



Jose Carlos Corchado Martín-Romo

Generado desde: Editor CVN de FECYT

Fecha del documento: 22/05/2024

v 1.4.3

6c4721dde90f1d89fdbc6e54ad7fdd7b

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



Resumen libre del currículum

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

Indicadores generales de calidad de la producción científica

- 5 sexenios de Investigación, 1993-1998, 1999-2004, 2005-2010, 2011-2016, 2017-2022.
- Citas totales: 4177.
- Índice h: 38.
- Publicaciones totales en Q1 en los últimos 10 años: 24.

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

- Nacido en 1969, Licenciado en Ciencias en 1992 (22 años) y Doctor en Ciencias Químicas en 1996 (26 años).
- Estancia postdoctoral en la Universidad de Minnesota (EE.UU.) bajo la dirección de Donald G. Truhlar en los años 1997 y 1998 gracias a una beca MEC-Comisión Fulbright.
- Tras disfrutar de un contrato de reincorporación de doctores y tecnólogos entre los años 1999 y 2001, en el año 2002 obtuve la plaza de Profesor Titular de Universidad en el área de Química Física. Desde su constitución en el año 2014, soy miembro del Instituto de Computación Científica Avanzada de la Universidad de Extremadura (ICCAEx).
- He obtenido cuatro sexenios de investigación y cuatro quinquenios de docencia, además de evaluación positiva en los complementos autonómicos de docencia e investigación.
- Autor de 119 artículos publicados en revistas científicas internacionales, 2 capítulos de libros, y varios programas de Química Computacional ampliamente empleados por la comunidad científica internacional, entre los que destaca mi participación en el programa Polyrate distribuido por la Universidad de Minnesota
- Los trabajos de investigación, aunque siempre dentro de la Química Teórica y Computacional, se han desarrollado en diversas líneas, en colaboración con numerosos investigadores nacionales e internacionales, que van desde el desarrollo de métodos teóricos en química computacional, a la simulación de procesos orgánicos y bioquímicos, pasando por estudios termodinámicos, química de procesos atmosféricos y de combustión, fotoquímica, astroquímica, efectos del disolvente, y cinética y dinámica de reacciones elementales.
- Alta valoración por la comunidad científica: Índice h: 38, con un promedio de aproximadamente 40 citas por artículo. 12 artículos superan las 100 citas y 3 las 200. Puntuación 2077 (percentil 96%) en el portal Research Gate.



Indicadores generales de calidad de la producción científica

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

Fecha: 13/04/2024

119 publicaciones

4711 citas (4273 sin autocitas)

H-index: 39

Fuentes: Web of Science



Jose Carlos Corchado Martín-Romo

Apellidos: **Corchado Martín-Romo**
Nombre: **Jose Carlos**
DNI: **08848933M**
ORCID: **0000-0002-8463-3168**
ScopusID: **7006360840**
ResearcherID: **H-6053-2015**
Fecha de nacimiento: **06/11/1969**
Sexo: **Hombre**
Nacionalidad: **España**
País de nacimiento: **España**
C. Autón./Reg. de nacimiento: **Extremadura**
Provincia de contacto: **Badajoz**
Ciudad de nacimiento: **Badajoz**
Dirección de contacto: **Edificio Viguera Lobo, Facultad de Ciencias**
Resto de dirección contacto: **Avenida de Elvas S/N**
Código postal: **06006**
País de contacto: **España**
C. Autón./Reg. de contacto: **Extremadura**
Ciudad de contacto: **Badajoz**
Teléfono fijo: **(+34) 924289787**
Correo electrónico: **corchado@unex.es**
Teléfono móvil: **(+34) 646796939**

Situación profesional actual

Entidad empleadora: Universidad de Extremadura
Departamento: Ingeniería Química y Química Física, Facultad de Ciencias
Categoría profesional: Profesor Titular de Universidad
Teléfono: (+34) 924289787 **Correo electrónico:** corchado@unex.es
Fecha de inicio: 15/01/2002
Modalidad de contrato: Funcionario/a **Régimen de dedicación:** Tiempo completo
Primaria (Cód. Unesco): 230700 - Química física
Funciones desempeñadas: Docencia e Investigación en el Área de Química Física
Identificar palabras clave: Química física



Formación académica recibida

Titulación universitaria

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

Titulación universitaria: Titulado Superior

Nombre del título: Licenciado en Ciencias

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

Fecha de titulación: 1992

Doctorados

Programa de doctorado: Doctor en Ciencias

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

Fecha de titulación: 14/01/1996

Conocimiento de idiomas

Idioma	Comprensión auditiva	Comprensión de lectura	Interacción oral	Expresión oral	Expresión escrita
Inglés	B2	B2	B2	B2	B2

Experiencia científica y tecnológica

Actividad científica o tecnológica

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

- Nombre del proyecto:** Computación avanzada en física de los sistemas complejos, química teórica y modelos estocásticos

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Investigador/a

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Vicente Garzó Puertos

Nº de investigadores/as: 10

Cód. según financiadora: IB16013

Fecha de inicio-fin: 03/06/2017 - 02/06/2020

Cuantía total: 149.999,3 €

Régimen de dedicación: Tiempo completo



- 2** **Nombre del proyecto:** Microanalizador elemental y macroanalizador elemental
Ámbito geográfico: Nacional
Grado de contribución: Investigador/a
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Carlos Palacios Albarrán
Nº de investigadores/as: 50
Cód. según financiadora: UNEX13-1E-1691
Fecha de inicio-fin: 01/01/2013 - 31/12/2015
Cuantía total: 124.700 €
- 3** **Nombre del proyecto:** Sistema de cromatografía de líquidos de alta resolución acoplado a espectrómetro de masas triple cuadrupolo
Ámbito geográfico: Nacional
Grado de contribución: Investigador/a
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Carlos Palacios Albarrán
Nº de investigadores/as: 50
Cód. según financiadora: UNEX13-1E-1761
Fecha de inicio-fin: 01/01/2013 - 31/12/2015
Cuantía total: 250.000 €
- 4** **Nombre del proyecto:** Sistema de cómputo con un modelo de memoria mixto (compartida/distribuida)
Ámbito geográfico: Nacional
Grado de contribución: Investigador/a
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Vicente Garzó Puertos
Nº de investigadores/as: 29
Cód. según financiadora: UNEX13-1E-1529
Fecha de inicio-fin: 01/01/2013 - 31/12/2015
Cuantía total: 120.000 €
Régimen de dedicación: Tiempo completo
- 5** **Nombre del proyecto:** Sistema de preparación de muestras mediante radiaciones microondas
Ámbito geográfico: Nacional
Grado de contribución: Investigador/a
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Carlos Palacios Albarrán
Nº de investigadores/as: 50
Cód. según financiadora: UNEX13-1E-1637
Fecha de inicio-fin: 01/01/2013 - 31/12/2015
Cuantía total: 71.583 €

