



José Ángel Sordo Gonzalo

Generado desde: Editor CVN de FECYT

Fecha del documento: 21/05/2024

v 1.4.3

4c644378ad18be1437753e10e153f15e

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/>



José Ángel Sordo Gonzalo

Apellidos: **Sordo Gonzalo**
 Nombre: **José Ángel**
 DNI: **10558852N**
 Fecha de nacimiento: **13/08/1954**
 Sexo: **Hombre**
 Nacionalidad: **España**
 País de nacimiento: **España**
 C. Autón./Reg. de nacimiento: **Principado de Asturias**
 Provincia de contacto: **Asturias**
 Ciudad de nacimiento: **Gijón**
 Dirección de contacto: **C/Julián Clavería, 8**
 Código postal: **33006**
 País de contacto: **España**
 C. Autón./Reg. de contacto: **Principado de Asturias**
 Ciudad de contacto: **Oviedo**
 Teléfono fijo: **985103479**
 Correo electrónico: **jasg@uniovi.es**
 Teléfono móvil: **680679951**

Situación profesional actual

Entidad empleadora: Universidad de Oviedo

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA FÍSICA Y ANALÍTICA, Facultad de Química

Categoría profesional: Catedrático de Universidad

Ciudad entidad empleadora: DPTO. QUÍMICA FÍSICA Y ANALÍTICA. FACULTAD DE QUÍMICA. UNIVERSIDAD DE OVIEDO. C/ JULIÁN CLAVERÍA, 8. 33006 OVIEDO,

Teléfono: 985 10 34 79

Fax: 985 237850

Correo electrónico: jasg @ uni ovi.es

Fecha de inicio: 2007

Modalidad de contrato: ? Plantilla 0 Contratado 0 Interino 0 Becario 0

Primaria (Cód. Unesco): 230202 - Aminoácidos; 230408 - Macromoléculas; 230418 - Polipéptidos y proteínas

Identificar palabras clave: Química cuántica; Química computacional

Cargos y actividades desempeñados con anterioridad

	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
1	Universidad de Oviedo	Profesor Titular	1987
2	IBM-Kingston (New York)	Visiting Professor	1987
3	IBM-Kingston (New York)	Postdoctoral Fellow	1986
4	Universidad de Oviedo	Profesor Adjunto Contratado	1984
5	University of Alberta	Becario FPI	1985
6	Universidad de Oviedo	Profesor Colaborador	1982



	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
7	Universidad de Oviedo	Profesor Ayudante	1978

- 1** Entidad empleadora: Universidad de Oviedo
Categoría profesional: Profesor Titular
Fecha de inicio-fin: 1987 - 2007
Tipo de entidad: Universidad
Duración: 20 años
- 2** Entidad empleadora: IBM-Kingston (New York)
Categoría profesional: Visiting Professor
Fecha de inicio-fin: 1987 - 1987
Duración: 6 meses
- 3** Entidad empleadora: IBM-Kingston (New York)
Categoría profesional: Postdoctoral Fellow
Fecha de inicio-fin: 1986 - 1987
Tipo de entidad: Entidad Empresarial
Duración: 2 años
- 4** Entidad empleadora: Universidad de Oviedo
Categoría profesional: Profesor Adjunto Contratado
Fecha de inicio-fin: 1984 - 1987
Tipo de entidad: Universidad
Duración: 3 años
- 5** Entidad empleadora: University of Alberta
Categoría profesional: Becario FPI
Fecha de inicio-fin: 1985 - 1986
Tipo de entidad: Universidad
Duración: 1 año
- 6** Entidad empleadora: Universidad de Oviedo
Categoría profesional: Profesor Colaborador
Fecha de inicio-fin: 1982 - 1983
Tipo de entidad: Universidad
Duración: 1 año
- 7** Entidad empleadora: Universidad de Oviedo
Categoría profesional: Profesor Ayudante
Fecha de inicio-fin: 1978 - 1982
Tipo de entidad: Universidad
Duración: 4 años



Formación académica recibida

Titulación universitaria

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

Titulación universitaria: Titulado Superior

Nombre del título: Licenciado en Ciencias Químicas

Entidad de titulación: Universidad de Oviedo

Tipo de entidad: Universidad

Fecha de titulación: 30/04/1977

Doctorados

Programa de doctorado: Doctor en Ciencias Químicas

Entidad de titulación: Universidad de Oviedo

Tipo de entidad: Universidad

Fecha de titulación: 03/07/1983

Conocimiento de idiomas

Idioma	Comprensión auditiva	Comprensión de lectura	Interacción oral	Expresión oral	Expresión escrita
Inglés		B1	B1	B1	B1

Actividad docente

Formación académica impartida

- Nombre de la asignatura/curso:** Experimentación en Biotecnología I

Titulación universitaria: Grado en Biotecnología

Fecha de inicio: 2013

Entidad de realización: Universidad de Oviedo

Facultad, instituto, centro: Facultad de Biología

Fecha de finalización: 2013

Tipo de entidad: Universidad
- Nombre de la asignatura/curso:** Trabajo Fin de Grado en Química

Titulación universitaria: Grado en Química

Fecha de inicio: 2013

Entidad de realización: Universidad de Oviedo

Facultad, instituto, centro: Facultad de Química

Fecha de finalización: 2013

Tipo de entidad: Universidad



- 3** **Nombre de la asignatura/curso:** Experimentación en Química Física
Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 1998 **Fecha de finalización:** 2011
Entidad de realización: Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Química
- 4** **Nombre de la asignatura/curso:** Laboratorio Avanza de Química Física
Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 1997 **Fecha de finalización:** 2011
Entidad de realización: Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Química
- 5** **Nombre de la asignatura/curso:** Programación y Cálculo
Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 1997 **Fecha de finalización:** 2011
Entidad de realización: Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Química
- 6** **Nombre de la asignatura/curso:** Experimentación en Química Física
Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 1998 **Fecha de finalización:** 2010
Entidad de realización: Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Química
- 7** **Nombre de la asignatura/curso:** Técnicas Básicas en Química Computacional
Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 1998 **Fecha de finalización:** 2006
Entidad de realización: Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Química
- 8** **Nombre de la asignatura/curso:** Cursos de Doctorado (diversas materias)
Titulación universitaria: Doctorado en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 1987 **Fecha de finalización:** 2002
Entidad de realización: Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Química
- 9** **Nombre de la asignatura/curso:** Química Física II
Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 1997 **Fecha de finalización:** 1998
Entidad de realización: Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Química
- 10** **Nombre de la asignatura/curso:** Termodinámica Estadística y Simulación
Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 1997 **Fecha de finalización:** 1998
Entidad de realización: Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Química
- 11** **Nombre de la asignatura/curso:** Ampliación de Química Física
Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas
Fecha de inicio: 1994 **Fecha de finalización:** 1997



Entidad de realización: Universidad de Oviedo
Facultad, instituto, centro: Facultad de Química

