.

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha de celebración: 12/07/2009

Fecha de finalización: 15/07/2009

Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jorge A. Carrazana-García; Jesús Rodríguez-Otero.

68 Título del trabajo: Mechanisms of the decomposition of ethyl and ethyl-3-phenyl glycidate. A DFT study

Nombre del congreso: 10th Iberian joint meeting on Atomic and Molecular Physics.

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha de celebración: 12/07/2009

Fecha de finalización: 15/07/2009

Daniel Josa; Enrique M. Cabaleiro-Lago; Ceila Fong-Padón; Ángeles Peña-Gallego; Jesús Rodríguez-Otero Rodríguez-Otero.

69 Título del trabajo: Selectivity of the Ru(II)-Catalyzed [2+2+2] Cycloaddition of 1,6-Diynes and Tricarbonyl Compounds

Nombre del congreso: 12th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry.

Ciudad de celebración: Lugo, España

Fecha de celebración: 01/11/2008

Fecha de finalización: 30/11/2008

M. Merced Montero-Campillo; Jesús Rodríguez-Otero; Enrique M. Cabaleiro-Lago.

70 Título del trabajo: Study of the Lithium Cation-Ferrocene Interaction by DFT Calculations: An in-Depth Analysis of the Existence of a Planetary System

Nombre del congreso: 12th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry.

Ciudad de celebración: Lugo, España

Fecha de celebración: 01/11/2008

Fecha de finalización: 30/11/2008

Jesús Rodríguez-Otero; Enrique M. Cabaleiro-Lago; Ángeles Peña-Gallego; M. M. Montero-Campillo.

71 Título del trabajo: Study of the interaction between aniline and CH₃CN, CH₃Cl and CH₃F

Nombre del congreso: 12th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry.

Ciudad de celebración: Lugo, España

Fecha de celebración: 01/11/2008

Fecha de finalización: 30/11/2008

Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jesús Rodríguez-Otero; Ángeles Peña-Gallego; M. Merced Montero-Campillo.

72 Título del trabajo: Computational study of the solvent effect upon the interaction between guanidinium cation and aromatic systems

Nombre del congreso: WATOC 2008.

Ciudad de celebración: Sydney, Australia

Fecha de celebración: 14/09/2008

Fecha de finalización: 19/09/2008

Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jesús Rodríguez-Otero; Ángeles Peña-Gallego.



- 73 Título del trabajo:** Theoretical Study of the Solvent Effect on the Interaction between Pyridinium Cation and Benzene
Nombre del congreso: WATOC 2008.
Ciudad de celebración: Sydney, Australia
Fecha de celebración: 14/09/2008
Fecha de finalización: 19/09/2008
Jesús Rodríguez-Otero; Enrique M. Cabaleiro-Lago; Ángeles Peña-Gallego.
- 74 Título del trabajo:** A theoretical study of the mechanism of imidazole formation catalyzed by the ionic liquid [Hbm]BF₄.
Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2008.
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 02/09/2008
Fecha de finalización: 05/09/2008
Ceila Fong-Padrón; Jesús Rodríguez-Otero; Enrique M. Cabaleiro-Lago; America García.
- 75 Título del trabajo:** An ab initio and dft study of the mechanism of the unimolecular elimination of α,β -unsaturated aldehydes in the gas phase.
Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2008.
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 02/09/2008
Fecha de finalización: 05/09/2008
Valentina Erastova; Jesús Rodríguez-Otero; Enrique M. Cabaleiro-Lago; Ángeles Peña-Gallego.
- 76 Título del trabajo:** Study of the effects of cations on the inversion barrier and aromaticity of phosphole.
Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2008.
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 02/09/2008
Fecha de finalización: 05/09/2008
Ángeles Peña-Gallego; Daniela Josa; Enrique Cabaleiro-Lago; Jesús Rodríguez-Otero.
- 77 Título del trabajo:** Theoretical study of the aromaticity of phospholes
Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2008.
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 02/09/2008
Fecha de finalización: 05/09/2008
Daniela Josa; Ángeles Peña-Gallego; Jesús Rodríguez-Otero; Enrique M. Cabaleiro-Lago.
- 78 Título del trabajo:** A DFT STUDY OF THE INTERACTION OF FERROCENE WITH LITHIUM CATION.
Nombre del congreso: 19th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry.
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 13/07/2008
Fecha de finalización: 18/07/2008
Jesús Rodríguez-Otero; Enrique M. Cabaleiro-Lago; Ángeles Peña-Gallego; M. M. Montero-Campillo.
- 79 Título del trabajo:** A computational study of the interaction of indole analogs with h₂O and h₂S.
Nombre del congreso: 19th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry.
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 13/07/2008
Fecha de finalización: 18/07/2008



Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jesús Rodríguez-Otero; Ángeles Peña-Gallego.