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

- 1** **Nombre del proyecto:** Programa Investigo para la contratación de jóvenes investigadores
Grado de contribución: Coordinador del proyecto total, red o consorcio
Entidad/es financiadora/s:
Junta de Extremadura **Tipo de entidad:** Junta de Extremadura
Fecha de inicio: 18/01/2023 **Duración:** 1 año



2 **Nombre del proyecto:** GR21032 Ayuda para el grupo de investigación "Cinética y Dinamica de la Universidad de Extremadura"

Grado de contribución: Investigador/a

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jose Carlos Corchado Martín-Romo

Nº de investigadores/as: 9

Entidad/es financiadora/s:

Junta de Extremadura

Tipo de entidad: Junta de Extremadura

Cód. según financiadora: PPGRU16G7

Fecha de inicio: 01/01/2022

Duración: 1 año

Cuantía total: 21.322,42 €

3 **Nombre del proyecto:** GR18010 Ayuda para el grupo de investigación "Cinética y Dinamica de la Universidad de Extremadura"

Grado de contribución: Investigador/a

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jose Carlos Corchado Martín-Romo

Nº de investigadores/as: 9

Entidad/es financiadora/s:

Junta de Extremadura

Tipo de entidad: Junta de Extremadura

Cód. según financiadora: PPGRU16G7

Fecha de inicio: 01/06/2018

Duración: 3 años - 5 meses - 3 días

Cuantía total: 34.125 €

4 **Nombre del proyecto:** Ayuda del programa propio de la UEx para el grupo de investigación "Cinética y Dinamica de la Universidad de Extremadura"

Grado de contribución: Investigador/a

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Joaquín Espinosa García

Nº de investigadores/as: 9

Cód. según financiadora: PPGRU16G7

Fecha de inicio: 28/10/2017

Duración: 1 año

Cuantía total: 596,31 €

5 **Nombre del proyecto:** Ayuda del programa propio de la UEx para el grupo de investigación "Cinética y Dinamica de la Universidad de Extremadura"

Grado de contribución: Investigador/a

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Joaquín Espinosa García

Nº de investigadores/as: 9

Cód. según financiadora: PPGRU15G7

Fecha de inicio: 01/07/2015

Duración: 1 año

Cuantía total: 305,53 €



Actividades científicas y tecnológicas

Producción científica

Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1 Joaquín Espinosa García; Jose Carlos Corchado Martín-Romo. Global surfaces and reaction path potentials. Applications of the variational transition state theory. Recent Research Development in Physical Chemistry. 1 - 0, pp. 165 - 192. (India): Transworld Research Network, 1997.

Tipo de producción: Capítulo de libro **Tipo de soporte:** Libro

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de capítulo de libro

Publicación relevante: Sí
- 2 Rubén Meana-Pañeda; Jingjing Zheng; Junwei Lucas Bao; Shuxia Zhang; Benjamin J. Lynch; José C. Corchado; Yao-Yuan Chuang; Patton L. Fast; Wei-Ping Hu; Yi-Ping Liu; Gillian C. Lynch; Kiet A. Nguyen; Charles F. Jackels; Antonio Fernández-Ramos; Benjamin A. Ellingson; Vasilios S. Melissas; Jordi Villà; Ivan Rossi; Elena L. Coitiño; Jingzhi Pu; Titus V. Albu; Rui Ming Zhang; Xuefei Xu; Artur Ratkiewicz; Rozeanne Steckler; Bruce C. Garrett; Alan D. Isaacson; Donald G. Truhlar. Polyrate 2023: A computer program for the calculation of chemical reaction rates for polyatomics. New version announcement. Computer Physics Communications. 294, pp. 108933 - 108933. 2024. Disponible en Internet en: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465523002783>>. ISSN 0010-4655

Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 3 Y. Shu; Z. Varga; A. Jasper; J. Espinosa-Garcia; J.C. Corchado; D.G. Truhlar. PotLib 2023: New version of a potential energy surface library for chemical systems. Computer Physics Communications. 294, Elsevier B.V., 2024. Disponible en Internet en: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85173276278&doi=10.1016%2fj.cpc.2023.108937&partnerID=40&md5=31ac26050f0f8e5b2150c4d3186c03fc>>. ISSN 00104655

Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 4 J. García De La Concepción; I. Jiménez-Serra; J.C. Corchado; G. Molpeceres; A. Martínez-Henares; V.M. Rivilla; L. Colzi; J. Martín-Pintado. A sequential acid-base mechanism in the interstellar medium: The emergence of cis-formic acid in dark molecular clouds. Astronomy and Astrophysics. 675, EDP Sciences, 2023. Disponible en Internet en: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85165541682&doi=10.1051%2f0004-6361%2f202243966&partnerID=40&md5=152f1c2900870a3e6e589730cb0>>. ISSN 00046361

Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 5 S. Frutos-Puerto; M.J. Colín; J.C. Corchado; M.L. Sánchez; M.E. Martín; M.A. Aguilar. Photophysical and photochemical properties of 3-hydroxyflavone in ethanol solution: Implicit vs explicit solvent models. Journal of Molecular Liquids. 381, Elsevier B.V., 2023. Disponible en Internet en: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85152226965&doi=10.1016%2fj.molliq.2023.121783&partnerID=40&md5=7dde7cb7648d81ca549030444e88911>>. ISSN 01677322

Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 6 J. Espinosa-Garcia; C. Rangel; J.C. Corchado. Current Status of the X + C₂H₆ [X = H, F(2P), Cl(2P), O(3P), OH] Hydrogen Abstraction Reactions: A Theoretical Review. Molecules. 27, pp. 3773. 2022.

