



# Curriculum Vitae

## Pablo Andrés DENIS MARINONI



Actualizado: 22/06/2017

Publicado: 22/06/2017

**Sistema Nacional de Investigadores**  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas  
Categorización actual: Nivel I  
Ingreso al SNI: Activo(01/03/2009)

## Datos generales

### Información de contacto

E-mail: pabod@fq.edu.uy

Teléfono: 099714280

Dirección: Facultad de Química, Gral Flores 2124, CC1157, 11600, Montevideo, Uruguay

### Institución principal

DETEMA / Facultad de Química - UDeLaR / Universidad de la República / Uruguay

### Dirección institucional

Dirección: Facultad de Química - UDeLaR / Gral. Flores 2124, Facultad de Química, DEQUIFIM / 11600 / Montevideo / Montevideo / Uruguay

Teléfono: (+11600) 099714280

Fax: 9241906

E-mail/Web: pablod@fq.edu.uy

## Formación

### Formación concluida

#### Formación académica/Titulación

##### Posgrado

2001 - 2004

Doctorado

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

Título: Estudio cinético y termodinámico de reacciones químicas de interés atmosférico

Tutor/es: Minh Tho Nguyen Oscar N. Ventura

Obtención del título: 2004

Becario de: Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas , Uruguay

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

1998 - 2000

Maestría

Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

Título: Estudio teórico computacional de reacciones químicas de interés atmosférico

Tutor/es: Oscar N. Ventura

Obtención del título: 2000

Becario de: Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas , Uruguay

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

##### Grado

1994 - 1997

Grado

Bachiller en Química

Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

*Obtención del título:* 1998

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química

## Formación complementaria

### Postdoctorado

2004 - 2005

Theoretical Characterization of Transition metal Carbides, Prof. Dr. Krishnan Balasubramanian

University Of California At Davis , Estados Unidos

*Becario de:* Department of Energy , Estados Unidos

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

### Cursos corta duración

2001 - 2001

estudio estructural de moléculas bioactivas, espectroscopia (EPR)

Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de Fármacos

2000 - 2000

Espectroscopia molecular

Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

2000 - 2000

Termodinámica Estadística

Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Física

1999 - 1999

Modelado Molecular y Espectros Electrónicos

Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

1998 - 1998

Química Cuántica Aplicada

Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

1998 - 1998

Mecánica Cuántica

Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Física

1997 - 1997

Modelado Biomolecular

Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

1996 - 1996

Cristalografía

Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química

1996 - 1996

Espectroscopia molecular III

Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

### Otras instancias

2005

Otros

*Nombre del evento:* Curso de Nanotecnología dictado por Tatiana Makarova

*Institución organizadora:* Facultad de Ingeniería , Uruguay

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

2001	Otros <i>Nombre del evento:</i> Modelos de Evolución de Proteínas <i>Institución organizadora:</i> Facultad de Química , Uruguay <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Biología
1996	Otros <i>Nombre del evento:</i> Química del Estado sólido <i>Institución organizadora:</i> Facultad de Química , Uruguay <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química
1994	Otros <i>Nombre del evento:</i> Primer y segundo año de la Licenciatura en Matemáticas, Facultad de Ciencias  <i>Institución organizadora:</i> Facultad de Ciencias , Uruguay <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura

## Construcción institucional

Centro de Computados: se ha creado un centro de computos en el cual se desarrollan las tareas de investigación. Desde su creación el mismo ha brindado 20 millones de horas de computo a diferentes usuarios.

## Idiomas

Inglés  
Entiende (Muy Bien) / Habla (Muy Bien) / Lee (Muy Bien) / Escribe (Muy Bien)

## Areas de actuación

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Nanotecnología, Química Inorgánica, Atmosférica, Orgánica,

## Actuación Profesional

### Cargos desempeñados actualmente

*Desde:* 07/2008  
Prof. Adjunto , (Docente Grado 3 Titular, 40 horas semanales / Dedicación total) , Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay

### Universidad de la República , Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay

#### Vínculos con la institución

07/2008 - Actual, *Vínculo:* Prof. Adjunto, Docente Grado 3 Titular, (40 horas semanales / Dedicación total)

06/2007 - 07/2008, *Vínculo:* Grado 2, Docente Grado 2 Titular, (40 horas semanales / Dedicación total)

02/2006 - 06/2007, *Vínculo:* Grado 2, Docente Grado 2 Titular, (35 horas semanales)

06/2005 - 02/2006, *Vínculo:* Grado 2, Docente Grado 2 Interino, (30 horas semanales)

02/2002 - 06/2005, *Vínculo:* Grado 2, Docente Grado 2 Interino, (20 horas semanales)

05/2001 - 02/2002, *Vínculo:* Grado 1, Docente Grado 1 Interino, (25 horas semanales)

#### Actividades

10/2013 - Actual

Líneas de Investigación

Celdas Solares , Integrante del Equipo

07/2008 - Actual

Líneas de Investigación , Facultad de Química , Grupo de Nanotecnología y Química Teórica

Caracterización de radicales de importancia en química atmosférica, procesos combustión y astroquímica , Coordinador o Responsable

06/2008 - Actual

Líneas de Investigación , Facultad de Química  
Química Supramolecular , Coordinador o Responsable

07/2005 - Actual

Líneas de Investigación , Facultad de Química , Grupo de Nanotecnología Computacional y Química Teórica  
Nanotecnología Computacional , Coordinador o Responsable

06/2004 - Actual

Líneas de Investigación , Facultad de Química  
Diseño de Fármacos , Integrante del Equipo

06/2005 - Actual

Docencia , Grado  
Matemáticas 03, Álgebra Lineal , Responsable , Ingeniería Química

06/2005 - Actual

Docencia , Grado  
Matemáticas 03, Álgebra Lineal , Responsable , Ingeniería Química

06/2005 - Actual

Docencia , Grado  
Matemáticas 08, Ecuaciones Diferenciales en Derivadas Parciales , Responsable , Ingeniería Química

06/2005 - Actual

Docencia , Grado  
Matemáticas 08, Ecuaciones Diferenciales en Derivadas Parciales , Responsable , Ingeniería Química

06/2005 - Actual

Docencia , Grado  
Matemáticas 08, Optimización , Responsable , Ingeniería Química

02/1999 - 07/2004

Docencia , Doctorado  
Mecánica Cuántica , Doctorado en Química

02/1999 - 07/2004

Docencia , Doctorado  
Mecánica Cuántica , Doctorado en Química

02/1999 - 07/2004

Docencia , Doctorado  
Química Teórica , Doctorado en Química

02/1999 - 07/2004

Docencia , Doctorado  
Modelado Molecular I , Doctorado en Química

02/1999 - 07/2004

Docencia , Doctorado  
Fisicoquímica Molecular Básica , Doctorado en Química

02/1999 - 07/2004

Docencia , Doctorado  
Fisicoquímica Molecular Básica , Doctorado en Química

7/2016 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química  
Desarrollo de nuevas celdas solares sensibilizadas por colorante a partir de modificaciones del pigmento N3 , Integrante del Equipo

Sistema Nacional de Investigadores

Sistema Nacional de Investigadores

10/2012 - 10/2014

Proyectos de Investigación y Desarrollo , UDELAR

Desarrollo y evaluación de nuevos compuestos cromóforos capaces de actuar como antena en celdas solares de pigmentos fotosensibles. , Integrante del Equipo

10/2012 - 10/2012

Proyectos de Investigación y Desarrollo , UDELAR

Diseño de materiales derivados del grafeno para almacenar hidrogeno , Coordinador o Responsable

05/2006 - 05/2008

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , Grupo de Nanotecnología Computacional y Química Teórica

Caracterización teórico experimental de fullerenos, nanotubos y láminas de grafito, sustituidas total o parcialmente con elementos de los grupos IIIA y IVA , Coordinador o Responsable

## University of California at Davis, CA , Estados Unidos

### Vínculos con la institución

07/2004 - 07/2005, *Vínculo:* Postdoc, (40 horas semanales / Dedicación total)

### Actividades

07/2004 - 07/2005

Líneas de Investigación , Institute for Data Analysis and Visualization

Transition metal carbides , Integrante del Equipo

### Lineas de investigación

*Título:* Caracterización de radicales de importancia en química atmosférica, procesos combustión y astroquímica

*Tipo de participación:* Coordinador o Responsable

*Objetivo:* La caracterización moléculas cuyo tiempo de vida es muy corto, debido a su alta reactividad, es de trascendental importancia en el modelado de los procesos que transcurren en la química atmosférica, la química de combustión y el estudio de la química en el espacio. Como consecuencia de sus propiedades químicas, la caracterización experimental de estas especies es extremadamente dificultosa. Actualmente, la química teórica ha llegado a un nivel en el que permite obtener información sobre moléculas que contienen hasta 8-10 átomos pesados, con una calidad similar o mejor a la que se obtendría en las investigaciones experimentales. Prueba de ello, es que en la próxima edición del CRC Handbook of Physics and Chemistry la información obtenida por el presente investigador para los radicales HSO, SOH y HOOO serán considerados como los valores de referencia ya que no existe confianza en los resultados experimentales. Empleando metodologías multirreferencia, coupled clusters o DFT caracterizamos moléculas e investigamos reacciones químicas en las áreas antes mencionadas. Para obtener una buena caracterización es necesario emplear además de las metodologías antes mencionadas, bases que permitan extrapolar al infinito, incluir correcciones para los efectos core valence, relativistas escalares, spin orbit splitting y efectos anarmónicos. Actualmente estamos enfocados en la evaluación de estas dos últimas contribuciones.