- 80 Título del trabajo:** Computational study of the interaction of water and hydrogen sulfide with fused benzene rings.
Nombre del congreso: 19th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry.
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 13/07/2008
Fecha de finalización: 18/07/2008
Jorge A. Carrazana-García; Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jesús Rodríguez-Otero.
- 81 Título del trabajo:** On the mechanism of Ru(II)-catalyzed [2+2+2] cycloaddition of 1,6-diynes and tricarbonyl compounds: A DFT study.
Nombre del congreso: 19th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry.
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 13/07/2008
Fecha de finalización: 18/07/2008
M. Merced Montero-Campillo; Jesús Rodríguez-Otero; Enrique M. Cabaleiro-Lago.
- 82 Título del trabajo:** Estudio teórico de la cicloadición [2+2+2] de 1,6-diiinos y compuestos tricarbónicos catalizada por rutenio
Nombre del congreso: XXXIV CONGRESSO DEI CIHIMICI TEORICI DI ESPRESSIONIE LATINA.
Ciudad de celebración: Cetraro, Italia
Fecha de celebración: 03/07/2008
Fecha de finalización: 08/07/2008
M. Merced Montero-Campillo; Jesús Rodríguez-Otero; Enrique M. Cabaleiro-Lago.
- 83 Título del trabajo:** Cation-pi and anion-pi interactions. changes in aromaticity upon complexation
Nombre del congreso: 11th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry..
Ciudad de celebración: Lugo, España
Fecha de celebración: 01/11/2007
Fecha de finalización: 30/11/2007
Jesús Rodríguez-Otero; Enrique M. Cabaleiro-Lago; Angeles Peña-Gallego; M. Merced Montero-Campillo.
- 84 Título del trabajo:** Characteristics of the interaction in azulene...(H₂X)_n=1,2 (X=O,S) clusters
Nombre del congreso: 11th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry..
Ciudad de celebración: Lugo, España
Fecha de celebración: 01/11/2007
Fecha de finalización: 30/11/2007
Enrique M. Cabaleiro-Lago; Ángeles Peña-Gallego; Jesús Rodríguez-Otero; M. Merced Montero-Campillo.
- 85 Título del trabajo:** On the mechanism of rhodium catalyzed [6+2] cycloaddition of vinylcyclobutanones and alkenes
Nombre del congreso: 11th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry..
Ciudad de celebración: Lugo, España
Fecha de celebración: 01/11/2007
Fecha de finalización: 30/11/2007
M. Merced Montero-Campillo; E. M. Cabaleiro-Lago; J. Rodríguez-Otero.
- 86 Título del trabajo:** Características de la interacción en complejos C₁₀H₈...(H₂X)_{1,2}; X= O, S.
Nombre del congreso: XXXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina.
Ciudad de celebración: La Habana, Cuba



Fecha de celebración: 17/09/2007

Fecha de finalización: 21/09/2007

Enrique M. Cabaleiro Lago; Jesús Rodríguez Otero; M. Merced Montero; Angeles Peña Gallego.

- 87 Título del trabajo:** Estudio teórico del mecanismo de la cicloadición [2+2+2+1] de monóxido de carbono y enediinos catalizada por rodio.

Nombre del congreso: XXXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

Ciudad de celebración: La Habana, Cuba

Fecha de celebración: 17/09/2007

Fecha de finalización: 21/09/2007

M. Merced Montero; Jesús Rodríguez Otero; Enrique M. Cabaleiro Lago; Angeles Peña Gallego.

- 88 Título del trabajo:** Interacciones catión-p y anión-p: efecto de la formación del complejo sobre la aromaticidad.

Nombre del congreso: XXXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

Ciudad de celebración: La Habana, Cuba

Fecha de celebración: 17/09/2007

Fecha de finalización: 21/09/2007

Jesús Rodríguez Otero; Enrique M. Cabaleiro Lago; M. Merced Montero Campillo; Angeles Peña Gallego.

- 89 Título del trabajo:** DFT Study Of The Cyclization of 1,2-divinylbenzene And Derivatives

Nombre del congreso: 10th INTERNATIONAL ELECTRONIC CONFERENCE ON SYNTHETIC ORGANIC CHEMISTRY.

Ciudad de celebración: Lugo, España

Fecha de celebración: 01/11/2006

Fecha de finalización: 30/11/2006

E. M. Cabaleiro-Lago; A. Peña-Gallego; J. Rodríguez-Otero.

- 90 Título del trabajo:** The influence of BF₃ on the reaction path of the [4 + 2] cycloaddition of vinylketene with formalimine. A computational study

Nombre del congreso: 10th INTERNATIONAL ELECTRONIC CONFERENCE ON SYNTHETIC ORGANIC CHEMISTRY.

Ciudad de celebración: Lugo, España

Fecha de celebración: 01/11/2006

Fecha de finalización: 30/11/2006

A. Peña-Gallego; J. Rodríguez-Otero; E. M. Cabaleiro-Lago.

- 91 Título del trabajo:** Theoretical study of the pericyclic/pseudopericyclic character of the automerization of Perfluorotetramethyl (Dewar thiophene) exo-S-oxide.

Nombre del congreso: 10th INTERNATIONAL ELECTRONIC CONFERENCE ON SYNTHETIC ORGANIC CHEMISTRY.