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

Autor de correspondencia: No



- 7** C. Rangel Delgado; J. Espinosa García; J.C. Corchado Martín-Romo. Full-dimensional potential energy surface for the H + CH₃OH reaction. Theoretical kinetics and dynamics study. Physical Chemistry Chemical Physics. 24 - 20, pp. 12501 - 12512. 2022.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: Sí
- 8** J.G. De la Concepción; L. Colzi; I. Jiménez-Serra; G. Molpeceres; J.C. Corchado; V.M. Rivilla; J. Martín-Pintado; M.T. Beltrán; C. Mininni. The trans/cis ratio of formic (HCOOH) and thioformic (HC(O)SH) acids in the interstellar medium. Astronomy and Astrophysics. 658, pp. A150. 2022.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No
- 9** J. Espinosa-Garcia; C. Rangel; M. Garcia-Chamorro; J.C. Corchado. Quasi-classical trajectory study of the CN + NH₃ reaction based on a global potential energy surface. Molecules. 26 - 4, pp. 994. 2021.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No
- 10** J. García De La Concepción; I. Jiménez-Serra; J. Carlos Corchado; V.M. Rivilla; J. Martín-Pintado. The Origin of the E/Z Isomer Ratio of Imines in the Interstellar Medium. Astrophysical Journal Letters. 912 - 1, pp. L6. 2021.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No
- 11** J. Espinosa-Garcia; J.C. Corchado. Theoretical study of the Cl(2P) + SiH₄ reaction: Global potential energy surface and product pair-correlated distributions. Comparison with experiment. Physical Chemistry Chemical Physics. 23 - 37, pp. 21065 - 21077. 2021.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No
- 12** C. Rangel; M. Garcia-Chamorro; J.C. Corchado; J. Espinosa-Garcia. Kinetics and dynamics study of the OH + C₂H₆ → H₂O + C₂H₅ reaction based on an analytical global potential energy surface. Physical Chemistry Chemical Physics. 22 - 26, pp. 14796 - 14810. 2020.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No
- 13** M. Garcia-Chamorro; J.C. Corchado; J. Espinosa-Garcia. Kinetics theoretical study of the O(3P) + C₂H₆ reaction on an ab initio-based global potential energy surface. Theoretical Chemistry Accounts. 139 - 12, pp. 182. 2020.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No
- 14** J. Espinosa-Garcia; M. García-Chamorro; J.C. Corchado. Rethinking the description of water product in polyatomic OH/OD + XH (X ≡ D, Br, NH₂ and GeH₃) reactions: theory/experimental comparison. Theoretical Chemistry Accounts. 139 - 3, pp. 63. 2020.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No
- 15** J. Espinosa-Garcia; C. Rangel; J.C. Corchado; M. Garcia-Chamorro. Theoretical study of the O(3P) + C₂H₆ reaction based on a new: Ab initio -based global potential energy surface. Physical Chemistry Chemical Physics. 22 - 39, pp. 22591 - 22601. 2020.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 16** J. Espinosa-García; M. García-Chamorro; J.C. Corchado; S. Bhowmick; Y.V. Suleimanov. VTST and RPMD kinetics study of the nine-body $X + C_2H_6$ ($X \equiv H, Cl, F$) reactions based on analytical potential energy surfaces. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 22 - 24, pp. 13790 - 13801. 2020.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 17** Joaquín Espinosa García; Jose Carlos Corchado Martín-Romo. The hydrogen abstraction reaction $H + C_2H_6 \rightarrow H_2(v,j) + C_2H_5$. Part I. A full-dimensional analytical potential energy surface based on ab initio calculations. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 21, pp. 13356 - 13367. RSC, 04/06/2019.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: Sí
- 18** Joaquín Espinosa García; Moisés García Chamorro; Jose Carlos Corchado Martín-Romo. The hydrogen abstraction reaction $H + C_2H_6 \rightarrow H_2(v,j) + C_2H_5$. Part II. Theoretical kinetics and dynamics study. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 21, pp. 13347 - 13355. RSC, 30/05/2019.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: Sí
- 19** J. Espinosa-García; J. Calle-Cancho; J.C. Corchado. QCT study of the vibrational and translational role in the $H + C_2H_6$ (v_1, v_2, v_5, v_7, v_9 and v_{10}) reactions. *Theoretical Chemistry Accounts*. 138 - 10, pp. 116. 2019.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No
- 20** J.C. Corchado; M.G. Chamorro; C. Rangel; J. Espinosa-García. State-to-state dynamics of the $Cl(2P) + C_2H_6$ ($v_5, v_1 = 0, 1$) $\rightarrow HCl(v', j') + C_2H_5$ hydrogen abstraction reactions. *Theoretical Chemistry Accounts*. 138 - 2, pp. 26. 2019.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No
- 21** J. Espinosa-García; J.C. Corchado; N.I. Butkovskaya; D.W. Setser. Theoretical and experimental revision of the water bending excitation in the $OH/OD + GeH_4$ reactions. *Theoretical Chemistry Accounts*. 138 - 10, pp. 119. 2019.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No
- 22** Joaquín Espinosa García; Jose Carlos Corchado Martín-Romo; Moisés García Chamorro; Cipriano Rangel Delgado. $F(2P) + C_2H_6 - HF + C_2H_5$ kinetics study based on a new analytical potential energy surface. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 20, pp. 19860 - 19870. RSC, 16/07/2018.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No
- 23** Joaquín Espinosa García; Laurent Bonnet; Jose Carlos Corchado Martín-Romo. Theoretical Study of the Pair-Correlated $F + CHD_3$ ($v = 0, j_1 = 1$) Reaction: Effect of CH Stretching Vibrational Excitation. *Journal of Physical Chemistry A*. 121, pp. 4076 - 4092. American Chemical Society, 01/06/2017.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 3 **Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Nº total de autores: 3 **Autor de correspondencia:** No
- 24** Joaquín Espinosa García; Jose Carlos Corchado Martín-Romo. QCT dynamics study of $OH/OD + GeH_4$ reactions. The problem of water bending excitation. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 19, pp. 1580 - 1589. Royal Society of Chemistry, 14/01/2017.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 2



Nº total de autores: 2

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Autor de correspondencia: No

- 25** J. Espinosa-García; J.C. Corchado. QCT dynamics study of OH/OD + GeH₄ reactions. the problem of water bending excitation. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 19 - 2, pp. 1580 - 1589. 2017. Disponible en Internet en: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85027038542&doi=10.1039%2fc6cp08118e&partnerID=40&md5=e5e833c90c3c792f7d76b750bd31b9a7>>.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No
- 26** J. Espinosa-García; L. Bonnet; J.C. Corchado. Theoretical Study of the Pair-Correlated F + CHD₃($v = 0, v_1 = 1$) Reaction: Effect of CH Stretching Vibrational Excitation. *Journal of Physical Chemistry A*. 121 - 21, pp. 4076 - 4092. 2017. Disponible en Internet en: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85021693202&doi=10.1021%2fac5.jpca.7b02665&partnerID=40&md5=aedc5b07a2679956a88e9d9bda016e18>>.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No
- 27** Joaquín Espinosa García; Cripriano Rangel Delgado; Jose Carlos Corchado Martín-Romo. Rate constant calculations of the GeH₄ + OH/OD = GeH₃ + H₂O/HOD reactions using an ab initio based full-dimensional potential energy surface. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 18, pp. 16941 - 16949. 07/06/2016.
Tipo de producción: Artículo científico
- 28** Laurent Bonnet; Jose Carlos Corchado Martín-Romo; Joaquín Espinosa García. Pair-correlated speed distributions for the OH+CH₄/CD₄ reactions: Further remarks on their classical trajectory calculations in a quantum spirit. *Comptes Rendus Chimie*. 19, pp. 571 - 578. 20/04/2016.
Tipo de producción: Artículo científico
- 29** Joaquín Espinosa García; Cipriano Rangel Delgado; Jose Carlos Corchado Martín-Romo. Vibrational, rotational and translational effects on the OH(v, j) + CH₄(v_1, v_2, v_3, v_4) dynamics reaction: a quasi-classical trajectory study. *Theoretical Chemistry Accounts*. 135 - 10, pp. 1 - 8. 23/12/2015.
Tipo de producción: Artículo científico
- 30** María Luz Sánchez Mendoza; Jose Carlos Corchado Martín-Romo; María Elena Martín Navarro; Ignacio Fernández Galván; Rute Barata Morgado; Manuel Ángel Aguilar Espinosa. A New QM/MM Method Oriented to the Study of Ionic Liquids. *Journal of Computational Chemistry*. 36, pp. 1893 - 1901. 24/07/2015.
Tipo de producción: Artículo científico
- 31** Joaquín Espinosa García; Jose Carlos Corchado Martín-Romo. On the energy-dependence of the excitation functions of the H + CH₄ and H + CD₄ reactions. *Computational and Theoretical Chemistry*. 1069, pp. 1 - 3. 14/07/2015.
Tipo de producción: Artículo científico
- 32** Joaquín Espinosa García; Jose Carlos Corchado Martín-Romo. Product Translational and Vibrational Distributions for the OH/OD + CH₄/CD₄ Reactions from Quasiclassical Trajectory Calculations. Comparison with Experiment. *Journal of Physical Chemistry B*. 120, pp. 1446 - 1453. 10/06/2015.
Tipo de producción: Artículo científico
- 33** Jun Li; Jose Carlos Corchado Martín-Romo; Joaquín Espinosa García; Hua Guo. Final state-resolved mode specificity in HX + OH = X + H₂O (X = F and Cl) reactions: A quasi-classical trajectory study. *Journal of Chemical Physics*. 142 - 084314, pp. 1 - 10. 27/02/2015.
Tipo de producción: Artículo científico