Tipo de entidad: Universidad

12 Nombre de la asignatura/curso: Química Física

Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 1994

Fecha de finalización: 1995

Entidad de realización: Universidad de Oviedo

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Química

13 Nombre de la asignatura/curso: Química Cuántica

Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 1978

Fecha de finalización: 1994

Entidad de realización: Universidad de Oviedo

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Química

14 Nombre de la asignatura/curso: Cálculo y Programación en Química Física

Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 1980

Fecha de finalización: 1989

Entidad de realización: Universidad de Oviedo

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Química

15 Nombre de la asignatura/curso: Termodinámica

Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 1987

Fecha de finalización: 1988

Entidad de realización: Universidad de Oviedo

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Química

16 Nombre de la asignatura/curso: Cinética Química

Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 1986

Fecha de finalización: 1987

Entidad de realización: Universidad de Oviedo

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Química

17 Nombre de la asignatura/curso: Espectroscopía y Estructura de la Materia

Titulación universitaria: Licenciatura en Ciencias Químicas

Fecha de inicio: 1986

Fecha de finalización: 1987

Entidad de realización: Universidad de Oviedo

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Química

18 Nombre de la asignatura/curso: Química Física I

Titulación universitaria: Grado en Química

Fecha de inicio: 2014

Entidad de realización: Universidad de Oviedo

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Química

19 Nombre de la asignatura/curso: Simulaciones en Química Computacional

Titulación universitaria: Grado en Química

Fecha de inicio: 2012

Entidad de realización: Universidad de Oviedo

Tipo de entidad: Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Química



- 20** **Nombre de la asignatura/curso:** Simulaciones en Química Computacional
Titulación universitaria: Grado en Química
Fecha de inicio: 2012
Entidad de realización: Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Química
- 21** **Nombre de la asignatura/curso:** Simulaciones en Química Computacional
Titulación universitaria: Grado en Química
Fecha de inicio: 2012
Entidad de realización: Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Química
- 22** **Nombre de la asignatura/curso:** Termodinámica y Cinética
Titulación universitaria: Grado en Biotecnología
Fecha de inicio: 2011
Entidad de realización: Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Biología
- 23** **Nombre de la asignatura/curso:** Termodinámica y Cinética
Titulación universitaria: Grado en Biotecnología
Fecha de inicio: 2011
Entidad de realización: Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Biología

Dirección de tesis doctorales y/o proyectos fin de carrera

- 1** **Título del trabajo:** "Contribuciones teóricas al esclarecimiento del papel jugado por catalizadores y aditivos en algunas reacciones químicas fundamentales"
Entidad de realización: Oviedo Facultad / Escuela: Facultad de Química
Alumno/a: D. Adrián Varela Álvarez
Fecha de defensa: 2010
- 2** **Título del trabajo:** "Asociaciones moleculares: Análisis de la naturaleza de la interacción en complejos dímeros y trímeros de van der waals"
Entidad de realización: Oviedo Facultad / Escuela: Facultad de Química
Alumno/a: Dña. Haydeé Valdés González
Fecha de defensa: 2003
- 3** **Título del trabajo:** "Reacciones de interés medioambiental: Análisis del comportamiento de las metodologías ab initio"
Entidad de realización: Oviedo Facultad / Escuela: Facultad de Química
Alumno/a: D. Pedro Braña Coto
Fecha de defensa: 2003
- 4** **Título del trabajo:** "Complejos de van der Waals: estructura, propiedades y naturaleza de la interacción"
Entidad de realización: Oviedo Facultad / Escuela: Facultad de Química
Alumno/a: D. Víctor Manuel Rayón Rico
Fecha de defensa: 2000



- 5 Título del trabajo:** "Mecanismos de formación de ciclos de tres, cuatro, cinco y seis centros: estudio teórico"
Entidad de realización: Oviedo Facultad / Escuela: Facultad de Química
Alumno/a: D. Dimas Suárez Rodríguez
Fecha de defensa: 1997
- 6 Título del trabajo:** "Un algoritmo no-estadístico que utiliza potenciales ab initio para el estudio de asociaciones moleculares: el problema de la base en la generación de potenciales"
Entidad de realización: Oviedo Facultad / Escuela: Facultad de Química
Alumno/a: D. Emiliano Iglesias Corredera
Fecha de defensa: 1996
- 7 Título del trabajo:** "Mecanismo de formación de ciclos de tres y cuatro centros: estudio teórico"
Entidad de realización: Oviedo Facultad / Escuela: Facultad de Química
Alumno/a: D. Ramón López Rodríguez
Fecha de defensa: 1994
- 8 Título del trabajo:** "Catálisis homogénea en reacciones de adición y ciclación: estudio teórico"
Entidad de realización: Oviedo Facultad / Escuela: Facultad de Química
Alumno/a: Dña. María Isabel Ménéndez Rodríguez
Fecha de defensa: 1993

Material y otras publicaciones docentes o de carácter pedagógico.

- 1** J.A. Sordo. The configuration interaction expansion is the exact solution of the Schrödinger equation, Journal of Chemical Education. 83, pp. 480. ACS.
Nombre del material: Cálculos Mecano-cuánticos
Fecha de elaboración: 2006
Tipo de soporte: Artículo/s
- 2** G.M. Fernández; J.A. Sordo; T.L. Sordo. Charge transfer in Lewis acid-base reactions: a MO study on the H₃⁺, Journal of Chemical Education. 67, pp. 898. ACS.
Nombre del material: Reactividad Química
Fecha de elaboración: 1989
Tipo de soporte: Artículo/s
- 3** G.M. Fernández; J.A. Sordo; T.L. Sordo. Analysis of potential energy surfaces, Journal of Chemical Education. 65, pp. 665. ACS.
Nombre del material: Reactividad Química
Fecha de elaboración: 1988
Tipo de soporte: Artículo/s
- 4** L.A.G. Bernardo; T.L. Sordo; J.A. Sordo. Funciones de Base, Química Teórica. CSIC.
Nombre del material: Cálculos Mecano-cuánticos
Fecha de elaboración: 1987
Tipo de soporte: Libro
- 5** G.M. Fernández; J.A. Sordo; T.L. Sordo. Trajectory calculations on the rolling ball model, Journal of Chemical Education. 62, pp. 491. ACS.
Nombre del material: Dinámica de Reacciones
Fecha de elaboración: 1985



Tipo de soporte: Artículo/s

- 6 J.A. Sordo; L. Pueyo. An exercise on the theory of complex spectra, Journal of Chemical Education. 62, pp. 468. ACS.

Nombre del material: Estructura Atómica

Fecha de elaboración: 1985

Tipo de soporte: Artículo/s

Experiencia científica y tecnológica

Actividad científica o tecnológica

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

- 1 **Nombre del proyecto:** "Estudios mecanocuántico y cinético de sistemas y procesos ión-molécula de interés en astroquímica y química sintética"
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Carmen Barrientos Benito (Universidad de Valladolid)
Nº de investigadores/as: 5
Entidad/es financiadora/s:
DGI
Fecha de inicio: 2011 **Duración:** 3 años
- 2 **Nombre del proyecto:** "Estudios mecanísticos de reacciones en fase gas entre halogenuros de alquilo y cationes metálicos: influencia de la temperatura y presión"
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José Ángel Sordo Gonzalo
Nº de investigadores/as: 1
Entidad/es financiadora/s:
FICYT (Principado de Asturias)
Fecha de inicio: 2008 **Duración:** 2 años
- 3 **Nombre del proyecto:** "Reactividad en fase gas de cationes metálicos con CH₃X (X=H,F,Cl): La importancia de la formación de intermediatos en reactividad química"
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José Ángel Sordo Gonzalo
Nº de investigadores/as: 2
Entidad/es financiadora/s:
DGI
Fecha de inicio: 2007 **Duración:** 3 años
- 4 **Nombre del proyecto:** "Estudio mecanístico de reacciones de interés en química atmosférica y astroquímica"
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José Ángel Sordo Gonzalo
Nº de investigadores/as: 2
Entidad/es financiadora/s:
DGI
Fecha de inicio: 2005 **Duración:** 3 años



5 Nombre del proyecto: "Reacciones de interés en Química Medioambiental, Atmosférica e Interestelar: Importancia del cruce entre sistemas y de los complejos pre-reactivos"

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José Ángel Sordo Gonzalo

Nº de investigadores/as: 1

Entidad/es financiadora/s:

DGES

Fecha de inicio: 2002

Duración: 3 años

6 Nombre del proyecto: "Servicio Común de Cálculo Científico y Tecnológico" (Convocatoria Infraestructuras)

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José Ángel Sordo Gonzalo

Nº de investigadores/as: 36

Entidad/es financiadora/s:

Principado de Asturias (Infraestructuras: Equipo Informático SGI O2000)

Fecha de inicio: 1999

Duración: 4 años

7 Nombre del proyecto: "Aplicación de Metodologías ab initio y DFT a la Química Medioambiental (Convocatoria de Infraestructuras)"

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José Ángel Sordo Gonzalo

Nº de investigadores/as: 3

Entidad/es financiadora/s:

F.I.C.Y.T (Principado de Asturias)

Fecha de inicio: 1998

Duración: 1 año

8 Nombre del proyecto: "Estudio Teórico de la Estructura, Reactividad y Espectroscopía de Especies Atómicas y Moleculares de Interés Astroquímico (I)"

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José Ángel Sordo Gonzalo

Nº de investigadores/as: 1

Entidad/es financiadora/s:

Universidad de Oviedo

Fecha de inicio: 1998

9 Nombre del proyecto: "Estudio Teórico de la Estructura, Reactividad y Espectroscopía de Especies Atómicas y Moleculares de Interés Astroquímico (II)"

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José Ángel Sordo Gonzalo

Nº de investigadores/as: 1

Entidad/es financiadora/s:

DGES

Fecha de inicio: 1998

Duración: 3 años

10 Nombre del proyecto: "Estudio Teórico del Mecanismo de las Reacciones entre Cloro e Hidrocarburos: Formación de Complejos de van der Waals"

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José Ángel Sordo Gonzalo

Nº de investigadores/as: 2

Entidad/es financiadora/s:

F.I.C.Y.T.