Ciudad de celebración: Lugo, España

Fecha de celebración: 01/11/2006

Fecha de finalización: 30/11/2006

J. Rodríguez-Otero; E. M. Cabaleiro-Lago; A. Peña-Gallego.

- 92 Título del trabajo:** Analysis of the nucleophilic addition of water to ketenes. A DFT study.

Nombre del congreso: ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS. ESPA 2006.

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha de celebración: 18/07/2006

Fecha de finalización: 21/07/2006



J. M. Hermida-Ramón; J. Rodríguez-Otero; E. M. Cabaleiro-Lago; M. M. Montero-Campillo; Á. Peña-Gallego.

- 93 Título del trabajo:** DFT study of the pseudopericyclic character of electrocyclization in 1,2,4,6-heptatetraene sulfur derivatives
Nombre del congreso: ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS. ESPA 2006.
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 18/07/2006
Fecha de finalización: 21/07/2006
E. M. Cabaleiro-Lago; J. Rodríguez-Otero; M. M. Montero-Campillo; Á. Peña-Gallego.
- 94 Título del trabajo:** The study of the effects of BF₃ on the [4+2] cycloaddition of vinylketene with formalimine
Nombre del congreso: ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS. ESPA 2006.
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 18/07/2006
Fecha de finalización: 21/07/2006
Á. Peña-Gallego; E. M. Cabaleiro-Lago; M. M. Montero-Campillo; J. Rodríguez-Otero.
- 95 Título del trabajo:** Transition metal-catalyzed hetero-[5+2] cycloadditions of cyclopropilimines and alkynes: A DFT study
Nombre del congreso: ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS. ESPA 2006.
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 18/07/2006
Fecha de finalización: 21/07/2006
M. M. Montero-Campillo; J. Rodríguez-Otero; E. M. Cabaleiro-Lago; Á. Peña-Gallego.
- 96 Título del trabajo:** Aromaticity of electrocyclic reaction transition structures, assessed by anisotropy of the current induced density
Nombre del congreso: XIIth International Congress of Quantum Chemistry.
Ciudad de celebración: Kyoto, Japón
Fecha de celebración: 21/05/2006
Fecha de finalización: 26/05/2006
J. Rodríguez-Otero; E.M. Cabaleiro-Lago; M.M. Montero Campillo; A. Peña-Gallego.
- 97 Título del trabajo:** Effects of BF₃ on the aromaticity and the pericyclic-pseudopericyclic character
Nombre del congreso: XIIth International Congress of Quantum Chemistry.
Ciudad de celebración: Kyoto, Japón
Fecha de celebración: 21/05/2006
Fecha de finalización: 26/05/2006
A. Peña-Gallego; M.M. Montero Campillo; E.M. Cabaleiro-Lago; J. Rodríguez-Otero.
- 98 Título del trabajo:** From Diademane to Triquinacene: a theoretical study of a pericyclic rearrangement catalyzed by Lithium
Nombre del congreso: XIIth International Congress of Quantum Chemistry.
Ciudad de celebración: Kyoto, Japón
Fecha de celebración: 21/05/2006
Fecha de finalización: 26/05/2006
M.M. Montero Campillo; J. Rodríguez-Otero; E.M. Cabaleiro-Lago; A. Peña-Gallego.



- 99** **Título del trabajo:** DFT Study Of The Addition Of SO₂ To 1, 3-Butadiene And Derivatives
Nombre del congreso: 9th Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry.
Ciudad de celebración: Lugo, España
Fecha de celebración: 01/11/2005
Fecha de finalización: 30/11/2005
Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jose M. Hermida-Ramón; Mercedes Montero-Campillo; Ángeles Peña-Gallego; Jesús Rodríguez-Otero.
- 100** **Título del trabajo:** Estudio computacional de la interacción en complejos fenol (CH₃X)_n; (x=CN, Cl, F; n=1, 2)
Nombre del congreso: XXX bienal de la RSEQ.
Ciudad de celebración: Lugo, España
Fecha de celebración: 19/09/2005
Fecha de finalización: 23/09/2005
E. M. Cabaleiro-Lago; M. Montero-Campillo; Á. Peña-Gallego y J. Rodríguez-Otero.
- 101** **Título del trabajo:** Estudio teórico comparativo del carácter pseudopericíclico-pericíclico en una serie de electrociclaciones de dienilcetenas a ciclohexadienonas
Nombre del congreso: XXX bienal de la RSEQ.
Ciudad de celebración: Lugo, España
Fecha de celebración: 19/09/2005
Fecha de finalización: 23/09/2005
Á. Peña-Gallego; E. Cabaleiro-Lago; M. Montero-Campillo y J. Rodríguez-Otero.
- 102** **Título del trabajo:** Estudio teórico de la cicloadición [2 + 2 + 2] de 1,6-diinos con compuestos tricarbónicos catalizada por rutenio (II)
Nombre del congreso: XXX bienal de la RSEQ.
Ciudad de celebración: Lugo, España
Fecha de celebración: 19/09/2005
Fecha de finalización: 23/09/2005
: J. Rodríguez-Otero; E. Cabaleiro-Lago; M. Montero-Campillo y Á. Peña-Gallego.
- 103** **Título del trabajo:** Estudio teórico de reacciones pericíclicas catalizadas por litio
Nombre del congreso: XXX bienal de la RSEQ.
Ciudad de celebración: Lugo, España
Fecha de celebración: 19/09/2005
Fecha de finalización: 23/09/2005
M. M. Montero-Campillo; J. Rodríguez-Otero; E. M. Cabaleiro-Lago; Á. Peña-Gallego.
- 104** **Título del trabajo:** A DFT STUDY OF THE 1,3-SIGMATROPIC REARRANGEMENT IN THE NITROSATION OF FORMAMIDE. IS THIS A PSEUDOPERICYCLIC PROCESS?
Nombre del congreso: ESPA 2004, ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS.
Ciudad de celebración: Valladolid,
Fecha de celebración: 15/09/2004
Fecha de finalización: 17/09/2004
A. Peña-Gallego; E. M. Cabaleiro-Lago; J. M. Hermida-Ramón; M. M. Montero-Campillo; J. Rodríguez-Otero.
- 105** **Título del trabajo:** AB INITIO AND DFT STUDY OF THE AROMATICITY OF FULVALENES DERIVED FROM METHYLIDENECYCLOPROPANES.
Nombre del congreso: ESPA 2004, ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS.