- 34** Joaquín Espinosa García; Jose Carlos Corchado Martín-Romo. QCT dynamics study of the reaction of hydroxyl radical and methane using a new ab initio fitted full-dimensional analytical potential energy surface. *Theoretical Chemistry Accounts*. 134 - 6, pp. 1 - 10. 13/01/2015.
Tipo de producción: Artículo científico
- 35** Joaquín Espinosa García; Jose Carlos Corchado Martín-Romo; Laurent Bonnet. Quasi-classical trajectory study of the water vibrational distribution for the polyatomic OH/OD + NH₃ reactions: Comparison with experiment. *Chemical Physics Letters*. 620, pp. 56 - 60. 23/12/2014.
Tipo de producción: Artículo científico
- 36** Jose Carlos Corchado Martín-Romo; María Luz Sánchez Mendoza; Ignacio Fernández Galván; María Elena Martín Navarro; Aurora Muñoz Losa; Rute Barata Morgado; Manuel Ángel Aguilar Espinosa. Theoretical Study of Solvent Effects on the Ground and Low-Lying Excited Free Energy Surfaces of a Push-Pull Substituted Azobenzene. *Journal of Physical Chemistry B*. 118, pp. 12518 - 12530. 08/10/2014.
Tipo de producción: Artículo científico
- 37** Eloisa González Lavado; Jose Carlos Corchado Martín-Romo; Yuri V. Suleimanov; William H. Green; Joaquín Espinosa García. Theoretical Kinetics Study of the O(3P) + CH₄/CD₄ Hydrogen Abstraction Reaction: The Role of Anharmonicity, Recrossing Effects, and Quantum Mechanical Tunneling. *Journal of Physical Chemistry A*. 118, pp. 3243 - 3252. 21/04/2014.
Tipo de producción: Artículo científico
- 38** Eloisa González Lavado; Jose Carlos Corchado Martín-Romo; Joaquín Espinosa García. The hydrogen abstraction reaction O(3P) + CH₄: A new analytical potential energy surface based on fit to ab initio calculations. *Journal of Chemical Physics*. 140 - 064310, pp. 1 - 12. 12/02/2014.
Tipo de producción: Artículo científico
- 39** Joaquín Espinosa García; Antonio Fernández Ramos; Yuri V. Suleimanov; Jose Carlos Corchado Martín-Romo. Theoretical Kinetics Study of the F(2P) + NH₃ Hydrogen Abstraction Reaction. *Journal of Physical Chemistry A*. 118, pp. 554 - 560. 02/01/2014.
Tipo de producción: Artículo científico
- 40** Rute Barata Morgado; María Luz Sánchez Mendoza; Ignacio Fernández Galván; María Elena Martín Navarro; Jose Carlos Corchado Martín-Romo; Aurora Muñoz Losa; Manuel Ángel Aguilar Espinosa. Theoretical study of the conformational equilibrium of 1,4-dioxane in gas phase, neat liquid, and dilute aqueous solutions. *Theoretical Chemistry Accounts*. 132, pp. 1 - 11. 05/09/2013.
Tipo de producción: Artículo científico
- 41** Manuel Monge Palacios; Jose Carlos Corchado Martín-Romo; Joaquín Espinosa García. Dynamics study of the OH + NH₃ hydrogen abstraction reaction using QCT calculations based on an analytical potential energy surface. *Journal of Chemical Physics*. 138, pp. 1 - 12. (Estados Unidos de América): 04/06/2013.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
- 42** Joaquín Espinosa García; Jose Carlos Corchado Martín-Romo. The abstraction reaction of H and C-H stretch excited CHD₃: A QCT study on an ab initio based potential energy surface. *Computational and Theoretical Chemistry*. 1006, pp. 123 - 126. Holland08/12/2012.
Tipo de producción: Artículo científico
- 43** Jose Carlos Corchado Martín-Romo; Joaquín Espinosa García; Jun Li; Hua Guo. CO₂ Vibrational State Distributions from Quasi-Classical Trajectory Studies of the OH + CO = H + CO₂ Reaction and H + CO₂ Inelastic Collision. *Journal of Physical Chemistry A*. 117, pp. 11648 - 11654. 04/12/2012.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 44** M. Monge-Palacios J.C. Corchado and J. Espinosa-Ga; a; Manuel Monge Palacios; Jose Carlos Corchado Martín-Romo; Joaquín Espinosa García. Quasi-classical trajectory study of the role of vibrational and translational energy in the $\text{Cl}(2P) + \text{NH}_3$ reaction. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 14, pp. 7497 - 7508. Reino Unido 04/04/2012.
Tipo de producción: Artículo científico
- 45** Joaquín Espinosa García; Jose Carlos Corchado Martín-Romo; Manuel Monge Palacios. Constructing potential energy surfaces for polyatomic systems: Recent progress and new problems. *Advances in Physical Chemistry*. 2012 - 164752, pp. 1 - 19. USA 01/01/2012.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Libro
- 46** Ernesto García; Jose Carlos Corchado Martín-Romo; Joaquín Espinosa García. A detailed product distribution analysis of some potential energy surfaces describing the $\text{OH} + \text{CO} = \text{H} + \text{CO}_2$ reaction. *Computational and Theoretical Chemistry*. 990, pp. 47 - 52. 06/10/2011.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 47** Laurent Bonnet; Joaquín Espinosa García; Jose Carlos Corchado Martín-Romo; S. Liu; Dong H. Zhang. Classical versus quantum vibrational state distributions for the benchmark polyatomic reaction $\text{OH} + \text{D}_2$: Checking the validity of the QCT method. *Chemical Physics Letters*. 516, pp. 137 - 140. Holland 06/10/2011.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 48** Jose Carlos Corchado Martín-Romo; Joaquín Espinosa García; Minghui Yang. Kinetics and dynamics of the $\text{NH}_3 + \text{H} = \text{NH}_2 + \text{H}_2$ reaction using transition state methods, quasi-classical trajectories, and quantum-mechanical scattering. *Journal of Chemical Physics*. 135 - 014303, pp. 1 - 9. USA 06/07/2011.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 49** Manuel Monge Palacios; Cipriano Rangel Delgado; Jose Carlos Corchado Martín-Romo; Joaquín Espinosa García. Analytical potential energy surface for the reaction with intermediate complexes $\text{NH}_3 + \text{Cl} = \text{NH}_2 + \text{HCl}$: application to the kinetics study. *International Journal of Quantum Chemistry*. 112, pp. 1887 - 1903. USA 20/06/2011.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 50** María Elena Martín Navarro; María Luz Sánchez Mendoza; Jose Carlos Corchado Martín-Romo; Aurora Muñoz Losa; Ignacio Fernández Galván; Francisco Javier Olivares del Valle; Manuel Ángel Aguilar Espinosa. Theoretical study of the role of solvent Stark effect in electron transitions. *Theoretical Chemistry Accounts*. 128, pp. 783 - 793. EE.UU. 30/10/2010.
Tipo de producción: Artículo científico
- 51** Joaquín Espinosa García; Cipriano Rangel Delgado; Manuel Monge Palacios; Jose Carlos Corchado Martín-Romo. Kinetics and dynamics study of the $\text{H} + \text{CCl}_4 = \text{HCl}(v',j) + \text{CCl}_3$ reaction. *Theoretical Chemistry Accounts*. 128, pp. 743 - 755. USA 22/06/2010.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 52** Joaquín Espinosa García; Jose Carlos Corchado Martín-Romo. Quasi-classical trajectory calculations of the hydrogen abstraction reaction $\text{NH}_3 + \text{H}$. *Journal of Physical Chemistry A*. 114, pp. 6194 - 6200. USA 12/05/2010.
Tipo de producción: Artículo científico
- 53** Joaquín Espinosa García; Jose Carlos Corchado Martín-Romo. Analytical Potential Energy Surface and Kinetics of the $\text{NH}_3 + \text{H} = \text{NH}_2 + \text{H}_2$ Hydrogen Abstraction and the Ammonia Inversion Reactions. *Journal of Physical Chemistry A*. 114, pp. 4455 - 4463. USA 05/03/2010.
Tipo de producción: Artículo científico