Fecha de inicio: 1998

Duración: 1 año



- 11 Nombre del proyecto:** "New Reactions of Sulfur Dioxide (II)"
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Pierre Vogel y José Ángel Sordo Gonzalo
Nº de investigadores/as: 2
Entidad/es financiadora/s:
CSCS (Centre Svizzero di Calcolo Scinetifico)
Manno (Suiza) (Tiempo CPU)
Fecha de inicio: 1997 **Duración:** 8 años
- 12 Nombre del proyecto:** "Monobactamas: Estudio ab initio de su Síntesis, Aminólisis e Hidrólisis".
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Tomás Luis Sordo Gonzalo
Nº de investigadores/as: 5
Entidad/es financiadora/s:
FICYT
Fecha de inicio: 1996 **Duración:** 1 año
- 13 Nombre del proyecto:** "Estudio Teórico ab initio y Semiempírico de la Química Interestelar y de las Llamas"
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Tomás Luis Sordo Gonzalo
Nº de investigadores/as: 6
Entidad/es financiadora/s:
D.G.I.C.Y.T
Fecha de inicio: 1995 **Duración:** 3 años
- 14 Nombre del proyecto:** "Potenciales de Pares a Partir de Cálculos ab initio: Calidad de las Bases"
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José Ángel Sordo Gonzalo
Nº de investigadores/as: 2
Entidad/es financiadora/s:
Universidad de Oviedo
Fecha de inicio: 1995 **Duración:** 1 año
- 15 Nombre del proyecto:** "Estudio Teórico de la Influencia del Disolvente en la Estereoquímica de la Síntesis de Lactamas"
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Tomás Luis Sordo Gonzalo
Nº de investigadores/as: 4
Entidad/es financiadora/s:
Acciones Integradas Hispano-Francesas
Fecha de inicio: 1994 **Duración:** 2 años
- 16 Nombre del proyecto:** "Estudio Teórico, mediante Métodos ab initio y Semiempíricos, de Propiedades Espectrales y Químicas de Especies de Interés Astrofísico"
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Largo Cabrerizo
Nº de investigadores/as: 6
Entidad/es financiadora/s:
D.G.I.C.Y.T
Fecha de inicio: 1992 **Duración:** 3 años



- 17** **Nombre del proyecto:** "Estudio del Error por Superposición de Bases en Cálculos del Tipo Moller-Plesset"
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José Ángel Sordo Gonzalo
Nº de investigadores/as: 3
Entidad/es financiadora/s:
Acciones Integradas Hispano-Británicas
Fecha de inicio: 1990 **Duración:** 2 años
- 18** **Nombre del proyecto:** "Interacciones Moleculares en Sistemas de Interés Biológico"
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José Ángel Sordo Gonzalo
Nº de investigadores/as: 2
Entidad/es financiadora/s:
D.G.I.C.Y.T.
Fecha de inicio: 1988 **Duración:** 3 años
- 19** **Nombre del proyecto:** "Cálculos no Empíricos de la Estructura Electrónica de Metales de Transición en Redes Cristalinas y Dímeros"
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Lorenzo Pueyo Casaus
Nº de investigadores/as: 5
Entidad/es financiadora/s:
D.G.I.C.Y.T.
Fecha de inicio: 1984 **Duración:** 2 años

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

- 1** **Nombre del proyecto:** "Benzodiazepinas tricíclicas: Preparación de nuevos derivados y síntesis alternativas"
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Francisco Javier González Fernández
Nº de investigadores/as: 5
Entidad/es financiadora/s:
Fondos FEDER
Fecha de inicio: 1999 **Duración:** 2 años
Cuantía total: 26.311.000 €
- 2** **Nombre del proyecto:** "Cicloaductos Derivados de Iminas de Sultamicilina y Compuestos Beta-Bactámicos"
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Francisco Javier González Fernández
Nº de investigadores/as: 5
Entidad/es financiadora/s:
ASTURPHARMA
FICYT
Fecha de inicio: 1999 **Duración:** 1 año
Cuantía total: 3.212.727 €