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

*Título:* Celdas Solares

*Tipo de participación:* Integrante del Equipo

*Objetivo:* En esta línea de investigación buscamos diseñar con el Dr. Gancheff nuevos pigmentos para celdas solares

*Equipos:* Jorge Gancheff (Integrante)

*Palabras clave:* Química Inorgánica

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Teórica

*Título:* Diseño de Fármacos

*Tipo de participación:* Integrante del Equipo

*Objetivo:* En esta línea de investigación colaboramos con la Dra Margot Paulino y el Dr. Federico Iribarne para sintetizar nuevos medicamentos capaces de tratar enfermedades como el mal de chagas. Asimismo, estamos buscando la manera de emplear nanoestructuras para realizar en forma más efectiva el 'delivery' de las drogas a las zonas enfermas. Para ello pensamos unir las drogas a los nanotubos de carbono mediante interacciones no covalentes.

*Palabras clave:* Farmacología

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

*Título:* Nanotecnología Computacional

*Tipo de participación:* Coordinador o Responsable

*Objetivo:* La nanotecnología es una de las nuevas disciplinas emergentes en el mundo científico. Sus orígenes se remontan a la década de los 80 cuando Kroto, Smalley y Curl descubrieron una nueva forma alotrópica de carbono, el C60. En 1991 la nanotecnología dio un segundo gran paso con el descubrimiento de los nanotubos de carbono. El mismo fue realizado por Iijima en los laboratorios de la empresa NEC, cuando logró plegar láminas de grafito para formar multiwall carbon nanotubes (MWCNT). El avanza más reciente ha sido la síntesis de láminas de grafeno. Luego de más de 20 años de investigaciones sobre la química de fulerenos y nanotubos podemos decir que las áreas más importantes de trabajo son las que se detallan a continuación. 1) Estudio de la reactividad química propiedades electrónicas y magnéticas de láminas de grafeno 2) estudio de la reactividad, propiedades electrónicas y magnéticas de nanotubos de carbono 3) Uso de nanoestructuras para almacenar hidrógeno 4) propiedades mecánicas de nanotubos

*Equipos:* Federico Iribarne(Integrante); claudia pereyra(Integrante)

*Palabras clave:* Nanotecnología, Química Teórica

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Título:* Química Supramolecular

*Tipo de participación:* Coordinador o Responsable

*Objetivo:* En esta línea de investigación buscamos junto al Dr. Jorge Gancheff la síntesis de macroestructuras empleando como bloques complejos metálicos que contienen diferentes spacers.

*Palabras clave:* Química Supramolecular

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Complejos de Renio

*Título:* Transition metal carbides

*Tipo de participación:* Integrante del Equipo

*Objetivo:* Se investigaron las propiedades de varios transition metal carbides empleando metodologías multirreferencia.

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Espectroscopía

## Proyectos

2016 - Actual

*Título:* Desarrollo de nuevas celdas solares sensibilizadas por colorante a partir de modificaciones del pigmento N3, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* El acceso a energía de bajo costo representa una variable sumamente importante en un desarrollo socio-económico sostenido en países con economías emergentes como lo es Uruguay. En ese sentido, un fuerte impulso a la diversificación de la matriz energética aparece como una buena estrategia. Las energías renovables —que se presentan como una fuente de energía limpia y sustentable— han representado en los últimos años una alternativa importante al abastecimiento energético a partir de recursos fósiles. Entre ellas, las denominadas tecnologías fotovoltaicas (que generan electricidad a partir de la radiación solar) han despertado un creciente interés en los últimos tiempos. A la hora de ser tenida en cuenta como una solución real a la diversificación de la matriz energética nacional, la fuente de energía solar se ha topado con la dificultad (no menor) de los altos costos asociados a los paneles solares. Esta tecnología, que está basada en uniones al estado sólido (usualmente de silicio), ha sido desafiada recientemente por la tecnología de las denominadas celdas solares sensibilizadas por colorante (Dye Sensitised Solar Cells, DSSC). Estas celdas ofrecen la enorme ventaja de presentar bajos costos de producción y muestran al mismo tiempo, una serie de características interesantes que dan lugar a un potencial muy importante para un ingreso exitoso y consolidado en el mercado de las energías renovables. El objetivo de la presente propuesta es el desarrollo de nuevas celdas DSSC. Si bien estas se conocen desde hace algunos años, el reto es obtener un producto nacional a un costo razonable operando con una buena eficiencia. A nivel nacional y regional, existe una escasa capacidad de ensamblado de celdas DSSC operativas. Es por ese motivo que esta propuesta representaría también una inmejorable oportunidad para consolidar la experiencia de los grupos de investigación involucrados en la temática energética incluida en este proyecto. El desarrollo del mismo generaría a su vez recursos humanos sumamente valiosos en un área de investigación interdisciplinaria muy importante y actual.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:*

*Equipo:* Jorge Gancheff(Responsable); Gustavo(Integrante)

*Financiadores:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Apoyo financiero

*Palabras clave:* Energía

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Celdas Solares

2006 - 2008

*Título:* Caracterización teórico experimental de fulerenos, nanotubos y láminas de grafito, sustituidas total o parcialmente con elementos de los grupos IIIA y IVA, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* estudio de fulerenos y nanotubos sustituidos total o parcialmente con elementos de los grupos IIIA e IVA. En una primera instancia se realizarán investigaciones teóricas en estas estructuras que intentaran sumarse el trabajo experimental en materiales que se realiza en la Cátedra de Física. Esperamos encontrar nuevos materiales con propiedades químicas, eléctricas, ópticas y mecánicas mejoradas

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:*

*Equipo:* Ricardo Faccio(Integrante); Helena Pardo(Integrante); Leopoldo Suescun(Integrante); Alvaro Momburu(Integrante); Pablo A. Denis(Responsable)

*Financiadores:* DINACYT/DICYT/CONICYT / Apoyo financiero

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

2012 - 2012

*Título:* Diseño de materiales derivados del grafeno para almacenar hidrogeno, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* El gran desarrollo industrial que la humanidad experimentó durante el siglo XX incrementó significativamente su dependencia de los combustibles fósiles. La misma resulta nociva por dos aspectos: a) los combustible fósiles son no renovable b) son contaminantes. Desde hace algunos años se ha propuesto al hidrógeno como combustible sustituto de los combustibles fósiles. Entre sus ventajas podemos destacar que su combustión genera agua y por lo tanto no contamina; además, es un recurso fácilmente obtenible. Si bien las industrias automotrices han creado varios prototipos capaces de funcionar a hidrógeno, estamos muy lejos de que su uso se vea masificado debido a un problema difícil de resolver: no se ha conseguido encontrar un material que sea capaz de almacenar reversiblemente hidrógeno en condiciones normales. El objetivo de este proyecto consiste en desarrollar un compuesto derivado del grafeno que sea capaz de almacenar al menos 7.5% en peso de hidrógeno (densidad gravimétrica), 70 kg/m<sup>3</sup> (densidad volumétrica) y una energía de adsorción de 15 kJ/mol por molécula de H<sub>2</sub>. Con este fin planeamos introducir centros insaturados en el grafeno que permitan la unión de metales livianos como el calcio, aluminio. De esta manera se evitará el depósito de clusters metálicos y se distribuirán homogéneamente sobre el grafeno. El hecho de que se empleen metales livianos no afectaría significativamente la capacidad de almacenamiento de la nanoestructura y tampoco elevaría el costo del compuesto debido a que el grafeno, aluminio y calcio poseen un bajo costo, característica esencial para su producción a gran escala.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 1(Pregrado),

*Equipo:* Federico Iribarne(Integrante); claudia pereyra(Integrante)

*Financiadores:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Apoyo financiero

*Palabras clave:* Energía

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

2012 - 2014

*Título:* Desarrollo y evaluación de nuevos compuestos cromóforos capaces de actuar como antena en celdas solares de pigmentos fotosensibles., *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Disponer de energía a bajo costo es un variable esencial para lograr un desarrollo socio-económico sostenido en países de economías emergentes como Uruguay. Una buena estrategia a tales efectos implica impulsar más agresivamente la diversificación de la matriz energética. Las energías renovables, que se presentan como una fuente de energía limpia y sustentable, han emergido en los últimos años como una solución importante a los problemas que implica el abastecimiento energético a partir de recursos fósiles. Entre ellas, los sistemas de generación de energía a partir de radiación solar, han despertado un enorme y creciente interés en los últimos años. Las mayores dificultades que ha encontrado esta fuente de energía para ser tenida en cuenta como una alternativa real a la diversificación energética nacional están asociadas a los altos costos de los paneles de celdas fotovoltaicas. Los mismos, que están basados en uniones al estado sólido, usualmente de silicio, están siendo desafiados por celdas denominadas de "tercera generación", basadas en óxidos nanocristalinos y filmes de polímeros conductores. Éstas, conocidas como celdas solares sensibilizadas por colorante (Dye Sensitized Solar Cells, DSSC), ofrecen la enorme ventaja de bajos costos de producción y muestran características atractivas para su ingreso y consolidación en el mercado. El objetivo de la presente propuesta es el desarrollo de nuevas celdas DSSC. Si bien éstas se conocen desde hace algunos años, el gran reto es ofrecer una alternativa de bajo costo. Si se tiene en cuenta que estas celdas están pensadas para ser usadas en grandes superficies (como los ventanales de un edificio), la variable "costos" se torna de suma importancia en países como Uruguay. De esta manera, las celdas DSSC podrían ingresar exitosamente en el mercado uruguayo de las energías renovables, lo cual representaría un enorme logro en la oferta energética local a mediano y largo plazo.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 2(Pregrado),

*Equipo:* Jorge Gancheff(Integrante); Maria Fernanda Cerda(Integrante); Paula Enciso(Integrante); Franco Cabrerizo(Integrante)

*Financiadores:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Apoyo financiero