- 54** Joaquín Espinosa García; Laurent Bonnet; Jose Carlos Corchado Martín-Romo. Classical description in a quantum spirit of the prototype four-atom reaction $\text{OH} + \text{D}_2$. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 12, pp. 3873 - 3877. Reino Unido 24/02/2010.
Tipo de producción: Artículo científico
- 55** J.C. Corchado and J. Espinosa-García. Product vibrational distributions in polyatomic species based on quasiclassical trajectory calculations. *Phys.Chem.Chem.Phys.* 11, pp. 10157 - 10164. Reino Unido 2009.
Tipo de producción: Artículo científico
- 56** J.C. Corchado J.L. Bravo and J. Espinosa-García. The hydrogen abstraction reaction $\text{H} + \text{CH}_4$. I. New analytical potential energy surface based on fitting to ab initio calculations. *J. Chem. Phys.* pp. 1 - 10. USA 2009.
Tipo de producción: Artículo científico
- 57** J. Espinosa-García; a G. Nyman and J.C. Corchado. The hydrogen abstraction reaction $\text{H} + \text{CH}_4$. II. Theoretical investigation of the kinetics and dynamics. *J. Chem. Phys.* 130, pp. 1 - 9. USA 2009.
Tipo de producción: Artículo científico
- 58** C. Rangel J.C. Corchado and J. Espinosa-García; a. Quasi-classical trajectory calculations in asymmetrically substituted polyatomic systems of the type $\text{A} + \text{CX}_3\text{Y} = \text{Products}$: The $\text{H} + \text{CH}_3\text{Cl}$ hydrogen abstraction reaction channel. *Phys.Chem.Chem.Phys.* 10, pp. 6776 - 6786. Reino Unido 2008.
Tipo de producción: Artículo científico
- 59** S. Tolosa J.C. Corchado A. Hidalgo J.A. Sansón. Molecular simulation of the hydration of ethene to ethanol using ab initio potentials and free energy curves. *J. Phys. Chem. A*. pp. 13515 - 13520. EE.UU. 2007.
Tipo de producción: Artículo científico
- 60** M. Yang J.C. Corchado. Seven-dimensional quantum dynamics study of the $\text{H} + \text{NH}_3 = \text{H}_2 + \text{NH}$ reaction. *J. Chem. Phys.* 126, pp. 21431 - 0. EE.UU. 2007.
Tipo de producción: Artículo científico
- 61** M. Yang J.C. Corchado. Seven-dimensional quantum dynamics study of the $\text{H}_2 + \text{NH}_2 = \text{H} + \text{NH}_3$ reaction. *J. Chem. Phys.* 127, pp. 18430 - 0. EE.UU. 2007.
Tipo de producción: Artículo científico
- 62** J.A. Sansón M.L. Sánchez J.C. Corchado. Importance of Anharmonicity, Recrossing Effects, and Quantum Mechanical Tunneling in Transition State Theory with Semiclassical Tunneling. A Test Case: The $\text{H}_2 + \text{Cl}$ Hydrogen Abstraction Reaction. *J. Phys. Chem. A*. pp. 589 - 599. EE.UU. 2006.
Tipo de producción: Artículo científico
- 63** C. Rangel M. Navarrete J.C. Corchado J. Espinosa-G. Potential energy surface, kinetics, and dynamics study of the $\text{Cl} + \text{CH}_4 = \text{HCl} + \text{CH}_3$ reaction. *J. Chem. Phys.* 124, pp. 306 - 0. EE.UU. 2006.
Tipo de producción: Artículo científico
- 64** C. Rangel J. Sansón J. C. Corchado J. Espinosa-Gar. Product Angular Distribution for the $\text{H} + \text{CD}_4 = \text{HD} + \text{CD}_3$ Reaction. *J. Phys. Chem. A*. 110, pp. 10715 - 10719. EE.UU. 2006.
Tipo de producción: Artículo científico
- 65** C. Rangel J.C. Corchado J. Espinosa-García. Quasi-Classical Trajectory Calculations Analyzing the Reactivity and Dynamics of Asymmetric Stretch Mode Excitations of Methane in the $\text{H} + \text{CH}_4$ Reaction. *J. Phys. Chem. A*. 110, pp. 10375 - 10383. EE.UU. 2006.
Tipo de producción: Artículo científico