Ciudad de celebración: Valladolid,

Fecha de celebración: 15/09/2004

Fecha de finalización: 17/09/2004

M. Merced Montero-Campillo; Enrique M. Cabaleiro-Lago; Ángeles Peña-Gallego; Jesús Rodríguez-Otero; J.M.Hermida-Ramón.

106 Título del trabajo: DFT STUDY OF SO₂ ELIMINATION FROM 2,5-DIHYDROTHIOPHENE 1,1-DIOXIDE AND DERIVATIVES

Nombre del congreso: ESPA 2004, ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS.

Ciudad de celebración: Valladolid,

Fecha de celebración: 15/09/2004

Fecha de finalización: 17/09/2004

Enrique M. Cabaleiro-Lago; Beatriz Caseiro-Blanco; Jose M. Hermida-Ramón; Mercedes Montero-Campillo; Ángeles Peña-Gallego; Jesús Rodríguez-Otero.

107 Título del trabajo: DFT STUDY OF THE PSEUDOPERICYCLIC CHARACTER OF ELECTROCYCLIZATION IN 1,2,4,6-HEPTATETRAENE ANALOGUES

Nombre del congreso: ESPA 2004, ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS.

Ciudad de celebración: Valladolid,

Fecha de celebración: 15/09/2004

Fecha de finalización: 17/09/2004

Jesús Rodríguez-Otero; Enrique M. Cabaleiro-Lago; Rosa M. García-López; Jose M. Hermida-Ramón; M. Merced Montero-Campillo; Ángeles Peña-Gallego.

108 Título del trabajo: THEORETICAL CHARACTERIZATION OF THE STRUCTURES AND ENERGIES OF THE BENZENE-(H₂S)_n (n=1-4) CLUSTERS.

Nombre del congreso: ESPA 2004, ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS.

Ciudad de celebración: Valladolid,

Fecha de celebración: 15/09/2004

Fecha de finalización: 17/09/2004

Jose M. Hermida-Ramón; Enrique M. Cabaleiro-Lago; M. Merced Montero-Campillo; Ángeles Peña-Gallego; Jesús Rodríguez-Otero.

109 Título del trabajo: A Theoretical Study of the [4 + 2] cycloadditions of Formaldimine to Vinylketene, Imidoalketene and Formylketene. Are these processes pseudopericyclic reactions?

Nombre del congreso: XIth International Congress of Quantum Chemistry.

Ciudad de celebración: Bonn, Alemania

Fecha de celebración: 20/07/2003

Fecha de finalización: 26/07/2003

Angeles Peña Gallego; Jesus Rodriguez Otero; Jose M. Hermida Ramon; Enrique M. Cabaleiro Lago.

110 Título del trabajo: Computational study of the dissociation of oxalic acid in water clusters. The role of a second carboxylic group.

Nombre del congreso: XIth International Congress of Quantum Chemistry.

Ciudad de celebración: Bonn, Alemania

Fecha de celebración: 20/07/2003

Fecha de finalización: 26/07/2003

Jose M. Hermida Ramon; Enrique M. Cabaleiro Lago; Jesus Rodriguez Otero; Angeles Peña Gallego.

111 Título del trabajo: Evaluation of magnetic properties as a criterion for the elucidation of the pseudopericyclic character of 1,5-electrocyclizations in nitrile ylides

Nombre del congreso: XIth International Congress of Quantum Chemistry.



Ciudad de celebración: Bonn, Alemania

Fecha de celebración: 20/07/2003

Fecha de finalización: 26/07/2003

Jesus Rodriguez Otero; Enrique M. Cabaleiro Lago; Angeles Peña Gallego; Jose M. Hermida-Ramon.