*Palabras clave:* Energía

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica



## Producción científica/tecnológica

Mi trabajo científico ha creado la infraestructura necesaria para llevar a cabo investigación. En la actualidad contamos con un laboratorio con 200000 U\$S en equipamiento computacional, habiendo construido una de las supercomputadoras mas potentes de la UDELAR. El mismo permite desarrollar cinco líneas de investigación, tres como responsable y 2 como integrante de equipo. En total he publicado 108 artículos en revistas arbitradas, de los cuales soy único autor en 48, primer autor en 88 y corresponding author en 88. Las investigaciones realizadas han tenido alto impacto a nivel internacional, lo que se refleja en un H-index de 27 y en el hecho de que sea referee para 53 revistas de alto nivel como Journal of the American Chemical Society, ACSNANO, Journal of Chemical Physics, Journal of Physical Chemistry A,B,C, and Chemistry, a European Journal. Recientemente comenze a ocupar el cargo de Editor Asociado de la revista RSC Advances, publicada por la Royal Society of Chemistry. He evaluado proyectos para NSF (USA) y varios países mas. Dentro del ambito nacional, en el año 2009 fui único ganador del premio Caldeyro-Barcia en Química otorgado por el PEDECIBA, no existiendo menciones especiales. En la primera línea de investigación como responsable, empleamos la Química-Teórica para caracterizar pequeñas moléculas. Las investigaciones realizadas motivaron que se me invitara para escribir un review para el Journal of Sulfur Chemistry, sobre termoquímica del azufre. También es importante destacar que los datos obtenidos en el año 2005 para los radicales HSO y SOH son los valores de referencia adoptados por dos publicaciones: Bond Dissociation energies del CRC Handbook of Physics and Chemistry y las Third-Millennium Thermochemical tables compiladas por el Dr. Burcat. En otro trabajo realizado en el año 2002, obtuvimos valores para el radical HOOO, que también fueron incluidos como referencia en el Handbook CRC. En una segunda línea de investigación, empleamos la Química Teórica para diseñar receptores de distintas moléculas. En otras 2 líneas de investigación colaboro con otros grupos de la Universidad. Ellos son: a) la Dra. Paulino, dedicada al diseño de Fármacos. b) celdas solares, también junto al Dr. Gancheff. Finalmente, la Nanotecnología es la otra línea de investigación donde actúo como responsable. En esta área he publicado 80 artículos en revistas con referato, 78 de los mismos como corresponding author. Esta línea de investigación es pionera en la UDELAR. En efecto, soy el autor responsable del primer trabajo que ha publicado la UDELAR sobre nanotubos de carbono (2008), en una revista arbitrada; también es el caso del fullereno C60 habiéndose realizado esta publicación en el año 2008. Mis contribuciones incluyen el estudio de la química covalente y no covalente de fullerenos, grafeno y nanotubos de carbono, propiedades electrónicas de nanotubos de múltiples paredes, propiedades mecánicas de nanoestructuras y uso de nanoestructuras para almacenar hidrógeno y otros gases combustibles como metano. Recientemente, he escrito un capítulo de libro por invitación, sobre la química covalente del grafeno, para la editorial CRC Press. Finalmente, por las contribuciones realizadas he sido designado como Fellow of the Royal Society of Chemistry.

## Producción bibliográfica

### Artículos publicados

#### Arbitrados

Completo

DENIS, P.A.

## Sistema Nacional de Investigadores

Diels-Alder Reactions onto Fluorinated and Hydrogenated Graphene. Chemical Physics Letters, 2017

*Palabras clave:* nanotecnología

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología

ISSN: 00092614



SCOPUS



Completo

DENIS, P.A.

Structure and Chemical Reactivity of Lithium Doped Graphene on Hydrogen Saturated Silicon Carbide. Journal of Materials Science, v.: 52, p.: 1348 - 1356, 2017

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00222461



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

Lithium adsorption on heteroatom mono and dual doped graphene. Chemical Physics Letters, v.: 672, p.: 70 - 79, 2017

Palabras clave: graphene

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00092614

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261417300581>



SCOPUS

Sistema Nacional de Investigadores

Completo

ULLAH, S; DENIS, P.A.; SATO, F

Triple Doped Monolayer Graphene with Boron, Nitrogen, Aluminum, Silicon, Phosphorus and Sulfur. ChemPhysChem, v.: 18, 2017

Palabras clave: nanotecnología

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

ISSN: 14394235

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; PEREYRA, C.M.; IRIBARNE, F

On the Band Gaps and Effective Masses of Mono and Dual Doped Monolayer Graphene. Computational Materials Science, v.: 137, p.: 20 - 29, 2017

Palabras clave: nanotecnología

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 09270256

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025617302367>

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

Sistema Nacional de Investigadores

Completo

DENIS, P.A.; KRAMER, M; LEE, C; YANNEY, M

An effective trident molecular clip for fullerenes. Journal of Physical Organic Chemistry, 2017

Palabras clave: Química Supramolecular

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Supramolecular

ISSN: 08943230

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; IRIBARNE, F

Cycloaddition Reactions Between Graphene and Fluorinated Maleimide. *Journal of Physical Chemistry C*, v.: 121, p.: 13218 - 13222, 2017

*Palabras clave:* nanotecnología

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 19327447

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; IRIBARNE, F

Dual Doped Monolayer and Bilayer Graphene: The Case of 4p and 2p elements. *Chemical Physics Letters*, v.: 658, p.: 152 - 157, 2016

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

ISSN: 00092614

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261416304274>

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

Effect of Dopant Nature in the Reactivity, Interlayer Bonding and Electronic Properties of Dual Doped Bilayer Graphene. *Physical Chemistry Chemical Physics*, v.: 18, p.: 24693 - 24703, 2016

*Palabras clave:* nanotecnología

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / graphene

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 14639076

The corresponding author is Pablo A. Denis.



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; YANNEY, M

Organic Nanotubes and Belt Shaped Molecules Based on Norbornadiene Tethers. *New Journal of Chemistry*, v.: 40, p.: 202 - 208, 2016

*Palabras clave:* nanotecnología

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 11440546

<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2016/nj/c5nj02255j/#divAbstract>

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; MARTINS A.S.; PEREYRA, C.M.

Band Gap Opening in Dual Doped Monolayer Graphene. *Journal of Physical Chemistry C*, v.: 120, p.: 7103 - 7112, 2016

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

ISSN: 19327447

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.5b11709>

The correspondign author is Pablo A. Denis



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; YANNEY, M

Porphyrins Bearing Corannulene Pincers: Outstanding Fullerene Receptors. RSC Advances, v.: 6, p.: 50978 - 50984, 2016

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

Medio de divulgación: Internet ; ISSN: 20462069

<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2016/ra/c6ra11482b#!divAbstract>

The corresponding author is Pablo A. Denis.



Completo

ALVAREDA, E.; DENIS, P.A.; IRIBARNE, F; PAULINO, M.

Bond dissociation energies and enthalpies of formation of flavonoids: a G4 and M06-2X investigation. Computational and Theoretical Chemistry, 2016

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / QUimica Computacional

ISSN: 2210271X

The correspondign author is Pablo A. Denis



Completo

DENIS, P.A.

Mono and Dual Doped Monolayer Graphene with Aluminum, Silicon, Phosphorus and Sulfur. Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1097, p.: 40 - 47, 2016

Palabras clave: nanotecnología

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 2210271X

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210271X16304078>



Completo

DENIS, P.A.

Heteroatom Promoted Cycloadditions for Graphene. Chemistry Select, v.: 1, p.: 5497 - 5500, 2016

Palabras clave: nanotecnología

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 23656549

Completo

DENIS, P.A.

Fluorinated silicene: a powerful system to adjust the electronic structure of silicene. Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 17, p.: 5393 - 5402, 2015

Palabras clave: nanotecnología

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

ISSN: 14639076



Completo

DENIS, P.A.; IRIBARNE, F

Theoretical investigation of the 9,10-bis(1,3-dithiol-2-ylidene)-9,10-dihydroanthracene (exTTF) dimer. *Structural Chemistry*, v.: 26, p.: 171 - 176, 2015

*Palabras clave:* Química Supramolecular

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Supramolecular

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 10400400 ; DOI: 10.1007/s11224-014-0480-9

<http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs11224-014-0480-9>

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS



Completo

TAM, N.M.; HANG, T.D.; PHAM, H.T.; NGUYEN, H.T.; PHAM-HO, M.P.; DENIS, P.A.; NGUYEN, M.T.

Bonding and singlet-triplet gap of silicon trimer: Effects of protonation and attachment of alkali metal cations. *Journal of Computational Chemistry*, v.: 36, p.: 805 - 815, 2015

*Palabras clave:* nanotecnología

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 01928651

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jcc.23856/full>



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; PEREYRA, C.M.