- 66** J. Sansón J.C. Corchado C. Rangel J. Espinosa-Garc. Quasi-classical Trajectory Calculations Analyzing the Role of Bending Mode Excitations of Methane in the Cl + CH₄ Reaction. *J. Phys. Chem. A.* 110, pp. 9568 - 9574. EE.UU.2006.
Tipo de producción: Artículo científico
- 67** J. Sansón J. C. Corchado C. Rangel J. Espinosa-Gar. Quasiclassical trajectory calculations comparing the reactivity and dynamics of symmetric and asymmetric stretch and the role of the bending mode excitations of methane in the Cl+CH₄ reaction. *J. Chem. Phys.*124, pp. 74312 - 0. EE.UU.2006.
Tipo de producción: Artículo científico
- 68** C. Rangel J. Espinosa-García J.C. Corchado. On the Accuracy of an Analytical Potential Energy Surface for the CH₄ + Cl Reaction and the Quasi-Classical Trajectory Calculations for Thermal Rate Constants. *J. Phys. Chem. A.* 109, pp. 8071 - 8073. EE.UU.2005.
Tipo de producción: Artículo científico
- 69** M. Navarrete C. Rangel J. Espinosa-García J.C. Cor. Theoretical Study of the Antioxidant Activity of Vitamin E: Reactions of alpha-Tocopherol with the Hydroperoxy Radical. *J. Chem. Theory Comput.*1, pp. 337 - 344. EE.UU.2005.
Tipo de producción: Artículo científico
- 70** M. Navarrete C. Rangel J.C. Corchado J. Espinosa-G. Trapping of the OH Radical by alpha-Tocopherol: A Theoretical Study. *J. Phys. Chem. A.* 109, pp. 4777 - 4784. EE.UU.2005.
Tipo de producción: Artículo científico
- 71** D. G. Truhlar J. Gao M. García-Viloca C. Alhambra. Ensemble-Averaged Variational Transition State Theory with Optimized Multidimensional Tunneling for Enzyme Kinetics and Other Condensed-Phase Reactions. *Int. J. Quantum Chem.*pp. 1136 - 1152. EE.UU.2004.
Tipo de producción: Artículo científico
- 72** C. Rangel M. Navarrete J. C. Corchado J. Espinosa-. Mechanism and kinetics of the n-propyl bromide and OH reaction using integrated ab initio methods and variational transition-state theory. *J. Mol. Struct. (THEOCHEM).* pp. 207 - 224. Holanda2004.
Tipo de producción: Artículo científico
- 73** J. Espinosa-García C. Rangel M. Navarrete J. C. Co. New hybrid method for reactive systems from integrating molecular orbital or molecular mechanics methods with analytical potential energy surfaces. *J. Chem. Phys.*121, pp. 5098 - 5108. EE.UU.2004.
Tipo de producción: Artículo científico
- 74** J.C. Corchado M. L. Sánchez M. A. Aguilar. Theoretical Study of the Relative Stability of Rotational Conformers of alpha and beta D Glucopyranose in Gas Phase and Aqueous Solution. *J. Amer. Chem. Soc.*126, pp. 7311 - 7399. EE.UU.2004.
Tipo de producción: Artículo científico
- 75** A. Fernández-Ramos D.G. Truhlar J.C. Corchado J. E. Interpolated algorithm for large curvature tunneling calculations of transmission coefficients for variational transition state theory calculation of reaction rates. *J. Phys. Chem. A.* 106, pp. 4957 - 4960. EE.UU.2002.
Tipo de producción: Artículo científico
- 76** R.J. Duchovic Y.L. Volobuev G.C. Lynch D.G. Truhla. POTLIB 2001: A potential energy surface library for chemical systems. *Comput. Phys. Commun.*144, pp. 169 - 187. Holanda2002.
Tipo de producción: Artículo científico



C

V

n

CURRÍCULUM VITAE NORMALIZADO

6c4721dde90f1d89fdbc6e54ad7fdd7b

- 77** C. Alhambra M.L. Sánchez J.C. Corchado J. Gao D.G.. Quantum mechanical tunneling in methylamine dehydrogenase. *Chem. Phys. Letters.* 355, pp. 388 - 394. Holanda2002.
Tipo de producción: Artículo científico
- 78** D.G. Truhlar J. Gao C. Alhambra M. García-Viloca; J. Villà. The incorporation of quantum effects in enzyme kinetics modeling. *Accounts Chem. Res.* 35, pp. 341 - 349. EE.UU.2002.
Tipo de producción: Artículo científico
- 79** C. Alhambra J.C. Corchado M.L. Sánchez M. García-V. Canonical Variational Theory for Enzyme Kinetics with the Protein Mean Force and Multidimensional Quantum Mechanical Tunneling Dynamics. *Theory and Application to Liver Alcohol Dehydrogenase. J. Phys. Chem. B.* pp. 11326 - 11340. EE.UU.2001.
Tipo de producción: Artículo científico
- 80** T. V. Albu J. C. Corchado; D. G. Truhlar. Molecular Mechanics for Chemical Reactions: A Standard Strategy for Using Multiconfigurational Molecular Mechanics for Variational Transition State Theory with Optimized Multidimensional Tunneling. *J. Phys. Chem. A.* pp. 8465 - 8487. EE.UU.2001.
Tipo de producción: Artículo científico
- 81** J. Pu J. C. Corchado; D. G. Truhlar. Test of Variational Transition State Theory with Multidimensional Tunneling contributions against an accurate full-dimensional rate constant calculation for a six-atom system. *J. Chem. Phys.* 115, pp. 6266 - 6268. EE.UU.2001.
Tipo de producción: Artículo científico
- 82** Y. Kim J.C. Corchado J. Villà J. Xing; D.G. Truhlar. Multiconfiguration molecular mechanics algorithm for potential energy surfaces of chemical reactions. *J. Chem. Phys.* 112, pp. 2718 - 2735. EE.UU.2000.
Tipo de producción: Artículo científico
- 83** J. Espinosa García; J.C. Corchado. Potential energy surface for a seven-atom reaction. Thermal rate constants and kinetic isotope effects for $\text{CH}_4 + \text{OH}$. *J. Chem. Phys.* 112, pp. 5731 - 5739. EE.UU.2000.
Tipo de producción: Artículo científico
- 84** J.C. Corchado D. G. Truhlar; J. Espinosa García. Potential energy surface, thermal, and state-selected rate coefficients, and kinetic isotope effects for $\text{Cl} + \text{CH}_4 = \text{HCl} + \text{CH}_3$. *J. Chem. Phys.* 112, pp. 9375 - 9389. EE.UU.2000.
Tipo de producción: Artículo científico
- 85** C. Alhambra J. C. Corchado M. L. Sánchez J. Gao; D. G. Truhlar. Quantum Dynamics of Hydride Transfer in Enzyme Catalysis. *J. Amer. Chem. Soc.* 122, pp. 8197 - 8203. EE.UU.2000.
Tipo de producción: Artículo científico
- 86** J. Espinosa García; J.C. Corchado. RAIL: Reaction-path and Variational Rate Constants Using the Integrated Molecular Orbital with Harmonic Cap Method. *J. Chem. Phys.* 115, pp. 3021 - 3030. EE.UU.2000.
Tipo de producción: Artículo científico
- 87** D.G. Truhlar; Jose Carlos Corchado Martín-Romo; Yao-Yuan Chuang. A Mapped Interpolation Scheme for Single-Point Energy Corrections in Reaction Rate Calculations and a Critical Evaluation of Dual-Level Reaction-Path Dynamics Methods. *J. Phys. Chem. A.* pp. 1140 - 1149. EE.UU.1999.
Tipo de producción: Artículo científico
- 88** P.L. Fast J.C. Corchado M.L. Sánchez; D.G. Truhlar. Multi-Coefficient Correlation Method for Quantum Chemistry. *J. Phys. Chem. A.* pp. 5129 - 5136. EE.UU.1999.
Tipo de producción: Artículo científico