112 Título del trabajo: DFT study of the cycloaddition between 1,2,4-pentatriene and formaldehyde

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

Ciudad de celebración: Sevilla, España

Fecha de celebración: 11/09/2002

Fecha de finalización: 13/09/2002

M.L. Ferreiro; E.M. Cabaleiro-Lago; A. Peña-Gallego; J. Rodríguez-Otero.

113 Título del trabajo: Pericyclic and pseudopericyclic thermal decarbonylations. A DFT study.

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

Ciudad de celebración: Sevilla, España

Fecha de celebración: 11/09/2002

Fecha de finalización: 13/09/2002

J. Rodríguez-Otero; E.M. Cabaleiro-Lago; M.L. Ferreiro; A. Peña-Gallego.

114 Título del trabajo: Study of the aromatic character of the transition state for the sigmatropic methylene shift in bicyclo[2.1.0]pentene

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

Ciudad de celebración: Sevilla, España

Fecha de celebración: 11/09/2002

Fecha de finalización: 13/09/2002

A. Peña-Gallego; E.M. Cabaleiro-Lago; M.L. Ferreiro; J. Rodríguez-Otero.

115 Título del trabajo: Criteria for the elucidation of the pseudopericyclic character of the cyclization of (Z)-1,2,4,6-heptatetraene and its heterosubstituted analogues. Magnetic properties and natural bond analysis

Nombre del congreso: 6th World Congress of Theoretically Oriented Chemists. Watoc02.

Ciudad de celebración: Lugano, Suiza

Fecha de celebración: 04/08/2002

Fecha de finalización: 09/08/2002

Jesús Rodríguez-Otero; Enrique M. Cabaleiro-Lago.

116 Título del trabajo: Dissociation of H-X acids (X=F, Cl, Br, I) in water clusters. A computational study

Nombre del congreso: 6th World Congress of Theoretically Oriented Chemists. Watoc02.

Ciudad de celebración: Lugano, Suiza

Fecha de celebración: 04/08/2002

Fecha de finalización: 09/08/2002

Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jose M. Hermida-Ramón; Jesús Rodríguez-Otero.

117 Título del trabajo: An ab initio study of the interaction in thioformamide and formamide dimer and trimer

Nombre del congreso: Electronic Structure and Chemical Reactivity (ESCR).

Ciudad de celebración: Bellaterra, España

Fecha de celebración: 19/09/2001

Fecha de finalización: 22/09/2001

E. Cabaleiro-Lago.



- 118 Título del trabajo:** Estudio dinámico clásico de efectos isotópicos y especificidad rotacional en reacciones unimoleculares para sistemas de 6,7 átomos
Nombre del congreso: XIII Encontro galego-portugues de química.
Ciudad de celebración: Vigo, España
Fecha de celebración: 17/11/1999
Fecha de finalización: 19/11/1999
Em. Martínez Núñez; A. Pena Gallego; E. Cabaleiro Lago; A. Fernández Ramos; J M Hermida Ramón.
- 119 Título del trabajo:** Estudio teórico de la influencia de la rotación en la isomerización y disociación del CIONO
Nombre del congreso: XIII Encontro galego-portugues de química.
Ciudad de celebración: Vigo, España
Fecha de celebración: 17/11/1999
Fecha de finalización: 19/11/1999
A. Peña-Gallego; E. Martínez-Núñez; E. Cabaleiro-Lago; A. Fernández-Ramos; J. M. Hermida-Ramón.
- 120 Título del trabajo:** Descomposición del CH₃SH⁺: estudio ab initio y RRKM
Nombre del congreso: XXV Congresso Internazionale dei Chimici teorici di espressione latina.
Ciudad de celebración: Nápoles, Italia
Fecha de celebración: 13/09/1999
Fecha de finalización: 18/09/1999
A. Peña-Gallego; E. M. Cabaleiro-Lago; A. Fernández-Ramos; M. Luisa-Ferreiro; J. M. Hermida-Ramón; E. Martínez-Núñez.
- 121 Título del trabajo:** Estudio ab initio de la estructura de dihidroxiantraquinonas
Nombre del congreso: XXV Congresso Internazionale dei Chimici teorici di espressione latina.
Ciudad de celebración: Nápoles, Italia
Fecha de celebración: 13/09/1999
Fecha de finalización: 18/09/1999
M. Luisa-Ferreiro; J. Rodriguez-Otero; A. Peña-Gallego; E. M. Cabaleiro-Lago; A. Fernández-Ramos; J. M. Hermida-Ramón; E. Martínez-Núñez.
- 122 Título del trabajo:** Estudio ab initio de la interacción en agregados de metilamina
Nombre del congreso: XXV Congresso Internazionale dei Chimici teorici di espressione latina.
Ciudad de celebración: Nápoles, Italia
Fecha de celebración: 13/09/1999
Fecha de finalización: 18/09/1999
E. Cabaleiro-Lago; J. M. Hermida-Ramón; E. Martínez-Núñez; A. Peña-Gallego; A. Fernández-Ramos; M. Luisa-Ferreiro; M. A. Ríos.
- 123 Título del trabajo:** Estudio ab initio y DFT de la electrociclación de (z)-exa-1,3,5-trieno y sus derivados heterosaturados
Nombre del congreso: XXV Congresso Internazionale dei Chimici teorici di espressione latina.
Ciudad de celebración: Nápoles, Italia
Fecha de celebración: 13/09/1999
Fecha de finalización: 18/09/1999
J. Rodriguez-Otero; A. Peña-Gallego; E. M. Cabaleiro-Lago; A. Fernández-Ramos; M. Luisa-Ferreiro; J. M. Hermida-Ramón; E. Martínez-Núñez.