Actividades científicas y tecnológicas

Producción científica

Índice H: 26

Fecha de aplicación: 2015

Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1 Jose Angel Sordo. Solvation thermodynamics: two formulations and some misunderstandings. RSC ADVANCES. 5, pp. 96105 - 96116. 2015.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 2 Jose Angel Sordo. Computational contributions to chemistry, biological chemistry and biophysical chemistry: the 2013 Nobel Prize in Chemistry. ANALYTICAL AND BIOANALYTICAL CHEMISTRY. 406, pp. 1825 - 1828. 2014. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 3 Pilar Redondo; Antonio Largo; Victor Manuel Rayon; German Molpeceres; Jose Angel Sordo; Carmen Barrientos. Halogen-abstraction reactions from chloromethane and bromomethane molecules by alkaline-earth monocations. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 16, pp. 16121 - 16136. 2014. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 4 Carmen Barrientos; Victor Manuel Rayon; Antonio Largo; Jose Angel Sordo; Pilar Redondo. Kinetics Studies of the Reactions of Main Fourth-Period Monocations (Ga⁺, Ge⁺, As⁺, and Se⁺) with Methyl Fluoride. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 117 - 33, pp. 7742 - 7753. 2013. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 5 Pilar Redondo; Adrian Varela-Alvarez; Victor Manuel Rayon; Antonio Largo; Jose Angel Sordo; Carmen Barrientos. Reactivity of First-Row Transition Metal Monocations (Sc⁺, Ti⁺, V⁺, Zn⁺) with Methyl Fluoride: A Computational Study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 117 - 14, pp. 2932 - 2943. 2013. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 6 Adrian Varela-Alvarez; Jose A. Sordo; Estefania Piedra; Noel Nebra; Victorio Cadierno; Jose Gimeno. Ruthenium(IV)-Catalyzed Isomerization of the C=C Bond of O-Allylic Substrates: A Theoretical and Experimental Study. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 17 - 38, pp. 10583 - 10599. 2011. ISSN 0947-6539
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 7 Adrian Varela-Alvarez; Jose Angel Sordo; Pilar Redondo; Antonio Largo; Carmen Barrientos; Victor M. Rayon. Theoretical study of the C-F bond activation in methyl fluoride by alkaline-earth metal monocations. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS. 128 - 4-6, pp. 609 - 618. 2011. ISSN 1432-881X
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 8 Dean Markovic; Chandra M. R. Volla; Pierre Vogel; Adrian Varela-Alvarez; Jose A. Sordo. BCl₃-Mediated Ene Reaction of Sulfur Dioxide and Unfunctionalized Alkenes. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 16 - 20, pp. 5969 - 5975. 2010. ISSN 0947-6539
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 9** Angels Gonzalez-Lafont; Jose M. Lluch; Adrian Varela-Alvarez; Jose A. Sordo. Canonical Variational Transition-State Theory Study of the $\text{CF}_3\text{CHFCH}_2\text{F} + \text{OH}$ Reaction. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A*. 114 - 8, pp. 2768 - 2777. 2010. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 10** Adrian Varela-Alvarez; V. M. Rayon; P. Redondo; C. Barrientos; Jose A. Sordo. Gas-phase reaction between calcium monocation and fluoromethane: Analysis of the potential energy hypersurface and kinetics calculations. *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*. 131 - 14, 10/2009. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 11** Adrian Varela-Alvarez; Dean Markovic; Pierre Vogel; Jose Angel Sordo. Desulfinylation of Prop-2-enesulfonic Acid: Experimental Results and Mechanistic Theoretical Analysis. *JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY*. 131 - 27, pp. 9547 - 9561. 07/2009. ISSN 0002-7863
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 12** Adrian Varela-Alvarez; Jose A. Sordo. A suitable model for emeraldine salt. *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*. 128 - 17, 05/2008. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 13** Jose Angel Sordo; Adrian Varela-Alvarez; Samuele Giani; Pierre Vogel. Quantum calculations on the acid catalyzed rearrangements of norborn-5-en-2-one, 7-oxanorborn-5-en-2-one and 7-azanorborn-5-en-2-one - The electron-releasing effect of homoconjugated carbonyl group. *APPLIED CATALYSIS A-GENERAL*. 336 - 1-2, pp. 72 - 78. 03/2008. ISSN 0926-860X
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 14** Patrick Duffy; Jose A. Sordo; Feng Wang. Valence orbital response to pseudorotation of tetrahydrofuran: A snapshot using dual space analysis. *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*. 128 - 12, 03/2008. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 15** Angels Gonzalez-Lafont; Jose M. Lluch; Adrian Varela-Alvarez; Jose A. Sordo. Canonical variational transition-state theory study of the $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{CH}_3 + \text{OH}$ reaction. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B*. 112 - 2, pp. 328 - 335. 01/2008. ISSN 1520-6106
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 16** Pierre Vogel; Maris Turks; Laure Bouchez; Dean Markovic; Adrian Varela-Alvarez; Jose Angel Sordo. New organic chemistry of sulfur dioxide. *ACCOUNTS OF CHEMICAL RESEARCH*. 40 - 10, pp. 931 - 942. 10/2007. ISSN 0001-4842
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 17** C. Barrientos; J. A. Sordo. On the application of the counterpoise correction for the basis set superposition error in geometry optimization calculations of molecular systems: some inconsistent results. *THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS*. 118 - 3, pp. 733 - 738. 09/2007. ISSN 1432-881X
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 18** Jaime Fernandez Rico; Jose Manuel Garcia de la Vega; Jose Angel Sordo. Serafin Fraga honorary issue - Dedication. *THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS*. 118 - 3, pp. 449 - 449. 09/2007. ISSN 1432-881X
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 19** Pierre Vogel; Jose A. Sordo. Hetero-Diels-Alder and cheletropic additions of sulfur dioxide to conjugated dienes. Experimental facts and theoretical analysis. *CURRENT ORGANIC CHEMISTRY*. 10 - 16, pp. 2007 - 2036. 11/2006. ISSN 1385-2728
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 20** A. Cimas; V. M. Rayon; C. Barrientos; M. Aschi; J. A. Sordo; A. Largo. Reaction of N(D-2) atoms with bromomethyl radicals: A theoretical study. CHEMICAL PHYSICS. 328 - 1-3, pp. 45 - 52. 09/2006. ISSN 0301-0104
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 21** Dean Markovic; Adrian Varela-Alvarez; Jose Angel Sordo; Pierre Vogel. Mechanism of the diphenyldisulfone-catalyzed isomerization of alkenes. Origin of the chemoselectivity: Experimental and quantum chemistry studies. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 128 - 24, pp. 7782 - 7795. 06/2006. ISSN 0002-7863
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 22** MT Butterfield; T Durakiewicz; ID Prodan; GE Scuseria; E Guziewicz; JA Sordo; KN Kudin; RL Martin; JJ Joyce; AJ Arko; KS Graham; DP Moore; LA Morales. A comparison of hybrid density functional theory with photoemission of surface oxides of delta-plutonium. SURFACE SCIENCE. 600 - 8, pp. 1637 - 1640. 04/2006. ISSN 0039-6028
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 23** A Cimas; VM Rayon; C Barrientos; M Aschi; JA Sordo; A Largo. A computational study on the reaction of N(D-2) atoms with CH₂Cl radicals. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 422 - 1-3, pp. 276 - 281. 04/2006. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 24** A Cimas; VM Rayon; M Aschi; C Barrientos; JA Sordo; A Largo. On the reaction of ground-state nitrogen atoms with bromomethyl radicals: A computational study. INTERNATIONAL JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY. 249, pp. 451 - 461. 03/2006. ISSN 1387-3806
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 25** JA Sordo. The configuration interaction expansion is the exact solution of the electronic Schrodinger equation. JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION. 83 - 3, pp. 480 - 480. 03/2006. ISSN 0021-9584
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 26** V Cadierno; SE Garcia-Garrido; J Gimeno; A Varela-Alvarez; JA Sordo. Bis(allyl)-ruthenium(IV) complexes as highly efficient catalysts for the redox isomerization of allylic alcohols into carbonyl compounds in organic and aqueous media: Scope, limitations, and theoretical analysis of the mechanism. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 128 - 4, pp. 1360 - 1370. 02/2006. ISSN 0002-7863
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 27** A Cimas; VM Rayon; M Aschi; C Barrientos; JA Sordo; A Largo. Computational study of the reaction of N(D-2) atoms with CH₂F radicals: An example of a barrier-free reaction involving very high internal energies. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 123 - 11, 09/2005. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 28** A Varela-Alvarez; JA Sordo; GE Scuseria. Doping of polyaniline by acid-base chemistry: Density functional calculations with periodic boundary conditions. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 127 - 32, pp. 11318 - 11327. 08/2005. ISSN 0002-7863
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 29** A Cimas; VM Rayon; M Aschi; C Barrientos; JA Sordo; A Largo. A computational study of the reaction of ground-state nitrogen atoms with chloromethyl radicals. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 109 - 29, pp. 6540 - 6548. 07/2005. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 30** ID Prodan; GE Scuseria; JA Sordo; KN Kudin; RL Martin. Lattice defects and magnetic ordering in plutonium oxides: A hybrid density-functional-theory study of strongly correlated materials. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 123 - 1, 07/2005. ISSN 0021-9606



Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 31** VM Rayon; JA Sordo. Pseudorotation motion in tetrahydrofuran: An ab initio study. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 122 - 20, 05/2005. ISSN 0021-9606

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 32** B Prana; R Gomperts; JA Sordo. A theoretical study on the mechanism of the reaction between Cl atoms and nitrobenzene. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 392 - 1-3, pp. 236 - 241. 07/2004. ISSN 0009-2614

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 33** P Alvarez; E Lastra; J Gimeno; P Brana; JA Sordo; J Gomez; LR Falvello; M Bassetti. {Diastereoselective synthesis of the indenylruthenium(II) complexes $\{\text{Ru}(\eta\text{-C}_9\text{H}_7)\{\kappa(3)(\text{P},\text{C},\text{C})\text{-Ph}_2\text{P}(\text{CH}_2\text{CR}=\text{CH}_2)\}(\text{PPh}_3)\}\{\text{PF}_6\}$ (R = H, Me): Enantiofacial coordination, hemilabile properties, and diastereoselective nucleophilic additions to $\kappa(3)(\text{P},\text{C},\text{C})$ -allylphosphine ligands}. ORGANOMETALLICS. 23 - 12, pp. 2956 - 2966. 06/2004. ISSN 0276-7333

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 34** H Valdes; JA Sordo. The OCS center dot (HCCH)(2) van der Waals complex: ab initio predictions for the geometry and dynamics. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 387 - 4-6, pp. 428 - 432. 04/2004. ISSN 0009-2614