- 89** P.L. Fast J.C. Corchado M.L.Sánchez; D.G. Truhlar. Optimized Parameters for Scaling Correlation Energy. J. Phys. Chem. A. 103, pp. 3139 - 3143. EE.UU.1999.
Tipo de producción: Artículo científico
- 90** P.L. Fast M.L.Sánchez J.C. Corchado; D.G. Truhlar. The Gaussian-2 method with Proper Dissociation, Improved Accuracy, and Less Cost. J. Chem. Phys.110, pp. 11679 - 11681. EE.UU.1999.
Tipo de producción: Artículo científico
- 91** C. Alhambra J. Gao J.C. Corchado J. Villà; D.G. Truhlar. The Quantum Mechanical Dynamical Effects in an Enzyme-Catalyzed Proton Transfer Reaction. J. Amer. Chem. Soc.121, pp. 2253 - 2258. EE.UU.1999.
Tipo de producción: Artículo científico
- 92** J. Villà J.C. Corchado A. González-Lafont L.M. Llu; D.G. Truhlar. Variational Transition State Theory with Optimized Orientation of the Dividing Surface and Semiclassical Tunneling Calculations for Deuterium and Muonium Kinetic Isotope Effects in the Free Radical Association Reaction $H + C_2H_4 = C_2H_5$. J. Phys. Chem. A. 103, pp. 5061 - 5074. EE.UU.1999.
Tipo de producción: Artículo científico
- 93** J.C. Corchado J. Espinosa García O. Roberto-Neto Y; D.G. Truhlar. Dual-Level Direct Dynamics Calculations of the Reaction Rates for a Jahn-Teller Reaction: Hydrogen Abstraction from CH_4 or CD_4 by $O(3P)$. J. Phys. Chem. A. pp. 4899 - 4910. EE.UU.1998.
Tipo de producción: Artículo científico
- 94** J.C. Corchado; D.G. Truhlar. Integrated Molecular Orbital Method with Harmonic Cap for Molecular Forces and its Application to Geometry Optimization and the Calculation of Vibrational Frequencies. J. Phys. Chem. A. pp. 1895 - 1898. EE.UU.1998.
Tipo de producción: Artículo científico
- 95** J.C. Corchado E.L. Coitiño Y.-Y. Chuang P.L. Fast; D.G. Truhlar. Interpolated Variational Transition State Theory by Mapping. J. Phys. Chem. A. 102, pp. 2424 - 2438. EE.UU.1998.
Tipo de producción: Artículo científico
- 96** P.L. Fast J.C. Corchado; D.G. Truhlar. The Calculation of Kinetic Isotope Effects Based on a Single Reaction Path. J. Chem. Phys.109, pp. 6237 - 6245. EE.UU.1998.
Tipo de producción: Artículo científico
- 97** J. Villà J.C. Corchado A. González-Lafont J.M. Llu; D.G. Truhlar. The Explanation of Deuterium and Muonium Kinetic Isotope Effects for a Hydrogen Atom Addition to an Olefin. J. Amer. Chem. Soc.120, pp. 12141 - 12142. EE.UU.1998.
Tipo de producción: Artículo científico
- 98** J. Espinosa García J. Sansón; J.C. Corchado. The $SiH_4 + H = SiH_3 + H_2$ reaction: Potential Energy Surface, Rate Constants, and Kinetic Isotope Effects. J. Chem. Phys.109, pp. 466 - 473. EE.UU.1998.
Tipo de producción: Artículo científico
- 99** J.C. Corchado; J. Espinosa García. Analytical potential energy surface for the $NH_3 + H = NH_2 + H_2$ reaction. Application of variational transition state theory and analysis of the equilibrium constants and kinetic isotope effects using curvilinear and rectilinear coordinates. J. Chem. Phys.pp. 4013 - 4021. EE.UU.1997.
Tipo de producción: Artículo científico
- 100** J.C. Corchado; J. Espinosa García. Analytical potential energy surface for the reaction with no saddle point $NH_3 + F = NH_2 + FH$. Application of variational transition state theory. J. Phys. Chem. A. pp. 7336 - 7344. EE.UU.1997.
Tipo de producción: Artículo científico



