

Curriculum Vitae

Pablo Andrés DENIS MARINONI

Actualizado: 18/10/2017



Publicado: 18/10/2017

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/m³ (densidad volumétrica) y una energía de adsorción de 15 kJ/mol por molécula de H₂. 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.

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

Sistema Nacional de Investigadores

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>



Completo

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

Triple Doped Monolayer Graphene with Boron, Nitrogen, Aluminum, Silicon, Phosphorus and Sulfur. *ChemPhysChem*, v.: 18 18 14, p.: 1864 - 1873, 2017

Palabras clave: nanotecnología

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.201700278/full>

The corresponding author is Pablo A. Denis



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



Completo

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

An effective tridentate 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



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



Completo

DENIS, P.A.

Diels-Alder Reactions onto Fluorinated and Hydrogenated Graphene. *Chemical Physics Letters*, v.: 684, p.: 79 - 85, 2017

Palabras clave: nanotecnología

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

ISSN: 00092614



Completo

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

Beryllium doped graphene as an efficient anode material for Lithium-Ion batteries with significantly huge capacity: A DFT study . *Applied Materials Today*, v.: 9, p.: 333 - 340, 2017

Palabras clave: nanotecnología

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

ISSN: 23529407

<http://dx.doi.org/10.1016/j.apmt.2017.08.013>

Completo

DENIS, P.A.

Are [6+4] Cycloadditions onto Graphene Possible?. *Chemistry Select*, v.: 2, p.: 9620 - 9623, 2017

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

ISSN: 23656549

Completo

DENIS, P.A.

Band Gap Opening in Bilayer Graphene by the Simultaneous Adsorption of Electron Donating and Electron Acceptor Molecules.. *Computational and Theoretical Chemistry*, v.: 1120, p.: 96 - 101, 2017

Palabras clave: nanotecnología

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

ISSN: 2210271X

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210271X17304437>



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



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

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

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

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.

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.

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.; 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



Sistema Nacional de Investigadores

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.

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



SCOPUS

Sistema Nacional de Investigadores

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]uril 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 Sistema Nacional de Investigadores

Completo

DENIS, P.A.

Pristine Graphene Based Catalysis: Significant Reduction of the Inversion Barriers of Adsorbed and Confined Corannulene, Cumanene and Dibenzo[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



SCOPUS

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



SCOPUS

Sistema Nacional de Investigadores

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



SCOPUS

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.

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

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

ISSN: 00268976

Sistema Nacional de Investigadores

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



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

Areas 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



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

Areas 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



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

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00092614

Completo

DENIS, P.A.; C. PEREYRA HUELMO

New Trends Along Hydrogen Polyoxides: Unusually Long Oxygen-Oxygen Bonds in H₂O₆ and H₂O₇.. *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 C₆₀ or larger than C₇₀ . *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.

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.

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

Areas 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



SCOPUS



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



SCOPUS

Sistema Nacional de Investigadores

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

Completo

DENIS, P.A.

Theoretical characterization of hydrogen pentoxide, H₂O₅. 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

Sistema Nacional de Investigadores

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



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



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, p.: 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



SCOPUS

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



SCOPUS Sistema Nacional de Investigadores

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

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / química inorganica

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 19295030

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

Areas 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

Areas 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

Areas 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

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

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 10895639

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



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.; 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



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.; 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

Areas 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.

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>



SCOPUS

Sistema Nacional de Investigadores

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

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

ISSN: 19327447



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

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

Areas 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

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.2011.09.058>



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 Coputacional

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

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 Coputacional

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00222461

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

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



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.

Sistema Nacional de Investigadores

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



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

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.2010.04.038>



Completo

DENIS, P.A.