- 124 Título del trabajo:** Estudio dinámico de la descomposición del catión mercaptometilo
Nombre del congreso: XXV Congresso Internazionale dei Chimici teorici di espressione latina.
Ciudad de celebración: Nápoles, Italia
Fecha de celebración: 13/09/1999
Fecha de finalización: 18/09/1999
E. Martínez-Núñez; E. M. Cabaleiro-Lago; A. Fernández-Ramos; M. Luisa-Ferreiro; J. M. Hermida-Ramón; A. Peña-Gallego.
- 125 Título del trabajo:** Potencial polarizable intermolecular para el ácido formico
Nombre del congreso: XXV Congresso Internazionale dei Chimici teorici di espressione latina.
Ciudad de celebración: Nápoles, Italia
Fecha de celebración: 13/09/1999
Fecha de finalización: 18/09/1999
J. M. Hermida-Ramón; A. Peña-Gallego; E. Martínez-Núñez; M. Luisa-Ferreiro; E. Cabaleiro-Lago; A. Fernández-Ramos; M. A. Ríos.
- 126 Título del trabajo:** A new intermolecular polarizable potential for cis-formic acid. The role of many-body interactions in condensed phases
Nombre del congreso: 5th world congress of theoretically oriented chemist. Watoc.
Ciudad de celebración: Londres, Reino Unido
Fecha de celebración: 01/08/1999
Fecha de finalización: 06/08/1999
E. Cabaleiro-Lago; A. Fernández-Ramos; J. M. Hermida-Ramón; E. Martínez-Núñez; A. Peña-Gallego; M. A. Ríos.
- 127 Título del trabajo:** Ab initio study of the electrocyclization of cis-1,3,5-hexatriene and its heterosubstituted analogs
Nombre del congreso: 5th world congress of theoretically oriented chemist. Watoc.
Ciudad de celebración: Londres, Reino Unido
Fecha de celebración: 01/08/1999
Fecha de finalización: 06/08/1999
E. Cabaleiro-Lago; A. Fernández-Ramos; J. M. Hermida-Ramón; E. Martínez-Núñez; A. Peña-Gallego; J. Rodríguez-Otero.
- 128 Título del trabajo:** Ab initio study of the interaction on hydrazine clusters (n=1-4). Cooperativity of the interaction
Nombre del congreso: 5th world congress of theoretically oriented chemist. Watoc.
Ciudad de celebración: Londres, Reino Unido
Fecha de celebración: 01/08/1999
Fecha de finalización: 06/08/1999
E. Cabaleiro-Lago; A. Fernández-Ramos; J. M. Hermida-Ramón; E. Martínez-Núñez; A. Peña-Gallego; y M. A. Ríos.
- 129 Título del trabajo:** Dynamical study of the unimolecular dissociation of the acetyl radical
Nombre del congreso: 5th world congress of theoretically oriented chemist. Watoc.
Ciudad de celebración: Londres, Reino Unido
Fecha de celebración: 01/08/1999
Fecha de finalización: 06/08/1999
E. Cabaleiro-Lago; A. Fernández-Ramos; J. M. Hermida-Ramón; E. Martínez-Núñez; A. Peña-Gallego; y S. A. Vázquez.