Structural Characterization and Chemical Reactivity of Dual Doped Graphene. *Carbon*, v.: 87, p.: 106 - 115, 2015

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

ISSN: 00086223

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

Hydrogen Storage in Doped Biphenylene Based Sheets. *Computational and Theoretical Chemistry*, v.: 1062, p.: 30 - 35, 2015

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 2210271X

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210271X15001188>

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

Relative Affinity of Bambus[6]juril Towards Halide Ions: a DFT/GIAO Approach in the Gas Phase, and in the Presence of the Solvent Employing Discrete and Discrete-Continuum Models. *Computational and Theoretical Chemistry*, v.: 1064, p.: 35 - 44, 2015

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Supramolecular

ISSN: 2210271X



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

Pristine Graphene Based Catalysis: Significant Reduction of the Inversion Barriers of Adsorbed and Confined Corannulene, Cumanene and Dibenzof[a,g]corannulene. *Journal of Physical Chemistry A*, v.: 119, p.: 5770 - 5777, 2015

*Palabras clave:* graphene

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 10895639



Completo

DENIS, P.A.; IRIBARNE, F

Strong N-doped Graphene: The Case of 4-(1,3-dimethyl-2,3-dihydro-1 H-benzoimidazol-2-yl)phenyl)dimethylamine (N-DMBI). *Journal of Physical Chemistry C*, 2015

*Palabras clave:* graphene

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

ISSN: 19327447

The corresponding author is Pablo A. Denis



Completo

DENIS, P.A.; IRIBARNE, F

Buckycatcher polymer vs. fullerene-buckycatcher complex: which is stronger?. *International Journal of Quantum Chemistry*, v.: 115, p.: 1668 - 1672, 2015

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00207608

The corresponding author is Pablo A. Denis



Completo

DENIS, P.A.; YANNEY, M

Subphthalocyanines hydrogen bonded capsules featuring norbornadiene tethers: promising fullerene receptors. *Chemical Physics Letters*, v.: 640, p.: 140 - 146, 2015

*Palabras clave:* Química Supramolecular

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00092614

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261415007757>

The corresponding author is Pablo A. Denis



Completo

DENIS, P.A.

Chemical Reactivity and Band Gap Opening of Graphene Doped with Gallium, Germanium, Arsenic and Selenium. *ChemPhysChem*, v.: 15, p.: 3994 - 4000, 2014

*Palabras clave:* graphene

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

ISSN: 14394235

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cphc.201402608/abstract>



Completo

DENIS, P.A.

Design and characterization of two strong fullerene receptors based on ball-socket interactions. *Chemical Physics Letters*, v.: 591, p.: 323 - 327, 2014

*Palabras clave:* Nanotecnología Computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00092614



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

Coupled cluster investigation on the thermochemistry of dimethyl sulfide, dimethyl disulfide and their dissociation products: the problem of the enthalpy of formation of atomic sulfur.. *Molecular Physics*, v.: 112, p.: 1167 - 1173, 2014

*Palabras clave:* termoquímica, benchmark calculations

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica

ISSN: 00268976

<http://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/00268976.2013.837536#.UydAeYU5oV4>



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

Stability and Electronic Properties of Biphenylene Based Functionalized Nanoribbons and Sheets. *Journal of Physical Chemistry C*, v.: 118, p.: 24796 - 24982, 2014

*Palabras clave:* nanotecnología

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

ISSN: 19327447 ; DOI: 10.1021/jp5069895

[pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp5069895](http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp5069895)



SCOPUS



Completo

DENIS, P.A.; GANCHEFF, J.S.

Coupled Cluster and Density Functional Investigation of the hydrogen Bond Between Halides, Paraffines, Olefins and Alkynes. *Structural Chemistry*, v.: 25 3, p.: 903 - 908, 2014

*Palabras clave:* química supramolecular, receptores

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Supramolecular

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 10400400

<http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs11224-013-0361-7>

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; IRIBARNE, F

Theoretical investigation on the interaction between beryllium, magnesium and calcium with benzene, coronene, circumcoronene and graphene. *Chemical Physics*, v.: 430, p.: 1 - 6, 2014

*Palabras clave:* Nanotecnología Computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

ISSN: 03010104 ; DOI: 10.1016/j.chemphys.2013.11.013

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301010413004369>

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS



Completo

DENIS, P.A.; C. PEREYRA HUELMO

New Trends Along Hydrogen Polyoxides: Unusually Long Oxygen-Oxygen Bonds in H<sub>2</sub>O<sub>6</sub> and H<sub>2</sub>O<sub>7</sub>.. Molecular Physics, v.: 112, p.: 3047 - 3056, 2014

*Palabras clave:* Química Inorgánica

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Polyoxidos

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00268976

<http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00268976.2014.928385?journalCode=tmph20#preview>

The corresponding author is Pablo A. Denis



Completo

DENIS, P.A.; PEREYRA, C.M.; IRIBARNE, F

Theoretical Characterization of Sulfur and Nitrogen Dual-doped Graphene. Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1049, p.: 13 - 19, 2014

*Palabras clave:* Nanotecnología Computacional

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 2210271X

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210271X14003788>

The corresponding author is Pablo A. Denis



Completo

DENIS, P.A.

A theoretical study on the interaction between well curved conjugated systems and fullerenes smaller than C<sub>60</sub> or larger than C<sub>70</sub> . Journal of Physical Organic Chemistry, v.: 27, p.: 918 - 925, 2014

*Palabras clave:* Química supramolecular, receptores, nanotecnología

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Supramolecular

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 08943230



Completo

DENIS, P.A.

A comparative study on the performance of suphthalocyanines and corannulene derivatives as receptors for fullerenes. New Journal of Chemistry, v.: 2014 38, p.: 5608 - 5616, 2014

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Supramolecular

ISSN: 11440546



Completo

DENIS, P.A.

Coupled Cluster investigation of the axial and equatorial isomers of pyrrolidine. Molecular Physics, v.: 111, p.: 9 - 17, 2013

*Palabras clave:* química computacional

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / química computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00268976





Completo

DENIS, P.A.

Concentration dependence of the band gaps of Phosphorus and Sulfur Doped Graphene.. Computational Materials Science, v.: 67, p.: 203 - 206, 2013

*Palabras clave:* Nanotecnología Computacional

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 09270256



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

Chemical Reactivity of Electron Doped and Hole Doped Graphene. Journal of Physical Chemistry C, v.: 117, 2013

*Palabras clave:* Nanotecnología Computacional

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 19327447



SCOPUS

Sistema Nacional de Investigadores

Completo

DENIS, P.A.

Theoretical characterization of hydrogen pentoxide, H<sub>2</sub>O<sub>5</sub>. International Journal of Quantum Chemistry, v.: 113 19, p.: 2206 - 2212, 2013

*Palabras clave:* Química Atmosferica, Química Inorganica

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Polioxidos

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00207608

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/qua.24432/abstract>



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; IRIBARNE, F

C2V or C6V: Which is the Most Stable Structure of the Benzene-Lithium Complex?. Chemical Physics Letters, v.: 573, p.: 15 - 18, 2013

*Palabras clave:* Nanotecnología Computacional

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00092614

<http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2013.04.009>

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

Sistema Nacional de Investigadores

Completo

DENIS, P.A.

On the Addition of Aryl Radicals to Graphene. ChemPhysChem, v.: 14, p.: 3271 - 3277, 2013

*Palabras clave:* Nanotecnología Computacional

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 14394235



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

Organic Chemistry of Graphene: the Diels-Alder Reaction. Chemistry - A European Journal (E), v.: 19, p.: 15719 - 15725, 2013

*Palabras clave:* Nanotecnología Computacional

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 15213765



Completo

DENIS, P.A.; IRIBARNE, F

Comparative Study of Defect Reactivity in Graphene. Journal of Physical Chemistry C, v.: 117 19048 19055, 2013

*Palabras clave:* Nanotecnología Computacional

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 19327447

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp4061945>

The corresponding author is Pablo A. Denis





Completo

DENIS, P.A.; GANCHEFF, J.S.

On the encapsulation of halide anions by bambus[6]juril. Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1023, p.: 5 - 9, 2013

*Palabras clave:* química supramolecular, receptores

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Supramolecular

ISSN: 2210271X

<http://dx.doi.org/10.1016/j.comptc.2013.08.023>

The corresponding author is Pablo A. Denis





Completo

DENIS, P.A.; NGUYEN, M.T.; NGUYEN, M.T.

Heat of Formation and Thermochemical Parameters of Silole. Chemical Physics Letters, v.: 588, p.: 17 - 21, 2013

*Palabras clave:* termoquímica, benchmark calculations

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Termoquímica, Benchmark Calculations

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00092614

The corresponding authors are Pablo A. Denis and Minh Tho Nguyen





Completo

DENIS, P.A.

Theoretical characterization of existent and new fullerene receptors. RSC Advances, v.: 3 47, p.: 25296 - 25305, 2013

*Palabras clave:* Nanotecnología Computacional

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología, química supramolecular

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 20462069





Completo

ENCISO, P.; CABRERIZO, F.; GANCHEFF, J.S.; DENIS, P.A.; CERDA, M.F.

Phycocyanin as Potential Natural Dye for Its Use in Photovoltaic Cells. Journal of Applied Solution Chemistry and Modeling, 2013

*Palabras clave:* Energía Solar

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / química inorgánica

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 19295030

Completo

ENGEL, P.S.; GUDIMETLA; GANCHEFF, J.S.; DENIS, P.A.

Solution Phase Photolysis of 1,2-Dithiane Alone and with Single-Walled Carbon Nanotubes. Journal of Physical Chemistry A, v.: 116, 2012

*Palabras clave:* Nanotecnología Computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 10895639

The corresponding authors are Pablo A. Denis and Paul S. Engel



SCOPUS

## Sistema Nacional de Investigadores

Completo

DENIS, P.A.