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 35** P Brana; J Gimeno; JA Sordo. {Unusual intramolecular $\{2+2\}$ cycloaddition of allyl and vinylidene C = C bonds under mild conditions: A theoretical analysis}. JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY. 69 - 7, pp. 2544 - 2550. 04/2004. ISSN 0022-3263

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 36** H Valdes; JA Sordo. The N2O center dot N2O, N2O center dot SO2, and (N2O)(2)center dot SO2 van der Waals complexes: An ab initio theoretical analysis. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 108 - 11, pp. 2062 - 2071. 03/2004. ISSN 1089-5639

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 37** P Brana; JA Sordo. Theoretical approach to the mechanism of reactions between halogen atoms and unsaturated hydrocarbons: The Cl plus propene reaction. JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. 24 - 16, pp. 2044 - 2062. 12/2003. ISSN 0192-8651

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 38** H Valdes; JA Sordo. (OCS)(3) van der Waals complex: A theoretical study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 107 - 39, pp. 7845 - 7851. 10/2003. ISSN 1089-5639

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 39** D Markovic; E Roversi; R Seoppelliti; P Vogel; R Meana; JA Sordo. The hetero-Diels-Alder addition of sulfur dioxide: The pseudo-chair conformation of a 4,5-dialkylsultine. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 9 - 20, pp. 4911 - 4915. 10/2003. ISSN 0947-6539

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 40** A Cimas; M Aschi; C Barrientos; VM Rayon; JA Sordo; A Largo. Computational study on the kinetics of the reaction of N(S-4) with CH2F. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 374 - 5-6, pp. 594 - 600. 06/2003. ISSN 0009-2614

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 41** H Valdes; JA Sordo. A theoretical analysis of the weakly bound complexes H3P center dot center dot center dot XY (XY = HBr, HCl, Br-2, BrCl), H3N center dot center dot center dot BrCl. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 371 - 3-4, pp. 386 - 393. 04/2003. ISSN 0009-2614



Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

- 42** H Valdes; JA Sordo. Trimethylene sulfide center dot center dot center dot (HCl)(n) (n=1, 2) complexes: A theoretical study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 107 - 6, pp. 899 - 907. 02/2003. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 43** F Monnat; P Vogel; R Meana; JA Sordo. Equilibrium and kinetic deuterium isotope effects on the hetero-Diels-Alder addition of sulfur dioxide. ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION. 42 - 33, pp. 3924 - 3927. 2003. ISSN 1433-7851
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 44** H Valdes; JA Sordo. Ab initio study on the (OCS)(2)center dot CO2 van der Waals trimers. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 106 - 15, pp. 3690 - 3701. 04/2002. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 45** H Valdes; JA Sordo. Ab initio and DFT studies on van der Waals trimers: The OCS center dot(CO2)(2) complexes. JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. 23 - 4, pp. 444 - 455. 03/2002. ISSN 0192-8651
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 46** F Monnat; P Vogel; VM Rayon; JA Sordo. Ab initio and experimental studies on the hetero-Diels-Alder and cheletropic additions of sulfur dioxide to (E)-1-methoxybutadiene: A mechanism involving three molecules of SO2. JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY. 67 - 6, pp. 1882 - 1889. 03/2002. ISSN 0022-3263
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 47** E Roversi; R Scopelliti; E Solari; R Estoppey; P Vogel; P Brana; B Menendez; JA Sordo. The hetero-Diels-Alder addition of sulfur dioxide to 1-fluorobuta-1,3-dienes: The sofa conformations preferred by 6-fluorosultines (6-fluoro-3,6-dihydro-1,2-oxathiin-2-oxides) enjoy enthalpic and conformational anomeric effects. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 8 - 6, pp. 1336 - 1355. 03/2002. ISSN 0947-6539
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 48** F Monnat; P Vogel; JA Sordo. Hetero-Diels-Alder and cheletropic additions of sulfur dioxide to 1,2-dimethylidenecycloalkanes. Determination of thermochemical and kinetics parameters for reactions in solution and comparison with estimates from quantum calculations. HELVETICA CHIMICA ACTA. 85 - 3, pp. 712 - 732. 2002. ISSN 0018-019X
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 49** B Menendez; VM Rayon; JA Sordo; A Cimas; C Barrientos; A Largo. The reaction of N(S-4) with CH2F: A comparative ab initio and DFT study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 105 - 43, pp. 9917 - 9925. 11/2001. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 50** B Menendez; VM Rayon; JA Sordo; A Cimas; C Barrientos; A Largo. The reaction of N(S-4) with CH2F: A comparative ab initio and DFT study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 105 - 43, pp. 23A - 24A. 11/2001. ISSN 1089-5647
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 51** P Brana; JA Sordo. Mechanistic aspects of the abstraction of an allylic hydrogen in the chlorine atom reaction with 2-methyl-1,3-butadiene (isoprene). JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 123 - 42, pp. 10348 - 10353. 10/2001. ISSN 0002-7863
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 52** H Valdes; VM Rayon; JA Sordo. High-level ab initio predictions of CO₂ center dot center dot center dot N₂O structure. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 84 - 1, pp. 78 - 85. 07/2001. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 53** VM Rayon; JA Sordo. Acetylene center dot center dot center dot sulfur dioxide van der Waals complexes: a theoretical study. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 341 - 5-6, pp. 575 - 584. 06/2001. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 54** JA Sordo. On the use of the Boys-Bernardi function counterpoise procedure to correct barrier heights for basis set superposition error. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM. 537 - SI, pp. 245 - 251. 03/2001. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 55** JM de la Vega; JA Sordo; IG Csizmadia. Professor Serafin Fraga - Dedication. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM. 537 - SI, pp. IX+ - IX+. 03/2001. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 56** JA Sordo. Performance of CCSDT for first row AB/AB(-) diatomics: Dissociation energies and electron affinities. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 114 - 5, pp. 1974 - 1980. 02/2001. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 57** H Valdes; JA Sordo. The pentamethylene sulfide center dot center dot center dot HCl dimer: a theoretical study. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 333 - 1-2, pp. 169 - 180. 01/2001. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 58** E Roversi; R Scopelliti; E Solari; R Estoppey; P Vogel; P Brana; B Menendez; JA Sordo. The hetero-Diels-Alder addition of sulfur dioxide: structure of the first crystalline sultine. Quantum calculations on the conformations of 6-fluoro-3,6-dihydro-1,2-oxathiine 2-oxides. CHEMICAL COMMUNICATIONS. 13, pp. 1214 - 1215. 2001. ISSN 1359-7345
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 59** P Brana; B Menendez; T Fernandez; JA Sordo. Potential energy surface for the chlorine atom reaction with ethylene: A theoretical study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 104 - 46, pp. 10842 - 10854. 11/2000. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 60** T Fernandez; D Suarez; JA Sordo; F Monnat; E Roversi; AE de Castro; K Schenk; P Vogel. Competition between hetero-Diels-Alder and chelotropic addition of sulfur dioxide. Theoretical and experimental substituent effects on the relative stability of 3,6-dihydro-1,2-oxathiin-2-oxides (sultines) and 2,5-dihydrothiophene-1,1-dioxides (sulfolenes). Anomeric effects in sultine and 6-substituted derivatives (vol 63, pg 9490, 1998). JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY. 65 - 16, pp. 5075 - 5076. 08/2000. ISSN 0022-3263
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 61** P Brana; B Menendez; T Fernandez; JA Sordo. The role of bridged structures in the mechanism of the reaction between chlorine atom and ethylene. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 325 - 5-6, pp. 693 - 697. 08/2000. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 62** D Feller; JA Sordo. Performance of CCSDT for diatomic dissociation energies. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 113 - 2, pp. 485 - 493. 07/2000. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 63** E Roversi; F Monnat; K Schenk; P Vogel; P Brana; JA Sordo. O-17 NMR spectroscopy of sulfolenes (2,5-dihydrothiophene-1,1-dioxides) and sultines (3,6-dihydro-1,2-oxathiin-2-oxides)-experiment and quantum calculations: Synthesis of 4,9-dioxo-1,2-oxathiacyclodecane-2-oxide, a new heterocycle. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 6 - 10, pp. 1858 - 1864. 05/2000. ISSN 0947-6539
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 64** D Feller; JA Sordo. A CCSDT study of the effects of higher order correlation on spectroscopic constants. I. First row diatomic hydrides. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 112 - 13, pp. 5604 - 5610. 04/2000. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 65** H Valdes; VM Rayon; JA Sordo. The tetrahydropyran center dot center dot center dot HCl dimer: a theoretical study. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 320 - 5-6, pp. 507 - 512. 04/2000. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 66** JA Sordo. CCSDT spectroscopic constants for first-row diatomic hydrides. ABSTRACTS OF PAPERS OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 219 - 1, pp. U605 - U605. 03/2000. ISSN 0065-7727
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 67** B Menendez; CDP Losada; JA Sordo; F Lopez-Ortiz; J Gonzalez. Cycloaddition reactions of imines with 1,3-dipoles. ABSTRACTS OF PAPERS OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 219 - 2, pp. U146 - U146. 03/2000. ISSN 0065-7727
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 68** JA Sordo. On the important role played by polarization functions in calculations involving hypervalent molecules. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 316 - 1-2, pp. 167 - 170. 01/2000. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 69** JC Lopez; JL Alonso; FJ Lorenzo; VM Rayon; JA Sordo. The tetrahydrofuran center dot center dot center dot hydrogen chloride complex: Rotational spectrum and theoretical analysis. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 111 - 14, pp. 6363 - 6374. 10/1999. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 70** H Valdes; VM Rayon; JA Sordo. On the violation of Legon-Millen's rules for predicting angular geometries of hydrogen-bonded dimers: an ab initio study. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 309 - 3-4, pp. 265 - 273. 08/1999. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 71** JA Sordo. Using fuzzy set theory to assess basis set quality. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 302 - 3-4, pp. 273 - 280. 03/1999. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 72** VM Rayon; JA Sordo. Cyclopropane center dot center dot center dot sulfur dioxide and ethylene center dot center dot center dot sulfur dioxide van der Waals complexes: A theoretical study. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 110 - 1, pp. 377 - 384. 01/1999. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 73** T Fernandez; D Suarez; JA Sordo; F Monnat; E Roversi; AE de Castro; K Schenk; P Vogel. Competition between hetero-Diels-Alder and cheletropic addition of sulfur dioxide. Theoretical and experimental substituent effects on the relative stability of 3,6-dihydro-1,2-oxathiin-2-oxides (sultines) and 2,5-dihydrothiophene-1,1-dioxides (sulfolenes). Anomeric effects in sultine and 6-substituted derivatives. JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY. 63 - 25, pp. 9490 - 9499. 12/1998. ISSN 0022-3263