- 130 Título del trabajo:** Dynamical study of three decomposition channels of CH_3SH^+
Nombre del congreso: 5th world congress of theoretically oriented chemist. Watoc.
Ciudad de celebración: Londres, Reino Unido
Fecha de celebración: 01/08/1999
Fecha de finalización: 06/08/1999
E. Cabaleiro-Lago; A. Fernández-Ramos; J. M. Hermida-Ramón; E. Martínez-Núñez; A. Peña-Gallego; S. A. Vázquez.
- 131 Título del trabajo:** Tunneling dynamics of double and triple proton transfer in acetic acid-methanol complexes
Nombre del congreso: 5th world congress of theoretically oriented chemist. Watoc.
Ciudad de celebración: Londres, Reino Unido
Fecha de celebración: 01/08/1999
Fecha de finalización: 06/08/1999
A. Fernández-Ramos; Z. Smedarchina; E. Cabaleiro-Lago; J. M. Hermida-Ramón; E. Martínez-Núñez; A. Peña-Gallego y J. Rodríguez-Otero.
- 132 Título del trabajo:** Unimolecular decomposition of CH_3SH^+ : an ab initio and RRKM study
Nombre del congreso: 5th world congress of theoretically oriented chemist. Watoc.
Ciudad de celebración: Londres, Reino Unido
Fecha de celebración: 01/08/1999
Fecha de finalización: 06/08/1999
E. Cabaleiro-Lago; A. Fernández-Ramos; J. M. Hermida-Ramón; E. Martínez-Núñez; A. Peña-Gallego; S. A. Vázquez.
- 133 Título del trabajo:** Ab initio molecular orbital analysis of acetaldehyde dimers. Thermodynamic properties
Nombre del congreso: Workshop on Computational Chemistry.
Ciudad de celebración: Miraflores de la Sierra, España
Fecha de celebración: 18/07/1998
Fecha de finalización: 20/07/1998
: E. Cabaleiro-Lago; A. Fernández-Ramos; J. M. Hermida-Ramón E. Martínez-Núñez; A. Peña-Gallego; M. A. Ríos; J. Rodríguez-Otero.
- 134 Título del trabajo:** Classical trajectory simulations of unimolecular cis-trans isomerization and dissociation of CIONO
Nombre del congreso: Workshop on Computational Chemistry.
Ciudad de celebración: Miraflores de la Sierra, España
Fecha de celebración: 18/07/1998
Fecha de finalización: 20/07/1998
E. Cabaleiro-Lago; A. Fernández-Ramos; J. M. Hermida-Ramón; E. Martínez-Núñez; A. Peña-Gallego; M. A. Ríos; J. Rodríguez-Otero.
- 135 Título del trabajo:** Dynamical study of the inversion in the oxiranyl radical
Nombre del congreso: Workshop on Computational Chemistry.
Ciudad de celebración: Miraflores de la Sierra, España
Fecha de celebración: 18/07/1998
Fecha de finalización: 20/07/1998
E. Cabaleiro-Lago; A. Fernández-Ramos; J. M. Hermida-Ramón; E. Martínez-Núñez; A. Peña-Gallego; M. A. Ríos.



- 136 Título del trabajo:** Mode specific effects in the thermal decomposition of MeONO
Nombre del congreso: Workshop on Computational Chemistry.
Ciudad de celebración: Miraflores de la Sierra, España
Fecha de celebración: 18/07/1998
Fecha de finalización: 20/07/1998
: E. Cabaleiro-Lago; A. Fernández-Ramos; J. M. Hermida-Ramón; E. Martínez-Núñez; A. Peña-Gallego; M. A. Ríos; J. Rodríguez-Otero.
- 137 Título del trabajo:** Intermolecular potential for acetonitrile based on perturbational calculations. Application to liquid phase
Nombre del congreso: Euroconference on Molecular Liquids.
Ciudad de celebración: Aghia Pelaghia, Grecia
Fecha de celebración: 05/09/1997
Fecha de finalización: 10/09/1997
E. M. Cabaleiro-Lago; M. A. Ríos.
- 138 Título del trabajo:** Development of an intermolecular potential function to describe the properties of HCN clusters
Nombre del congreso: EUCO-CC2 second european conference on computational chemistry.
Ciudad de celebración: Portugal
Fecha de celebración: 02/09/1997
Fecha de finalización: 06/09/1997
JESUS RODRIGUEZ OTERO; ENRIQUE MANUEL CABALEIRO LAGO; JOSE MANUEL HERMIDA RAMON; MIGUEL ANGEL RIOS FERNANDEZ.
- 139 Título del trabajo:** Intermolecular polarizable potential for formaldehyde dimer. Application to liquid simulations
Nombre del congreso: EUCO-CC2 second european conference on computational chemistry.
Ciudad de celebración: Portugal
Fecha de celebración: 02/09/1997
Fecha de finalización: 06/09/1997
JOSE MANUEL HERMIDA RAMON; ENRIQUE MANUEL CABALEIRO LAGO; MIGUEL ANGEL RIOS FERNANDEZ.
- 140 Título del trabajo:** Intermolecular potential function of hydroxylamine dimer. Application to liquid phase
Nombre del congreso: EUCO-CC2 second european conference on computational chemistry.
Ciudad de celebración: Portugal
Fecha de celebración: 02/09/1997
Fecha de finalización: 06/09/1997
ENRIQUE MANUEL CABALEIRO LAGO; JOSE MANUEL HERMIDA RAMON; MIGUEL ANGEL RIOS FERNANDEZ.
- 141 Título del trabajo:** Intermolecular potential for acetone dimer. Application to liquid simulation
Nombre del congreso: EMLG Annual Meeting.
Ciudad de celebración: Balatonfüred, Hungría
Fecha de celebración: 08/09/1996
Fecha de finalización: 12/09/1996
J. M. Hermida-Ramón; E. M. Cabaleiro-Lago; M. A. Ríos.

- 142 Título del trabajo:** Simulation of liquid acetonitrile with an ab initio developed potential
Nombre del congreso: EMLG Annual Meeting.
Ciudad de celebración: Balatonfüred, Hungría
Fecha de celebración: 08/09/1996
Fecha de finalización: 12/09/1996
E. M. Cabaleiro-Lago; J. M. Hermida-Ramón; M. A. Ríos.