Chemical Reactivity of Lithium Doped Fullerenes. Journal of Physical Organic Chemistry, v.: 25, p.: 322 - 326, 2012

*Palabras clave:* Nanotecnología Computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 08943230



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; IRIBARNE, F

[2+2] Cycloadditions onto Graphene. Journal of Materials Chemistry, v.: 22 12, p.: 5470 - 5477, 2012

*Palabras clave:* Nanotecnología Computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 09599428

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; IRIBARNE, F

A First Principles Study on the Interaction between Alkyl Radicals and Graphene. Chemistry-A European Journal, v.: 18, p.: 7568 - 7574, 2012

*Palabras clave:* Nanotecnología Computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 09476539

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

On the Interaction Between Alkyl Radicals and Single Wall Carbon Nanotubes. *Journal of Computational Chemistry*, v.: 33, p.: 1511 - 1516, 2012

*Palabras clave:* Nanotecnología Computacional

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 01928651

The corresponding author is Pablo A .Denis



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; R. FACCIO; IRIBARNE, F

How is the stacking interaction of bilayer graphene affected by the presence of defects? . *Computational and Theoretical Chemistry*, v.: 995, p.: 1 - 7, 2012

*Palabras clave:* Nanotecnología Computacional

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 2210271X

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; IRIBARNE, F

Cooperative behavior in functionalized graphene: explaining the occurrence of 1,3 cycloaddition of azomethine ylides onto graphene. *Chemical Physics Letters*, v.: 550, p.: 111 - 117, 2012

*Palabras clave:* Nanotecnología Computacional

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00092614

<http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2012.08.062>

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

Tuning the Electronic Properties of Doped Bilayer Graphene with Small Structural Changes . *Computational and Theoretical Chemistry*, v.: 974, p.: 21 - 25, 2011

*Palabras clave:* graphene nanotecnología computacional

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 2210271X



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; IRIBARNE, F

Addition of Sulfur Radicals to Fullerenes. *International Journal of Quantum Chemistry*, v.: 111 15, p.: 4266 - 4275, 2011

*Palabras clave:* nanotecnología, dft, nanotubos, graphene

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00207608

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; IRIBARNE, F

Monolayer and Bilayer Graphene Functionalized with Nitrene Radicals. Journal of Physical Chemistry C, v.: 115, p.: 195 - 203, 2011

*Palabras clave:* nanotecnología, dft, nanotubos, graphene

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 19327447

The corresponding author is Pablo A. Denis



Completo

DENIS, P.A.; IRIBARNE, F

Theoretical Investigation of Carbon Sulfur Triple bonds. Chemistry-A European Journal, v.: 17, p.: 1979 - 1987, 2011

*Palabras clave:* química general, carbono, azufre, dft

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química General, Bond dissociation energies

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 09476539

The corresponding author is Pablo A. Denis. The impact factor of the Journal is 5.4



Completo

GANCHEFF, J.S.; DENIS, P.A.

Time-Dependent Density Functional Theory Investigation of the Electronic Spectra of Hexanuclear Chalcogenide Re(III) Clusters. Journal of Physical Chemistry A, v.: 115, p.: 211 - 218, 2011

*Palabras clave:* Electronic Spectra

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Espectroscopia UV de complejos metalicos

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 10895639



Completo

DENIS, P.A.

Coupled Cluster, B2PLYP and M06-2X Investigation of the Thermochemistry of Five Membered Nitrogen Containing Heterocycles, Furan and Thiophene. Theoretical Chemistry accounts (Print), v.: 129, p.: 219 - 227, 2011

*Palabras clave:* Benchmark calculations

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Coupled Cluster Theory

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 1432881X



Completo

DENIS, P.A.

When non Covalent Interactions are Stronger Than Covalent Bonds: Bilayer Graphene Doped with Second-Row atoms, Aluminum, Silicon, Phosphorus and Sulfur. Chemical Physics Letters, v.: 508, p.: 95 - 101, 2011

*Palabras clave:* nanotecnología, graphene, DFT

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00092614

<http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2011.04.018>



Completo

DENIS, P.A.; IRIBARNE, F

On the Applicability of Cluster Models to Study the Chemical Reactivity of Carbon Nanotubes. *Journal of Computational Chemistry*, v.: 32 11, p.: 2397 - 2403, 2011

*Palabras clave:* Nanotecnología, nanotubos de carbono, dft

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 01928651



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

Chemical Reactivity of Lithium Doped Monolayer and Bilayer Graphene. *Journal of Physical Chemistry C*, v.: 115 27, p.: 13392 - 13398, 2011

*Palabras clave:* Nanotecnología Computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

ISSN: 19327447



SCOPUS

Sistema Nacional de Investigadores

Completo

DENIS, P.A.

Improving the Chemical Reactivity of Single Wall Carbon Nanotubes with Lithium Doping. *Journal of Physical Chemistry C*, v.: 115 41, p.: 20282 - 20288, 2011

*Palabras clave:* Nanotecnología computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 19327447



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

Theoretical Investigation of the Stacking Interactions between Curved Conjugated Systems and their Interaction with Fullerenes. *Chemical Physics Letters*, v.: 516, p.: 82 - 87, 2011

*Palabras clave:* graphene nanotecnología computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00092614

<http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2011.09.058>



SCOPUS

Sistema Nacional de Investigadores

Completo

DENIS, P.A.

*Band Gap Opening of Monolayer and Bilayer Graphene Doped with Aluminium, Silicon, Phosphorus, and Sulfur.. Chemical Physics Letters*, v.: 492, p.: 251 - 257, 2010

*Palabras clave:* nanotecnología, grafeno

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología Coputacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00092614

<http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2010.04.038>



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; IRIBARNE, F

The 1,3 dipolar cycloaddition of Azomethine Ylides to graphene, single wall carbon nanotubes and C60. International Journal of Quantum Chemistry, v.: 110, p.: 1764 - 1771, 2010

*Palabras clave:* nanotecnología, DFT, grafeno

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00207608

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

Completo

PINTOS, V; CUEVAS, A; ONETO, S; SEOANE, G; DENIS, P.A.; GANCHEFF, J.S.; R. FACCIO; MOMBRU, A.W.; KREMER, C

Structural and theoretical studies of (E,E)-benzaldehyde azine and its rhenium(IV) complex. Journal of Molecular Structure, v.: 963 1, p.: 9 - 15, 2010

*Palabras clave:* Complejos de Renio

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Complejos Metálicos

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00222860



SCOPUS

Sistema Nacional de Investigadores

Completo

GANCHEFF, J.S.; DENIS, P.A.; HAHN, F.E.

Assessment of Density Functional Methods for the Study of Vanadium and Rhenium Complexes with Thiolato Ligands. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 940, p.: 1 - 9, 2010

*Palabras clave:* Complejos de Renio

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Complejos Metálicos

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 01661280



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; GANCHEFF, J.S.

Labeling the Defects of Carbon Nanotubes with Thiol Groups. Journal of Materials Science, v.: 45 4, p.: 1039 - 1045, 2010

*Palabras clave:* nanotecnología

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Nanotecnología Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00222461

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

Sistema Nacional de Investigadores

Completo

DENIS, P.A.

Theoretical Characterization of the SSO, cyclic SOS and SOS isomers. Molecular Physics, v.: 108 2, p.: 171 - 179, 2010

*Palabras clave:* Química Computacional, benchmark calculations

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Coupled Clusters, Benchmark Calculations

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00268976



SCOPUS



Completo

GANCHEFF, J.S.; DENIS, P.A.; HAHN, F.E.

Electronic Spectra of Oxocomplexes of Re(V) with Thiolato Ligands. *Spectrochimica Acta A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, v.: 76, p.: 348 - 355, 2010

*Palabras clave:* Química Inorgánica, Complejos de Renio

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Complejos de Renio

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 05848539

Completo

DENIS, P.A.

On the Enthalpy of Formation of Thiophene. *Theoretical Chemistry accounts (Print)*, v.: 127, p.: 621, 2010

*Palabras clave:* termoquímica, benchmark calculations

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Benchmark Calculations, Coupled Clusters

ISSN: 1432881X



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

## Sistema Nacional de Investigadores

Theoretical investigation of ionized HSO and SOH. *Molecular Physics*, v.: 108, p.: 1739 - 1747, 2010

*Palabras clave:* Química Teórica, Química Atmosférica,

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Coupled Clusters, Benchmark Calculations

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00268976



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; IRIBARNE, F

Thiophene Adsorption on Single Wall Carbon Nanotubes and Graphene. *Journal of Molecular Structure Theochem*, v.: 957, p.: 114 - 119, 2010

*Palabras clave:* nanotecnología, dft, nanotubos, graphene

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 01661280

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

Theoretical investigation of the stability, electronic and magnetic properties of thiolated single wall carbon nanotubes. *International Journal of Quantum Chemistry*, v.: 109, p.: 772 - 781, 2009

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Lugar de publicación:* USA ; ISSN: 00207608 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; IRIBARNE, F; R. FACCIO

Hydrogenated Double Wall Carbon Nanotubes . *Journal of Chemical Physics*, v.: 130 194704, 2009

*Palabras clave:* nanotecnología

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología Coputacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00219606

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

On the vibrational spectra of HSO and SOH. *Spectrochimica Acta A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, v.: 72, p.: 720 - 725, 2009

*Palabras clave:* química atmosférica, espectroscopia

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica Química Atmosférica

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 05848539

Completo

DENIS, P.A.; ORNELLAS, F.R.

*Theoretical characterization of hydrogen polyoxides: HOOH, HOOOH, HOOOOH and HOOO. Journal of Physical Chemistry A*, v.: 113, p.: 499 - 506, 2009

*Palabras clave:* Química Atmosférica, termoquímica

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica Química Atmosférica

*Medio de divulgación:* Papel ; Lugar de publicación: USA ; ISSN: 10895639

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

## Sistema Nacional de Investigadores

Completo

DENIS, P.A.; R. FACCIO; MOMBRU, A.W.

Is it possible to dope single wall carbon nanotubes and graphene with Sulfur. *ChemPhysChem*, v.: 10, p.: 715 - 722, 2009

*Palabras clave:* Nanotecnología graphene nanotubos

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; Lugar de publicación: Alemania ; ISSN: 14394235

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

Density functional investigation of thioepoxidated and thiolated graphene. *Journal of Physical Chemistry C*, v.: 113, p.: 5612 - 5619, 2009

*Palabras clave:* nanotecnología graphene DFT

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 19327447



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; IRIBARNE, F.