- 101** W.-P. Hu; I. Rossi J.C. Corchado; D.G. Truhlar. Molecular Modeling of Combustion Kinetics. The abstraction of Primary and Secondary Hydrogens by Hydroxyl Radical. *J. Phys. Chem. A.* pp. 6911 - 6921. EE.UU.1997.
Tipo de producción: Artículo científico
- 102** R. Steckler Y.-Y. Chuang P.L. Fast E.L. Coitiño J.. POLYRATE: A Computer Program for the Calculation of Chemical Reaction Rates for Polyatomics (version 7.3.1). *QCPE Bull.*17, pp. 34 - 35. EE.UU.1997.
Tipo de producción: Artículo científico
- 103** J. Espinosa García J.C. Corchado; D.G. Truhlar. The importance of quantum effects for C-H bond activation reactions. *J. Amer. Chem. Soc.*119, pp. 9891 - 9895. EE.UU.1997.
Tipo de producción: Artículo científico
- 104** J. Villà A. González-Lafont J.M. Lluch J.C. Corcha; J. Espinosa García. Understanding the activation energy trends for the $C_2H_4 + OH = C_2H_4OH$ reaction using canonical variational transition state theory. *J. Chem. Phys.*107, pp. 7266 - 7274. EE.UU.1997.
Tipo de producción: Artículo científico
- 105** J. Espinosa García; J.C. Corchado. Analytical PES for $CH_4 + Cl = CH_3 + HCl$. Application of the VTST and analysis of the kinetic isotopic effect. *J. Chem. Phys.*pp. 3517 - 3523. EE.UU.1996.
Tipo de producción: Artículo científico
- 106** M. Avalos R. Babiano A. Cabanillas P. Cintas J.L.; J. Espinosa García. Munchnone-Alkene Cycloadditions: Deviations from the FMO Theory. Theoretical Studies in the Search of the Transition State. *J. Org. Chem.* 61, pp. 7291 - 7297. EE.UU.1996.
Tipo de producción: Artículo científico
- 107** J. Espinosa García; J.C. Corchado. Recalibration of two earlier PES for the $CH_4 + H = CH_3 + H_2$ reaction. Application of the VTST and analysis of the kinetic isotope effect using rectilinear and curvilinear coordinates. *J. Phys. Chem.*100, pp. 16561 - 16567. EE.UU.1996.
Tipo de producción: Artículo científico
- 108** J.C. Corchado; J. Espinosa-García. Theoretical study of the $CH_4 + F = CH_3 + FH$ reaction. Part I: Ab initio reaction path. *J. Chem. Phys.*105, pp. 3152 - 3160. EE.UU.1996.
Tipo de producción: Artículo científico
- 109** J.C. Corchado; J. Espinosa-García. Theoretical study of the $CH_4 + F = CH_3 + FH$ reaction. Part II: Semiempirical surfaces. *J. Chem. Phys.*105, pp. 3160 - 3167. EE1996.
Tipo de producción: Artículo científico
- 110** Joaquín Espinosa García; Jose Carlos Corchado Martín-Romo. Analysis of certain factors in the direct dynamics method. Variational rate constant of the $NH_3 + OH = NH_2 + H_2O$ reaction. *J. Chem. Phys.*pp. 8700 - 8708. EE.UU.American Institute of Physics, 1995.
Tipo de producción: Artículo científico
- 111** J. C. Corchado J. Espinosa-García W.-P. Hu Ivan Ro; D. G. Truhlar. Dual-level reaction-path dynamics (the /// approach to VTST with semiclassical tunneling). Application to $OH + NH_3 = H_2O + NH_2$. *J. Phys. Chem.*pp. 687 - 694. EE.UU.1995.
Tipo de producción: Artículo científico
- 112** J. Espinosa-García; J.C. Corchado. The reliability of the single-point calculation technique at characteristic points of the potential energy surface. *J. Phys. Chem.* 99, pp. 8613 - 8616. EE.UU.1995.
Tipo de producción: Artículo científico



- 113** J. Espinosa-García J.C. Corchado; G. Leroy. Theoretical thermochemistry and kinetics of the first steps of the radical and anionic polymerization of ethene and formaldehyde. *J. Phys. Chem.* 99, pp. 13926 - 13929. EE.UU.1995.
Tipo de producción: Artículo científico
- 114** J. Espinosa-García J.C. Corchado J. Fernández; A. Márquez. Theoretical values of the enthalpies of formation of the NH_x (x=1, 2, 3) compounds. Importance of the core-correlation effects. *Chem. Phys. Letters.* 233, pp. 220 - 226. Holanda1995.
Tipo de producción: Artículo científico
- 115** J. Espinosa-García S. Tolosa; J. C. Corchado. Ab initio evaluation of the barrier height. Theoretical rate constant of the NH₃ + H → NH₂ + H₂ reaction. *J. Phys. Chem.* pp. 2337 - 2340. EE.UU.1994.
Tipo de producción: Artículo científico
- 116** J. Espinosa-García E. A. Ojalvo; J. C. Corchado. Theoretical rate constante on the error cancellation using convencional transition-state theory and Wigner's tunnelling correction. *J. Mol. Struct. (THEOCHEM).* 303, pp. 1331 - 1339. Holanda1994.
Tipo de producción: Artículo científico
- 117** J. Espinosa García; J.C. Corchado. Theoretical values of the enthalpies of formation of the SH and HSO radicals. *Chem. Phys. Letters.* 218, pp. 128 - 132. Holanda1994.
Tipo de producción: Artículo científico
- 118** J. Espinosa-García F. J. Olivares del Valle; J. C. Corchado. Transition state theory and Eckart's tunneling factor. A good aproximation for the bimolecular rate constants?. *Chem. Phys.* 183, pp. 95 - 100. Inglaterra1994.
Tipo de producción: Artículo científico
- 119** J. Espinosa-García; J. C. Corchado. Variational transition-state theory calculation using the direct dynamics method. NH₃ + H = NH₂ + H₂ reaction. *J. Chem. Phys.* 101, pp. 1333 - 1342. EE.UU.1994.
Tipo de producción: Artículo científico
- 120** J.C. Corchado F.J. Olivares del Valle; J. Espinosa García. Theoretical study of intermediate complexes and the saddle point for NH₃ + OH = NH₂ + H₂O. *J. Phys. Chem.* 97, pp. 9129 - 9133. EE.UU.1993.
Tipo de producción: Artículo científico
- 121** J. Espinosa García J.C. Corchado; M. Sana. Theoretical thermochemistry and kinetics of some hydrogen abstraction reactions on nitrogen. *J. Chim. Phys.* 90, pp. 1181 - 1200. Francia1993.
Tipo de producción: Artículo científico
- 122** J.C. Corchado; D.G. Truhlar. Dual-Level Methods for Electronic Structure Calculations of Potential Energy Functions that Use Quantum Mechanics as the Lower Level. *Combined Quantum Mech. and Molecular Mech. Methods.* pp. 106 - 127. EE.UU.ACS Symposium Series, 1998. ISBN 0841235902
Tipo de producción: Capítulo de libro **Tipo de soporte:** Libro
- 123** J. Espinosa-García; A. Fernandez-Ramos; Y.V. Suleimanov; J.C. Corchado. Theoretical Kinetics Study of the F(2P) + NH₃Hydrogen Abstraction Reaction (*J. Phys. Chem. A* (2014) 118:3 (554-560) DOI: 10.1021/jp4118453). *Journal of Physical Chemistry A.* 125 - 25, pp. 5709 - 5710. ACS, 2021.
Tipo de producción: Erratum **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No



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

Comités científicos, técnicos y/o asesores

Título del comité: Personal Research Grants

Entidad de afiliación: Israel Science Foundation

Tipo de entidad: Agencia Estatal

Ciudad entidad afiliación: Israel

Fecha de finalización: 09/03/2023

Gestión de I+D+i

Nombre de la actividad: Grupo de Cinética y Dinámica de Extremadura

Tipología de la gestión: Gestión de grupo de investigación

Funciones desempeñadas: Coordinador

Entidad de realización: Junta de Extremadura

Tipo de entidad: Gobierno Autonómico

Fecha de inicio: 12/04/2018

Otros méritos

Períodos de actividad investigadora

Nº de tramos reconocidos: 5

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

Tipo de entidad: Agencia Nacional

Fecha de obtención: 01/01/2023

Acreditaciones/reconocimientos obtenidos

Descripción: Complementos Autonómicos de Investigación - Tramo 2.1

Entidad acreditante: Junta de Extremadura

Tipo de entidad: Gobierno Autonómico

Fecha del reconocimiento: 01/01/2020