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

Comités científicos, técnicos y/o asesores

- 1 Título del comité:** Comité científico congreso ECSOC-24
Primaria (Cód. Unesco): 230000 - Química
Fecha de inicio-fin: 01/11/2020 - 30/11/2020
- 2 Título del comité:** Comité científico congreso ECSOC-23
Primaria (Cód. Unesco): 230000 - Química
Fecha de inicio-fin: 01/11/2019 - 30/11/2019
- 3 Título del comité:** Comité científico congreso ECSOC-22
Primaria (Cód. Unesco): 230000 - Química
Fecha de inicio-fin: 01/11/2018 - 30/11/2018
- 4 Título del comité:** Comité científico congreso ECSOC-16
Primaria (Cód. Unesco): 230000 - Química
Fecha de inicio-fin: 01/11/2012 - 30/11/2012
- 5 Título del comité:** Comité científico congreso ECSOC-14
Primaria (Cód. Unesco): 230000 - Química
Fecha de inicio-fin: 01/11/2010 - 30/11/2010

Organización de actividades de I+D+i

- 1 Título de la actividad:** WATOC2011
Tipo de actividad: Miembro del comité organizador del congreso
Fecha de inicio-fin: 17/07/2011 - 22/07/2011
- 2 Título de la actividad:** IBER 2009
Tipo de actividad: Miembro del comité organizador del congreso
Fecha de inicio-fin: 12/06/2009 - 15/06/2009
- 3 Título de la actividad:** ESPA2006
Tipo de actividad: Miembro del comité organizador del congreso
Fecha de inicio-fin: 18/04/2006 - 21/07/2006



Gestión de I+D+i

- 1** **Nombre de la actividad:** Estudio computacional de la modulación de la interacción catión-pi por medio del entorno
Tipología de la gestión: Gestión de acciones y proyectos de I+D+i
Funciones desempeñadas: Investigador principal del proyecto
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio: 01/01/2010 **Duración:** 3 años
- 2** **Nombre de la actividad:** Estudio teórico de la interacción intermolecular en complejos que contienen moléculas aromáticas. Efecto de la coordinación sobre la aromaticidad
Tipología de la gestión: Gestión de acciones y proyectos de I+D+i
Funciones desempeñadas: Investigador principal del proyecto
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio: 01/10/2006 **Duración:** 3 años

Otros méritos

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

Entidad de realización: Department of Chemistry
Ciudad entidad realización: University of Cambridge, Reino Unido
Fecha de inicio-fin: 01/03/1995 - 30/06/1995
Objetivos de la estancia: Doctorado/a

Ayudas y becas obtenidas

- 1** **Nombre de la ayuda:** Bolsa postdoctoral Xunta de Galicia
Finalidad: Posdoctoral
Entidad concesionaria: Xunta de Galicia
Fecha de concesión: 01/01/1999
Fecha de finalización: 26/09/1999
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela
- 2** **Nombre de la ayuda:** Bolsa predoutoral de Xunta de Galicia 1997/1998
Finalidad: Predoctoral
Entidad concesionaria: Xunta de Galicia
Fecha de concesión: 01/10/1995
Fecha de finalización: 30/03/1998
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela
- 3** **Nombre de la ayuda:** Bolsa predoutoral de Xunta de Galicia 1996/1997
Finalidad: Predoctoral
Entidad concesionaria: Xunta de Galicia
Fecha de concesión: 01/10/1996



Fecha de finalización: 30/09/1997

Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela

4 Nombre de la ayuda: Bolsa predoutoral de Xunta de Galicia 1995/1996

Finalidad: Predoctoral

Entidad concesionaria: Xunta de Galicia

Fecha de concesión: 01/10/1995

Fecha de finalización: 30/09/1996

Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela

Premios, menciones y distinciones

Descripción: Premio extraordinario de doctorado

Entidad concesionaria: Universidad de Santiago de Compostela **Tipo de entidad:** Universidad

Fecha de concesión: 28/04/1999

Períodos de actividad investigadora

Nº de tramos reconocidos: 4

Entidad acreditante: comisión nacional evaluadora de la actividad investigadora

Fecha de obtención: 17/07/2020

Acreditaciones/reconocimientos obtenidos

1 Descripción: Acreditación para el cuerpo de catedráticos de Universidad

Entidad acreditante: Agencia Nacional de Evaluación de la Calidad y Acreditación

Tipo de entidad: ANECA

Fecha del reconocimiento: 02/06/2015

2 Descripción: Reconocimiento a la excelencia curricular (6 tramos)

Entidad acreditante: ACSUG

Tipo de entidad: Agencia autonómica

Fecha del reconocimiento: 30/04/2013

3 Descripción: Reconocimiento de la labor investigadora y docente

Entidad acreditante: ACSUG

Tipo de entidad: Agencia autonómica

Fecha del reconocimiento: 09/05/2007