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 74** T Fernandez; JA Sordo; F Monnat; B Deguin; P Vogel. Sulfur dioxide promotes its hetero-Diels-Alder and cheletropic additions to 1,2-dimethylidenecyclohexane. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 120 - 50, pp. 13276 - 13277. 12/1998. ISSN 0002-7863
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 75** JA Sordo. QUALITY: A program to assess basis set quality. COMPUTER PHYSICS COMMUNICATIONS. 113 - 1, pp. 85 - 104. 09/1998. ISSN 0010-4655
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 76** VM Rayon; JA Sordo. On the nature of the interaction in donor-acceptor van der Waals complexes: BH3 center dot center dot center dot CO, BF3 center dot center dot center dot CO, BH3 center dot center dot center dot NH3 and BF3 center dot center dot center dot NH3. THEOCHEM-JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. 426 - SI, pp. 171 - 179. 03/1998. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 77** D Suarez; JA Sordo. On the origin of the endo/exo selectivity in Diels-Alder reactions. CHEMICAL COMMUNICATIONS. 3, pp. 385 - 386. 02/1998. ISSN 1359-7345
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 78** VM Rayon; JA Sordo. On the validity of the counterpoise correction for the basis set superposition error including the fragment relaxation terms. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS. 99 - 1, pp. 68 - 70. 02/1998. ISSN 1432-881X
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 79** VM Rayon; JA Sordo. Methanol-sulfur dioxide van der Waals complexes. A theoretical study. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 107 - 19, pp. 7912 - 7920. 11/1997. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 80** VM Rayon; JA Sordo. Van der Waals complexes between boron trifluoride and carbon monoxide: A theoretical study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 101 - 40, pp. 7414 - 7419. 10/1997. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 81** JA Sordo. Ab initio investigation of internal rotation in the ethylene-sulfur dioxide dimer (vol 102, pg 4184, 1995). JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 106 - 14, pp. 6204 - 6204. 04/1997. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 82** MI Menendez; JA Sordo; TL Sordo. Theoretical study of the gas-phase addition of HF and HCl to ethylene: Analysis of the catalytic action of a second hydrogen halide molecule. THEOCHEM-JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. 371, pp. 91 - 95. 11/1996. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 83** D Suarez; TL Sordo; JA Sordo. Anomeric effect in 1,3-dioxole: A theoretical study. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 118 - 41, pp. 9850 - 9854. 10/1996. ISSN 0002-7863
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 84** D Suarez; JA Sordo; TL Sordo. Theoretical analysis of the decomposition of episulfones. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 100 - 32, pp. 13462 - 13465. 08/1996. ISSN 0022-3654
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 85** R Lopez; MF RuizLopez; D Rinaldi; JA Sordo; TL Sordo. Synthesis of beta-lactams from fluoroketenes and imines: Ab initio potential energy surfaces in gas phase and in solution. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 100 - 25, pp. 10600 - 10608. 06/1996. ISSN 0022-3654
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 86** R Lopez; JA Sordo; TL Sordo; PV Schleyer. Ab initio study of the formation of $C_3H_3^+$ from the reaction of CH_3^+ with acetylene. JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. 17 - 7, pp. 905 - 909. 05/1996. ISSN 0192-8651
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 87** D Suarez; R Lopez; J Gonzalez; TL Sordo; JA Sordo. Ab initio study of the effect of CH center dot center dot center dot O hydrogen bonding on the exo/endo stereoselectivity of Diels-Alder reactions of 2-substituted-1,3-dienes with sulfur dioxide. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 57 - 3, pp. 493 - 499. 02/1996. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 88** E Iglesias; TL Sordo; JA Sordo. Does a cooperative mechanism explain the unusually large gas-solid structure differences found for $HCN...BF_3$?. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 248 - 3-4, pp. 179 - 181. 01/1996. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 89** D Suarez; E Iglesias; TL Sordo; JA Sordo. Mechanism of cheletropic reactions of 1,3-dienes with sulfur dioxide. JOURNAL OF PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY. 9 - 1, pp. 17 - 20. 01/1996. ISSN 0894-3230
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 90** J Gonzalez; TL Sordo; JA Sordo. The role of hard Lewis acids in the tuning of the exo/endo stereoselectivity in Diels-Alder reactions: Ab initio calculations. THEOCHEM-JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. 358, pp. 23 - 27. 12/1995. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 91** D SUAREZ; E IGLESIAS; TL SORDO; JA SORDO. HETERO-DIELS-ALDER ADDITIONS OF SULFUR-DIOXIDE TO 1,3-DIENES - A PROPOSAL FOR A NEW REACTIVE DIENE FROM AB-INITIO CALCULATIONS. TETRAHEDRON. 51 - 46, pp. 12661 - 12666. 11/1995. ISSN 0040-4020
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 92** R LOPEZ; D SUAREZ; MF RUIZLOPEZ; J GONZALEZ; JA SORDO; TL SORDO. SOLVENT EFFECTS ON THE STEREOSELECTIVITY OF KETENE-IMINE CYCLOADDITION REACTIONS. JOURNAL OF THE CHEMICAL SOCIETY-CHEMICAL COMMUNICATIONS. 16, pp. 1677 - 1678. 08/1995. ISSN 0022-4936
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 93** MI MENENDEZ; D SUAREZ; JA SORDO; TL SORDO. THEORETICAL-STUDY OF THE GAS-PHASE ADDITION OF HF AND HCL TO ETHYLENE - ANALYSIS OF THE CATALYTIC ACTION OF DIMERIC HALIDES. JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. 16 - 6, pp. 659 - 666. 06/1995. ISSN 0192-8651
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 94** D SUAREZ; TL SORDO; JA SORDO. A COMPARATIVE-ANALYSIS OF THE MECHANISMS OF CHELETROPIC AND DIELS-ALDER REACTIONS OF 1,3-DIENES WITH SULFUR-DIOXIDE - KINETIC AND THERMODYNAMIC CONTROLS. JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY. 60 - 9, pp. 2848 - 2852. 05/1995. ISSN 0022-3263
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 95** X ASSFELD; R LOPEZ; MF RUIZLOPEZ; J GONZALEZ; TL SORDO; JA SORDO. AB-INITIO STUDIES ON THE MECHANISM OF THE CYCLOADDITION REACTION OF FLUOROKETENE WITH IMINES - SUBSTITUENT EFFECTS - COMMENT. THEOCHEM-JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. 331 - 1-2, pp. 1 - 2. 01/1995. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 96** R LOPEZ; JA SORDO; TL SORDO. ON THE EFFECT OF BASIS-SET QUALITY ON THE DESCRIPTION OF TRANSITION STRUCTURES - THE PI-ATTACK OF CH₃⁺ TO C₂H₂. THEOCHEM-JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. 330, pp. 381 - 384. 01/1995. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 97** D SUAREZ; J GONZALEZ; TL SORDO; JA SORDO. AB-INITIO STUDY OF THE THERMAL AND LEWIS ACID-CATALYZED HETERO-DIELS-ALDER REACTIONS OF 1,3-BUTADIENE AND ISOPRENE WITH SULFUR-DIOXIDE. JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY. 59 - 26, pp. 8058 - 8064. 12/1994. ISSN 0022-3263
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 98** J BARLUENGA; TL SORDO; JA SORDO; S FUSTERO; J GONZALEZ. AN AM1 STUDY ON PI-FACIAL SELECTIVITY IN DIELS-ALDER REACTIONS OF 2-AZA-1,3-DIENES WITH AZODIENOPHILES. THEOCHEM-JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. 121, pp. 63 - 69. 12/1994. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 99** MI MENENDEZ; J GONZALEZ; JA SORDO; TL SORDO. THEORETICAL-ANALYSIS OF THE THERMAL AND LEWIS-ACID CATALYZED-REACTIONS OF BUTADIENE AND ACROLEIN. THEOCHEM-JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. 120 - 3, pp. 241 - 245. 11/1994. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 100** D SUAREZ; X ASSFELD; J GONZALEZ; MF RUIZLOPEZ; TL SORDO; JA SORDO. SOLVENT EFFECTS ON HETERO-DIELS-ALDER REACTIONS OF SULFUR-DIOXIDE WITH 1,3-DIENES. JOURNAL OF THE CHEMICAL SOCIETY-CHEMICAL COMMUNICATIONS. 14, pp. 1683 - 1684. 07/1994. ISSN 0022-4936
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 101** E IGLESIAS; TL SORDO; JA SORDO. MOLECULAR ASSOCIATIONS FROM AB-INITIO PAIR POTENTIALS .1. A NONSTATISTICAL APPROACH BASED ON A MINIMUM ENERGY CRITERION. THEOCHEM-JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. 115 - 2, pp. 81 - 91. 06/1994. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 102** E IGLESIAS; TL SORDO; JA SORDO. MOLECULAR ASSOCIATIONS FROM AB-INITIO PAIR POTENTIALS .2. A NEW HYDROPHILICITY SCALE FOR AMINO-ACIDS. THEOCHEM-JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. 115 - 2, pp. 93 - 103. 06/1994. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 103** MI MENENDEZ; J GONZALEZ; JA SORDO; TL SORDO. THEORETICAL-ANALYSIS OF THE EFFECT OF LEWIS-ACID CATALYSTS ON REACTIVITY IN THE DIELS-ALDER REACTION OF 2-AZABUTADIENE WITH ETHYLENE. THEOCHEM-JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. 115 - 3, pp. 295 - 299. 06/1994. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 104** X ASSFELD; MF RUIZLOPEZ; J GONZALEZ; R LOPEZ; JA SORDO; TL SORDO. THEORETICAL-ANALYSIS OF THE ROLE OF THE SOLVENT ON THE REACTION-MECHANISMS - ONE-STEP VERSUS 2-STEP KETENE-IMINE CYCLOADDITION. JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. 15 - 5, pp. 479 - 487. 05/1994. ISSN 0192-8651