On the hydrogen addition to graphene. *Journal of Molecular Structure Theochem*, v.: 907, p.: 93 - 103, 2009

*Palabras clave:* nanotecnología, DFT, grafeno

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 01661280

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

## Sistema Nacional de Investigadores

Completo

R. FACCIO; DENIS, P.A.; H. PARDO; GOYENOLA, C; MOMBRU, A.W.

Mechanical properties of Graphene Nanoribbons. Journal of Physics Condensed Matter, v.: 21, p.: 285304, 2009

*Palabras clave:* nanotecnología

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología Coputacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 09538984



Completo

GANCHEFF, J.S.; KREMER, C; DENIS, P.A.; GIORGI, C.; BIANCHI; CACHAU, R

Thermodynamic study of proton transfer reactions of Re(V) trans-dioxocomplexes in aqueous solution. Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions, v.: 2009, p.: 8257 - 8268, 2009

*Palabras clave:* Química Inorganica, Complejos, DFT

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Complejos de Renio, Metodos de solvatacion, DFT, PCM

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 03009246

Completo

R. FACCIO; H. PARDO; DENIS, P.A.; R. YOSHIKAWA OEIRAS; F. M. ARAUJO-MOREIRA; M. VERÍSSIMO-ALVES; A. W. MOMBRÚ  
Induced magnetism by single carbon vacancies in a 3-D graphitic network. Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics, v.: 77, p.: 035416, 2008

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* USA ; ISSN: 01631829 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

Completo

PAULINO, M.; ALVAREDA, E.; DENIS, P.A.; BARREIRO, E.J.; SPERANDIO DA SILVA, G.M.; DUBIN, M.; GASTELLU, C.; AGUILERA, S; TAPIA, O.

Studies of Tripanocidal (Inhibitory) Power of Naphthoquinones: Evaluation of Quantum Chemical Molecular Descriptors for Structure-activity Relationships. European Journal of Medicinal Chemistry (electrónico), v.: 43, p.: 2238 - 2246, 2008

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Diseño de Fármacos, Mal de Chagas

*Medio de divulgación:* Internet ; ISSN: 17683254 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Holanda

Completo

DENIS, P.A.

Investigation of H<sub>2</sub> Physisorption on Corannulene (C<sub>20</sub>H<sub>10</sub>), Tetraindenocorannulene (C<sub>44</sub>H<sub>18</sub>), Pentaindenocorannulene (C<sub>50</sub>H<sub>20</sub>), C<sub>60</sub>, and their Nitrogen derivatives. Journal of Physical Chemistry C, v.: 112, p.: 2791 - 2796, 2008

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología, Almacenamiento de hidrogeno

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 19327447 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

Es el primer artículo que publica la UDELAR en su historia, en una revista con referato sobre C60.



Completo

DENIS, P.A.

Thermochemistry of 35 selected sulfur compounds, a comparison between experiment and theory. Journal of Sulfur Chemistry, v.: 29 3-4, p.: 327 - 354, 2008

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Termoquímica

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 17415993 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Inglaterra

Artículo review escrito por invitacion para la edicion especial del Journal of Sulfur Chemistry: Extreme Sulfur Chemistry



Completo

DENIS, P.A.; R. FACCIO

Theoretical characterization of Thioepoxidated Single Wall Carbon Nanotubes. *Chemical Physics Letters*, v.: 460, p.: 486 - 491, 2008

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00092614 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda

<http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2008.06.031>

Es el primer artículo sobre nanotubos de carbono que publica la UDELAR en su historia. The corresponding author is Dr. Pablo A. Denis



Completo

DENIS, P.A.

Methane adsorption inside and outside pristine and N-doped Single Wall Carbon Nanotubes. *Chemical Physics*, v.: 353, p.: 79 - 86, 2008

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 03010104 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda

DOI information: 10.1016/j.chemphys.2008.07.024



Completo

DENIS, P.A.

Theoretical Investigation of Nitrogen Disubstituted Corannulenes. *Journal of Molecular Structure Theochem*, v.: 865, p.: 8 - 13, 2008

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología, Química Orgánica

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 01661280 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda



Completo

DENIS, P.A.; F.R. ORNELLAS

Spin contamination in XOO radicals X = F, Cl, Br, HO: how is the investigation of the HOOO radical affected. *Chemical Physics Letters*, v.: 464, p.: 150 - 154, 2008

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Coupled Cluster Theory, Química Atmosférica

*Medio de divulgación:* Papel ; Lugar de publicación: In Press ; ISSN: 00092614

<http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2008.09.025>

The corresponding author is Pablo A. Denis.



Completo

DENIS, P.A.

Theoretical Characterization of the HSOH, H<sub>2</sub>SO and H<sub>2</sub>OS isomers. *Molecular Physics*, v.: 106, p.: 2557 - 2567, 2008

*Palabras clave:* correlation consistent basis thermochemistry

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica Química Atmosférica

*Medio de divulgación:* Papel ; Lugar de publicación: Inglaterra ; ISSN: 00268976



Completo

DENIS, P.A.; BALASUBRAMANIAN K.

Multireference configuration interaction study of the electronic states of ZrC.. Journal of Chemical Physics, v.: 124, p.: 174312, 2006

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /

Química Teórica, Espectroscopía

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Estados Unidos ; *ISSN:* 00219606 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

Theoretical characterization of the thiosulfene radical, HS<sub>2</sub>.. Chemical Physics Letters, v.: 422, p.: 434 - 438, 2006

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /

Química Teórica Química Atmosférica

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Holanda ; *ISSN:* 00092614 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Holanda

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

Thermochemistry of the hypobromous and hypochlorous acids, HOBr and HOCl.. Journal of Physical Chemistry A, v.: 110, p.: 5887 - 5892, 2006

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica Química Atmosférica

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Estados Unidos ; *ISSN:* 10895639 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

<http://pubs.acs.org/journals/jpcafh/index.html>



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; BALASUBRAMANIAN K.

Spectroscopic Constants and Potential Energy Curves of Gallium Nitride (GaN) and ions: GaN<sup>+</sup> and GaN<sup>-</sup>. Chemical Physics Letters, v.: 423, p.: 247 - 253, 2006

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Main Group Chemistry

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 00092614 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Holanda

<http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2006.03.075>



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; BALASUBRAMANIAN K.

Electronic states and potential energy curves of molybdenum carbide, MoC and its ions.. Journal of Chemical Physics, v.: 125, p.: 303626, 2006

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Espectroscopía

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 00219606 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; BALASUBRAMANIAN K.

Theoretical characterization of the low-lying excited states of NbC.. Journal of Chemical Physics, v.: 123, p.: 054318, 2005

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Espectroscopía

*Medio de divulgación:* Internet ; *Lugar de publicación:* USA ; *ISSN:* 00219606 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

The enthalpy of formation of the HSO radical, revisited.. Chemical Physics Letters, v.: 402, p.: 289 - 293, 2005

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Química Atmosférica

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 00092614 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Holanda

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>



SCOPUS

## Sistema Nacional de Investigadores

Completo

DENIS, P.A.

Basis sets requirements for sulfur compounds in density functional theory: a comparison between correlations consistent basis sets, polarized consistent basis sets and Pople type basis sets.. Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 1, p.: 900 - 907, 2005

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Density Functional Theory, Benchmark Calculations

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 15499618 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

<http://pubs.acs.org/journals/jctcce/index.html>



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

Systematic Coupled cluster, Brueckner coupled cluster, G3, CBS-QB3 and DFT Investigation of SX diatomics X= First or Second Row Atom.. Journal of Physical Chemistry A, v.: 108, p.: 11092 - 11100, 2004

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Coupled Clusters, Benchmark Calculations

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 10895639 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

<http://pubs.acs.org/journals/jpcafh/index.html>



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

## Sistema Nacional de Investigadores

On the Performance of CCSD(T) and CCSDT in the study of molecules with multiconfigurational character: halogen oxides, HSO, BN and O3.. Chemical Physics Letters, v.: 395, p.: 12 - 20, 2004

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Coupled Clusters, Benchmark Calculations

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 00092614 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Holanda

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>



SCOPUS



Completo

DENIS, P.A.; VENTURA, O.N.; MAI, H.T.; NGUYEN, M.T.

Ab initio and Density functional study of thionitroso XNS, and thiazyl isomers XSN, X=H, F, Cl, Br, OH, SH, NH<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>, CF<sub>3</sub>, and SiF<sub>3</sub>.  
Journal of Physical Chemistry A, v.: 108, p.: 5073 - 5080, 2004

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Coupled Clusters, Química del Azufre

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 10895639 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

<http://pubs.acs.org/journals/jpcafh/index.html>

The corresponding author is Dr. Pablo A. Denis



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; VENTURA, O.N.

CCSDT study of the FOO radical. Chemical Physics Letters, v.: 385, p.: 292 - 297, 2004

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Coupled Clusters, Química Atmosférica

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00092614 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Holanda

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>

The corresponding author is Dr. Pablo A. Denis



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

High order correlation effects in the calculation of enthalpies of formation of sulfur compounds, CCSD(T) vs CCSDT. Chemical Physics Letters, v.: 382, p.: 65 - 70, 2003

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Coupled Clusters

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00092614 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Holanda

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; VENTURA, O.N.; LE, H.T.; NGUYEN, M.T.

Density functional study of the decomposition pathways of nitroethane and 2-nitropropane. Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 5, p.: 1730 - 1738, 2003

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Química Orgánica

*Medio de divulgación:* Internet ; ISSN: 14639076 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Inglaterra

<http://www.rsc.org/Publishing/Journals/CP/index.asp>



SCOPUS

Completo

VENTURA, O.N.; KIENINGER, M.; DENIS, P.A.