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



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

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

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: quimica atmosferica, espectroscopia

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

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 Atmosferica, termoquímica

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

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

The corresponding author is Pablo A. Denis

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

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

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

The corresponding author is Pablo A. Denis

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

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

Medio de divulgación: Papel ; *ISSN:* 19327447

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.; IRIBARNE, F

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

Palabras clave: nanotecnología, DFT, grafeno

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 01661280

The corresponding author is Pablo A. Denis



SCOPUS

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



SCOPUS

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 Inorgánica, Complejos, DFT

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 03009246

Completo

R. FACCIO; H. PARDO; DENIS, P.A.; R. YOSHIKAWA OEIRAS; F. M. ARAÚJO-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 H₂ Physisorption on Corannulene (C₂₀H₁₀), Tetraindenocorannulene (C₄₄H₁₈), Pentaindenocorannulene (C₅₀H₂₀), C₆₀, 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 invitación para la edición 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.



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.

Theoretical Characterization of the HSOH, H₂SO and H₂OS 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



SCOPUS Sistema Nacional de Investigadores

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

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, HS₂.. *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

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 Sistema Nacional de Investigadores

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⁺ and GaN⁻. *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

Sistema Nacional de Investigadores

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

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>

Completo

DENIS, P.A.

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

Áreas 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>

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, NH₂, CH₃, CF₃, and SiF₃. Journal of Physical Chemistry A, v.: 108, p.: 5073 - 5080, 2004

Áreas 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/jpcath/index.html>

The corresponding author is Dr. Pablo A. Denis

Completo

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

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

Áreas 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

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

Áreas 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>

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

Áreas 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>

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

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 HO3 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>



SCOPUS

Sistema Nacional de Investigadores

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, CH2SO.. 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>



SCOPUS

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>



SCOPUS

Completo

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

Density functional investigation of atmospheric sulfur Chemistry II. The heat of formation of the XSO2 radicals, X=H, CH3. . 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>



SCOPUS

Sistema Nacional de Investigadores

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>



SCOPUS

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

Sistema Nacional de Investigadores

Artículos aceptados

Capítulos 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.; MOMBRU, 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

2016 / 2017

Nombre: ACS Catalysis,

Cantidad: Menos de 5

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

Sistema Nacional de Investigadores

Sistema Nacional de Investigadores

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

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

Sistema Nacional de Investigadores

Sistema Nacional de Investigadores

Evaluación de Publicaciones

2013 / 2014

Nombre: Journal of Physical Chemistry Letters,

Cantidad: Menos de 5

Reviewer por invitación

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

Sistema Nacional de Investigadores

Sistema Nacional de Investigadores

Evaluación de Publicaciones

2012 / 2014

Nombre: Nanoscience and Nanotechnology Letters,

Cantidad: Menos de 5

Referee por invitacion

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

Sistema Nacional de Investigadores

Sistema Nacional de Investigadores

Evaluación de Publicaciones

2011 / 2014

Nombre: Chemical Physics,

Cantidad: Menos de 5

Elegido como outstanding reviewer

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

Sistema Nacional de Investigadores

Sistema Nacional de Investigadores

Evaluación de Publicaciones

2009 / 2014

Nombre: Journal of Materials Science,

Cantidad: Menos de 5

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

Sistema Nacional de Investigadores

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

Sistema Nacional de Investigadores

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

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) Insitute 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 Engenieering (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 Chemsitry A,B,C Letters seleccionaron Iso 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.

2017 Cover Article del Journal ChemPhymChem (Internacional) Wiley

El artículo Triple-Doped Monolayer Graphene with Boron, Nitrogen, Aluminum, Silicon, Phosphorus, and Sulfur fue seleccionado como el mejor del volumen y se presentó en la tapa de la revista así como también se incluyó el autor profile.

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cphc.201700699/full> <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cphc.201700698/full>

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-napthoquinones , 2005

Tipo de participación: Otros,

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

Palabras clave: Química Teórica

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

Congreso

Anty-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

<i>Producción bibliográfica</i>	119
<i>Artículos publicados en revistas científicas</i>	117
Completo (Arbitrada)	117
<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>	61
Evaluación de Proyectos	5
Evaluación de Publicaciones	56
<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