Density functional computational thermochemistry: Determination of the enthalpy of formation of the methanethial-S,S-dioxide, (sulfene)..  
Journal of Physical Chemistry A, v.: 107, p.: 518 - 521, 2003

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Química Atmosférica

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 10895639 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

<http://pubs.acs.org/journals/jpcafh/index.html>



SCOPUS

Sistema Nacional de Investigadores

Sistema Nacional de Investigadores



Completo

DENIS, P.A.; KIENINGER, M.; VENTURA, O.N.; CACHAU, R.E.; DIERCKSEN, G. H.

Complete basis set and density functional determination of the enthalpy of formation of the controversial HO<sub>3</sub> radical: a discrepancy between experiment and theory. *Chemical Physics Letters*, v.: 365, p.: 440 - 449, 2002

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Química Atmosférica

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00092614 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>



Completo

VENTURA, O.N.; KIENINGER, M.; DENIS, P.A.; CACHAU, R.E.

Density functional computational thermochemistry: solving the discrepancy between MO and DFT calculations on the enthalpy of formation of sulfine, CH<sub>2</sub>SO.. *Chemical Physics Letters*, v.: 355, p.: 207 - 213, 2002

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Química Atmosférica

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00092614 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>



Sistema Nacional de Investigadores

Completo

DENIS, P.A.; VENTURA, O.N.; CACHAU, R.E.; KIENINGER, M.

Density functional computational thermochemistry. Isomerization of sulfine and its enthalpy of formation. *Journal of Physical Chemistry A*, v.: 105, p.: 9912 - 9916, 2001

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Química Atmosférica

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 10895639 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos

<http://pubs.acs.org/journals/jpcafh/index.html>



Completo

DENIS, P.A.; VENTURA, O.N.

Density functional investigation of atmospheric sulfur Chemistry II. The heat of formation of the XSO<sub>2</sub> radicals, X=H, CH<sub>3</sub>. . *Chemical Physics Letters*, v.: 344, p.: 221 - 228, 2001

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Química Atmosférica

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00092614 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>



Completo

DENIS, P.A.; VENTURA, O.N.

Hydroxamic Chelates of Boric acid: a density functional study.. *Journal of Molecular Structure Theochem*, v.: 537, p.: 173 - 180, 2001

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Química Inorgánica

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 01661280 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>



Sistema Nacional de Investigadores

Completo

DENIS, P.A.; VENTURA, O.N.

Density Functional Investigation of atmospheric sulfur Chemistry I. The heat of formation of the HSO radical and its isomer SOH..

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 80, p.: 439 - 453, 2000

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Atmosférica

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00207608 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos

<http://www3.interscience.wiley.com/journal/73501020/abstract>



SCOPUS

## Artículos aceptados

### Capitulos de Libro

Capítulo de libro publicado

DENIS, P.A.

Covalently functionalized graphene. , 2016

Libro: Carbon nanomaterials sourcebook. v.: 1, p.: 89 - 106,

Organizadores: Klaus Sattler

Editorial: CRC Press , Miami

Palabras clave: nanotecnología

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

Medio de divulgación: Papel;

<https://www.crcpress.com/Carbon-Nanomaterials-Sourcebook-Graphene-Fullerenes-Nanotubes-and-Nanodiamonds/Sattler/9781482252682>

Capítulo de libro publicado

R. FACCIO; FERNANDEZ-WERNER, L.; H. PARDO; GOYENOLA, C; DENIS, P.A.; MOMBROU, A.W.

Mechanical and Electronic Properties of Graphene Nanostructures , 2011

Libro: Mechanical and Electronic Properties of Graphene Nanostructures. v.: 17, p.: 349 - 366,

Organizadores: Sergey Mikhailov

Editorial: Intech

Palabras clave: nanotecnología, graphene, DFT

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

Medio de divulgación: Internet; ISSN/ISBN: 9789533071527;

<http://www.intechopen.com/articles/show/title/mechanical-and-electronic-properties-of-graphene-nanostructures>

## Evaluaciones

Evaluación de Proyectos

2013 / 2013

Institución financiadora: Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica - ANPCyT

Cantidad: Menos de 5

Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica - ANPCyT

Evaluación de Proyectos

2013 / 2013

Institución financiadora: ACS Petroleum Research Fund

Cantidad: Menos de 5

ACS Petroleum Research Fund

Evaluación de Proyectos

2011 / 2011

*Institución financiadora:* National Science Foundation (United States)

*Cantidad:* Menos de 5

National Science Foundation (United States) , Estados Unidos

Evaluación de Proyectos

2011 / 2011

*Institución financiadora:* CONICYT-CHILE

*Cantidad:* Menos de 5

CONICYT-CHILE , Chile

Evaluacion de proyecto sobre nanotecnologia

Evaluación de Proyectos

2007 / 2008

*Institución financiadora:* Universidad Nacional de Colombia, Sistema Hermes

*Cantidad:* Menos de 5

Universidad Nacional de Colombia, Sistema Hermes , Colombia

Evaluación de Publicaciones

2017

*Nombre:* Macromolecular Chemistry and Physics,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2015 / 2015

*Nombre:* Advances in Materials Science and Engineering ,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2015 / 2015

*Nombre:* Chemical Communications,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2015 / 2016

*Nombre:* Materials Chemistry and Physics,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2015 / 2016

*Nombre:* Journal of Nanostructure in Chemistry,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2015 / 2016

*Nombre:* Polycyclic Aromatic Compounds,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Sistema Nacional de Investigadores

Sistema Nacional de Investigadores

Evaluación de Publicaciones

2014 / 2014

*Nombre:* Carbon,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2014 / 2014

*Nombre:* New Journal of Chemistry,

*Cantidad:* Menos de 5

reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2014 / 2014

*Nombre:* Chemistry of Materials,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitaicion

Evaluación de Publicaciones

2014 / 2015

*Nombre:* Applied Surface Science,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2014 / 2015

*Nombre:* Scientific Reports,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por Invitacion

Evaluación de Publicaciones

2013 / 2014

*Nombre:* Advanced Materials,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2013 / 2014

*Nombre:* Physica E,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2013 / 2014

*Nombre:* Materials Science in Semiconductor Processing,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2013 / 2014

*Nombre:* Journal of Physical Chemistry Letters,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitación

Sistema Nacional de Investigadores

Sistema Nacional de Investigadores

Evaluación de Publicaciones

2013 / 2015

*Nombre:* RSA Advances,

*Cantidad:* Menos de 5

Editor Asociado y Reviewer

Evaluación de Publicaciones

2013 / 2014

*Nombre:* Nanoscale,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2013 / 2014

*Nombre:* Advanced Functional Materials,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2012 / 2014

*Nombre:* ADVANCED ENERGY MATERIALS,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2012 / 2014

*Nombre:* International Journal of Quantum Chemistry,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2012 / 2014

*Nombre:* Computational Materials Science,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2012 / 2014

*Nombre:* Dataset Papers in Physical Chemistry,

*Cantidad:* Menos de 5

Miembro de la Editorial Board desde 2012

Evaluación de Publicaciones

2012 / 2014

*Nombre:* ACS Macro Letters,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviwer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2012 / 2014

*Nombre:* Nanoscience and Nanotechnology Letters,

*Cantidad:* Menos de 5

Referee por invitacion

Sistema Nacional de Investigadores

Sistema Nacional de Investigadores

Evaluación de Publicaciones

2012 / 2014

*Nombre:* Journal of Molecular Structure,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2012 / 2014

*Nombre:* INNOTEC,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluador del open journal publicado por el LATU

Evaluación de Publicaciones

2012 / 2014

*Nombre:* physica status solidi (b),

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2012 / 2014

*Nombre:* Chemistry: A European Journal,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2012 / 2014

*Nombre:* Molecular Physics,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2012 / 2014

*Nombre:* Surface Science,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2012 / 2014

*Nombre:* Small,

*Cantidad:* Menos de 5

reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2011 / 2014

*Nombre:* Journal of Physical Organic Chemistry,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2011 / 2014

*Nombre:* Computational and Theoretical Chemistry,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2011 / 2014

*Nombre:* Chemical Physics,

*Cantidad:* Menos de 5

Elegido como outstanding reviewer

Sistema Nacional de Investigadores

Sistema Nacional de Investigadores

Evaluación de Publicaciones

2011 / 2014

*Nombre:* Journal of Cluster Science,

*Cantidad:* Menos de 5

Reviewer por invitacion

Evaluación de Publicaciones

2010 / 2014

*Nombre:* Physical Chemistry Chemical Physics,

*Cantidad:* De 5 a 20

Evaluación de Publicaciones

2010 / 2014

*Nombre:* Current Physical Chemistry,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2010 / 2014

*Nombre:* Journal of Computational Chemistry,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2010 / 2014

*Nombre:* ACS Applied Materials & Interfaces,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2010 / 2014

*Nombre:* Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2010 / 2014

*Nombre:* International Journal of Hydrogen Energy,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2010 / 2014

*Nombre:* Theoretical Chemistry Accounts,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2009 / 2014

*Nombre:* European Journal of Lipid Science and Technology,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2009 / 2014

*Nombre:* Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2009 / 2014

*Nombre:* Journal of Materials Science,

*Cantidad:* Menos de 5

Sistema Nacional de Investigadores

Sistema Nacional de Investigadores



Evaluación de Publicaciones

2009 / 2014

*Nombre:* Journal of Chemical Physics,

*Cantidad:* De 5 a 20

Evaluación de Publicaciones

2009 / 2014

*Nombre:* ACSNANO,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2009 / 2014

*Nombre:* Journal of the American Chemical Society,

*Cantidad:* De 5 a 20

Evaluación de Publicaciones

2008 / 2014

*Nombre:* Journal of Physical Chemistry B,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2007 / 2014

*Nombre:* Journal of Physical Chemistry C,

*Cantidad:* De 5 a 20

El Journal se creo en el año 2007

Evaluación de Publicaciones

2007 / 2014

*Nombre:* Journal of Sulfur Chemistry,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2006 / 2014

*Nombre:* Chemical Physics Letters,

*Cantidad:* Menos de 5

Elegido como outstanding reviewer

Evaluación de Publicaciones

2005 / 2014

*Nombre:* Journal of Physical Chemistry A,

*Cantidad:* De 5 a 20

Evaluación de Publicaciones

2005 / 2014

*Nombre:* Journal of Organic Chemistry,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2005 / 2014

*Nombre:* Organic Letters ,

*Cantidad:* Menos de 5

## Formación de RRHH

Tutorías concluidas

Posgrado

Tesis de doctorado

RELACIÓN ESTRUCTURA-ACTIVIDAD DE POLIFENOLES: DESARROLLO Y APLICACIÓN DE TÉCNICAS DE FARMACOLOGIA MOLECULAR Y ESTUDIOS DE UNION A BLANCOS INVOLUCRADOS EN LOS MECANISMOS DE ACCION , 2012

*Tipo de orientación:* Cotutor en pie de igualdad

*Nombre del orientado:* Elena Alvareda

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química

*Palabras clave:* Química Teórica

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / química computacional

*Medio de divulgación:* Papel, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Se ha defendido exitosamente en Diciembre de 2016.

## Tutorías en marcha

### Otras

Iniciación a la investigación

Desarrollo de nanoestructuras derivadas del grafeno para almacenar hidrógeno , 2013

*Nombre del orientado:* Claudia Pereyra

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* Energía

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

*Medio de divulgación:* Papel, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* La estudiante Claudia Pereyra ha sido contratada en el Proyecto FSE financiado por ANII. El objetivo consiste en iniciar a la Sra Pereyra en la nanotecnología computacional. En la actualidad cursa 4to año de ingeniería química.

## Otros datos relevantes

### Premios y títulos

2001 Beca Pedeciba de Doctorado 2001-2004 Pedeciba

1999 Beca Pedeciba de Maestría 1999-2000 Pedeciba

2002 Científico invitado en la Universidad de Leuven Universidad de Leuven

2005 Científico Invitado en Lawrence Livermore National Laboratory University of California, Lawrence Livermore National Laboratory

2005 Post-Doc University of California, Davis University of California, Davis

2005 Datos obtenidos por el investigador son seleccionados para ser incluidos en el CRC Handbook of Physics and Chemistry CRC Press

1999 Científico Invitado Advanced Biomedical Supercomputer Center, Frederick, Maryland, USA. National Institute of Health

2008 Invitación para escribir un artículo Review in el Journal of Sulfur Chemistry. Special Issue, Extreme Sulfur Chemistry Taylor and Francis publisher group

2008 Seleccionado para la Edición 2009 del Libro Who is Who in the World Marquis Who is Who

2008 Miembro de la American Chemical Society por invitación. American Chemical Society

2009 Nivel I en el Sistema Nacional de Investigadores ANII

2009 Artículo Hydrogenated Double Wall Carbon Nanotubes seleccionado para destacarse en Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology American Physical Society and American Institute of Physics

2009 Miembro elegido para Innovation Explorers del consorcio Editorial Elsevier, Total de miembros en el mundo: 300 científicos Elsevier

2009 Seleccionado para la Edición 2010 del libro Who is Who (Internacional) Marquis Who is Who

2009 Premio Caldeyro-Barcia en Química 2009, único ganador (Nacional) Pedeciba

Este premio es otorgado cada 5 años por el Pedeciba. Fui el único ganador, es decir no fue compartido y tampoco hubieron menciones especiales para otros postulantes

2009 Artículo: Mechanical Properties of graphene nanoribbons entre los más bajados durante el 2009 en el Journal of Physics Condensed Matter. (Internacional) Institute of Physics (iop)

Durante el año 2009 se seleccionaron los artículos más bajados del sitio web de la revista.

2010 Artículo On the hydrogen addition to graphene entre los 3 más bajados del Journal of Molecular Structure:THEOCHEM (Internacional) Journal of Molecular Structure: THEOCHEM

El sitio web de la revista lista los artículos con mas downloads durante 2010. El nuestro figuro en tercer puesto

2010 Investigador Grado 3 del PEDECIBA-QUIMICA (Nacional) PEDECIBA

Ingresa al programa en el año 2005 como investigador grado 3

2010 Seleccionado para la Edición 2011 del libro Who is Who in Science and Engineering (Internacional) Who is Who se seleccionan los mejores científicos del mundo.

2011 El artículo Density functional investigation of thiolated graphene es seleccionado para el volumen virtual del Journal of Physical Chemistry C sobre funcionalización de grafeno. (Internacional) American Chemical Society/Journal of Physical Chemistry

Los Journals: Journal of Physical Chemistry A,B,C Letters seleccionaron los mejores artículos sobre funcionalización de grafeno y crearon un volumen virtual. EL nuestro fue seleccionado entre los mejores.

2014 Distinguido como outstanding reviewer para el journal Chemical Physics (Internacional) Elsevier Reconocimiento otorgado por la calidad y cantidad de reviews realizadas

2014 Distinguido como outstanding reviewer para el journal Chemical Physics Letters (Internacional) Elsevier Reconocimiento otorgado por la calidad y cantidad de reviews realizadas

2015 Editor Asociado para la revista RSC Advances (Internacional) Royal Society of Chemistry

2016 Fellow of the Royal Society of Chemistry (Internacional) Royal Society of Chemistry

Invitado a ser FRSC por mis contribuciones científicas. Merito compartido solo con 2 químicos uruguayos.

## Jurado/Integrante de comisiones evaluadoras de trabajos académicos

Otros tipos

*Candidato:* Shishan Zhang

DENIS, P.A.

Recomendación científica del Dr. Shishan Zhang para su residencia permanente en USA , 2008

Otra participación (Aplicación de Residencia permanente en Estados Unidos)

*Referencias adicionales:* Estados Unidos , Inglés

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

Otros tipos

*Candidato:* Nick Wang

DENIS, P.A.

Recomendación del Dr. Nick Wang para su residencia permanente en Estados Unidos , 2006

Otra participación (Aplicación de Residencia permanente en Estados Unidos)

*Referencias adicionales:* Estados Unidos , Inglés

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / nanotecnología

## Presentaciones en eventos

Congreso

A theoretical model for bulk crystalline magnetic carbon , 2006

*Tipo de participación:* Otros,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Congreso iberoamericano de sensores;

*Palabras clave:* Química Teórica

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología Computacional

Congreso

Structure-activity relationships of trypanocide o-naphthoquinones , 2005

*Tipo de participación:* Otros,

*Referencias adicionales:* Irlanda; *Nombre del evento:* MGMS, Annual international Meeting 2005, Membranes and Membranes Proteins;

*Palabras clave:* Química Teórica

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

Congreso

Anti-TRypanosoma cruzi activity of green tea (Camellia sinensis catechins. Structure Activity Relationships , 2004

*Tipo de participación:* Otros,

*Referencias adicionales:* Rusia; *Nombre del evento:* Advances in Synthetic Combinatorial and Medicinal Chemistry Symposium 2004;

*Palabras clave:* Química Teórica

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

Congreso

Theoretical Investigation of the HOOO radical , 2002

*Tipo de participación:* Expositor,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* XXVIII Congreso de Químicos teóricos de Experiencia Latina 2002;

*Palabras clave:* Química Teórica

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

Congreso

Density functional sulfur thermochemistry , 2000

*Tipo de participación:* Expositor,

*Referencias adicionales:* Francia; *Nombre del evento:* International Congress of Quantum Chemistry;

*Palabras clave:* Química Teórica

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

Congreso

Analysis of two reaction paths for the production of FO , 2000

*Tipo de participación:* Expositor,

*Referencias adicionales:* Francia; *Nombre del evento:* Density Functional Theory 2000;

*Palabras clave:* Química Teórica

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

Congreso

Theoretical Investigation of Asymmetrical Sulfides , 1999

*Tipo de participación:* Expositor,

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* I Congreso de Físicoquímica del Mercosur, 1999, Santa Fe, Argentina 1999.;

*Nombre de la institución promotora:* Universidad de Santa Fe

*Palabras clave:* Química Teórica

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

Congreso

Density functional Investigation of the HSO radical and its isomer SOH , 1999

*Tipo de participación:* Expositor,

*Referencias adicionales:* México; *Nombre del evento:* IIIth Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics;

*Palabras clave:* Química Teórica

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

Congreso

Theoretical Investigation of the chlorination of dimethyl sulfide , 1998

*Tipo de participación:* Expositor,

*Referencias adicionales:* Estados Unidos; *Nombre del evento:* 5th Electronic Computational Chemistry Conference Internet;

*Palabras clave:* Química Teórica

## Indicadores de producción

<i>Producción bibliográfica</i>	116
<i>Artículos publicados en revistas científicas</i>	114
Completo (Arbitrada)	114
<i>Artículos aceptados para publicación en revistas científicas</i>	0
<i>Trabajos en eventos</i>	0
<i>Libros y capítulos de libros publicados</i>	2

Capítulo de libro publicado	2
<i>Textos en periódicos</i>	0
<i>Documentos de trabajo</i>	0
<i>Producción técnica</i>	0
<i>Productos tecnológicos</i>	0
<i>Procesos o técnicas</i>	0
<i>Trabajos técnicos</i>	0
<i>Otros tipos</i>	0
<i>Evaluaciones</i>	60
Evaluación de Proyectos	5
Evaluación de Publicaciones	55
<i>Formación de RRHH</i>	2
<i>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas</i>	1
Tesis de doctorado	1
<i>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha</i>	1
Iniciación a la investigación	1

## Sistema Nacional de Investigadores

## Sistema Nacional de Investigadores