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 105** D SUAREZ; TL SORDO; JA SORDO. AB-INITIO STUDY OF THE LEWIS ACID-CATALYZED DIELS-ALDER REACTION OF SULFUR-DIOXIDE WITH ISOPRENE - REGIOSELECTIVITY AND STEREOSELECTIVITY. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 116 - 2, pp. 763 - 764. 01/1994. ISSN 0002-7863
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 106** DB COOK; JA SORDO; TL SORDO. SOME COMMENTS ON THE COUNTERPOISE CORRECTION FOR THE BASIS-SET SUPERPOSITION ERROR AT THE CORRELATED LEVEL. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 48 - 6, pp. 375 - 384. 12/1993. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 107** R LOPEZ; TL SORDO; JA SORDO; J GONZALEZ. TORQUELECTRONIC EFFECT IN THE CONTROL OF THE STEREOSELECTIVITY OF KETENE IMINE CYCLOADDITION REACTIONS. JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY. 58 - 25, pp. 7036 - 7037. 12/1993. ISSN 0022-3263
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 108** R LOPEZ; JA SORDO; TL SORDO. UNFAVORABLE ORBITAL OVERLAP AT THE TRANSITION-STATE OF A SYMMETRY ALLOWED REACTION - A THEORETICAL-ANALYSIS. JOURNAL OF THE CHEMICAL SOCIETY-CHEMICAL COMMUNICATIONS. 23, pp. 1751 - 1753. 12/1993. ISSN 0022-4936
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 109** X ASSFELD; JA SORDO; J GONZALEZ; MF RUIZLOPEZ; TL SORDO. ELECTROSTATIC SOLVENT EFFECT ON THE KETENE-IMINE CYCLOADDITION REACTION. THEOCHEM-JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. 106, pp. 193 - 199. 11/1993. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 110** R LOPEZ; MI MENENDEZ; D SUAREZ; TL SORDO; JA SORDO. ANACAL - A PROGRAM TO CARRY OUT A CONFIGURATIONAL ANALYSIS OF THE WAVE-FUNCTION OF REACTIVE SYSTEMS. COMPUTER PHYSICS COMMUNICATIONS. 76 - 2, pp. 235 - 249. 07/1993. ISSN 0010-4655
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 111** JA SORDO; J GONZALEZ; TL SORDO. AN ABINITIO STUDY ON THE MECHANISM OF THE KETENE IMINE CYCLOADDITION REACTION. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 114 - 15, pp. 6249 - 6251. 07/1992. ISSN 0002-7863
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 112** MI MENENDEZ; JA SORDO; TL SORDO. ACID-CATALYZED HYDROGENATION OF ETHYLENE - A THEORETICAL-ANALYSIS OF BIFUNCTIONAL CATALYSIS. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. 96 - 3, pp. 1185 - 1188. 02/1992. ISSN 0022-3654
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 113** R LOPEZ; JA SORDO; TL SORDO. THEORETICAL-STUDY OF THE FORMATION OF CYCLOPROPENYL CATION FROM CH⁺ AND ACETYLENE. THEOCHEM-JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. 86, pp. 443 - 451. 02/1992. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 114** TL SORDO; JA SORDO. ON THE COMPARISON OF RESULTS PROVIDED BY DIFFERENT BASIS SET QUALITY CRITERIA. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM. 85, pp. 17 - 23. 01/1992. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 115** TL SORDO; JA SORDO. ON THE QUALITY OF BASIS-SETS. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 41 - 2, pp. 327 - 337. 01/1992. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 116** E IGLESIAS; TL SORDO; JA SORDO. MOLECULAR ASSOCIATIONS FROM ABINITIO PAIR POTENTIALS. COMPUTER PHYSICS COMMUNICATIONS. 67 - 2, pp. 268 - 284. 12/1991. ISSN 0010-4655
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 117** TL SORDO; JA SORDO. BASIS SET QUALITY - A COMPARATIVE-ANALYSIS. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM. 81 - 3-4, pp. 311 - 320. 10/1991. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 118** TL SORDO; JA SORDO. SOME COMMENTS ON THE DELTA-QUALITY TEST. THEOCHEM-JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. 74, pp. 343 - 347. 04/1991. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 119** TL SORDO; JA SORDO; S FRAGA. NUCLEAR-MASS DEPENDENT SPIN-ORBIT INTERACTION. CANADIAN JOURNAL OF PHYSICS. 69 - 2, pp. 161 - 163. 02/1991. ISSN 0008-4204
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 120** TL SORDO; JA SORDO; R FLOREZ. THEORETICAL-STUDY OF ADSORPTION OF HYDROCARBONS ON GRAPHITE. JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. 11 - 3, pp. 291 - 296. 04/1990. ISSN 0192-8651
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 121** DB COOK; TL SORDO; JA SORDO. ON THE BOYS-BERNARDI METHOD TO CORRECT INTERACTION ENERGIES CALCULATED USING MOLLER-PLESSET PERTURBATION-THEORY. JOURNAL OF THE CHEMICAL SOCIETY-CHEMICAL COMMUNICATIONS. 2, pp. 185 - 186. 01/1990. ISSN 0022-4936
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 122** GM FERNANDEZ; JA SORDO; TL SORDO. CHARGE-TRANSFER IN LEWIS ACID-BASE REACTIONS - A MO STUDY OF THE H-3+ SYSTEM. JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION. 66 - 11, pp. 898 - 900. 11/1989. ISSN 0021-9584
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 123** JA SORDO; TL SORDO; GM FERNANDEZ; R GOMPERS; S CHIN; E CLEMENTI. A SYSTEMATIC STUDY ON THE BASIS SET SUPERPOSITION ERROR IN THE CALCULATION OF INTERACTION ENERGIES OF SYSTEMS OF BIOLOGICAL INTEREST. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 90 - 11, pp. 6361 - 6370. 06/1989. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 124** S FRAGA; E SANFABIAN; JA SORDO; M CAMPILLO; JD CLIMENHAGA; M KLOBUKOWSKI. ATOMIC-ENERGY LEVELS FROM CONFIGURATION-INTERACTION CALCULATIONS WITH RELATIVISTIC CORRECTIONS. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 35 - 2, pp. 325 - 330. 02/1989. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 125** GM FERNANDEZ; JA SORDO; TL SORDO. ANALYSIS OF POTENTIAL-ENERGY SURFACES. JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION. 65 - 8, pp. 665 - 667. 08/1988. ISSN 0021-9584
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 126** JA SORDO; S CHIN; TL SORDO. ON THE COUNTERPOISE CORRECTION FOR THE BASIS SET SUPERPOSITION ERROR IN LARGE SYSTEMS. THEORETICA CHIMICA ACTA. 74 - 2, pp. 101 - 110. 08/1988. ISSN 0040-5744
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 127** MI MENENDEZ; R LOPEZ; TL SORDO; JA SORDO. AN ALTERNATIVE METHOD TO ASSESS THE QUALITY OF HARTREE-FOCK-ROOTHAAN WAVE-FUNCTIONS. THEOCHEM-JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. 43, pp. 75 - 80. 06/1988. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 128** S FRAGA; M KLOBUKOWSKI; J MUSZYNSKA; KMS SAXENA; JA SORDO; JD CLIMENHAGA; P CLARK. RESEARCH IN ATOMIC-STRUCTURE - A CONFIGURATION-INTERACTION PROGRAM WITH RELATIVISTIC CORRECTIONS. COMPUTER PHYSICS COMMUNICATIONS. 47 - 1, pp. 159 - 172. 10/1987. ISSN 0010-4655
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 129** JA SORDO; M PROBST; G CORONGIU; S CHIN; E CLEMENTI. ABINITIO PAIR POTENTIALS FOR THE INTERACTIONS BETWEEN ALIPHATIC AMINO-ACIDS. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 109 - 6, pp. 1702 - 1708. 03/1987. ISSN 0002-7863
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 130** LAG BERNARDO; JA SORDO. NEW SLATER-TYPE ORBITAL BASIS-SETS FOR 1ST ROW TRANSITION-ELEMENTS. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 85 - 3, pp. 1475 - 1483. 08/1986. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 131** S FRAGA; M KLOBUKOWSKI; J MUSZYNSKA; KMS SAXENA; JA SORDO. MATRIX-ELEMENTS OF THE BREIT HAMILTONIAN. PHYSICAL REVIEW A. 34 - 1, pp. 23 - 28. 07/1986. ISSN 1050-2947
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 132** JA SORDO; S FRAGA. MOLECULAR ASSOCIATIONS - VALUES OF THE EXPANSION PARAMETERS FOR NEW CLASSES OF ATOMS. JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. 7 - 1, pp. 55 - 57. 02/1986. ISSN 0192-8651
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 133** JA SORDO; L PUEYO. A QUALITY TEST FOR THE HARTREE-FOCK-ROOTHAAN SCF WAVE-FUNCTIONS. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 28 - 6, pp. 687 - 690. 1985. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 134** JA SORDO; M KLOBUKOWSKI; S FRAGA. A THEORETICAL SIMULATION OF BULK WATER - THE EFFECT OF THE DISPERSION-ENERGY CONTRIBUTION. CANADIAN JOURNAL OF PHYSICS. 63 - 9, pp. 1264 - 1265. 1985. ISSN 0008-4204
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 135** JA SORDO; L PUEYO. AN EXERCISE ON THE THEORY OF COMPLEX SPECTRA. JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION. 62 - 6, pp. 468 - 472. 1985. ISSN 0021-9584
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 136** JA SORDO; L PUEYO. HIGH-QUALITY HARTREE-FOCK-ROOTHAAN WAVE-FUNCTIONS FOR MOLECULAR CALCULATIONS. THEOCHEM-JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. 21 - FEB, pp. 9 - 13. 1985. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 137** JA SORDO; FG BELTRAN; L PUEYO. ON THE ELECTRONIC-STRUCTURE OF THE NI-2(4+) ION AND ITS RELATION TO THE METAL METAL-BONDING IN BINUCLEAR NI(II) COMPLEXES. JOURNAL OF SOLID STATE CHEMISTRY. 59 - 2, pp. 220 - 227. 1985. ISSN 0022-4596
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 138** JA SORDO; M KLOBUKOWSKI; S FRAGA. THEORETICAL-STUDY OF THE TAUTOMERIC EQUILIBRIUM OF 4(1H)-PYRIDINONE IN SOLUTION. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 107 - 25, pp. 7569 - 7572. 1985. ISSN 0002-7863
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 139** GM FERNANDEZ; JA SORDO; TL SORDO. TRAJECTORY CALCULATIONS BY THE ROLLING BALL MODEL. JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION. 62 - 6, pp. 491 - 494. 1985. ISSN 0021-9584
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 140** JA SORDO; FG BELTRAN; L PUEYO. CRYSTAL-FIELD CALCULATION OF THE 3D MULTIPLTS OF THE BINUCLEAR NI(II) MONOTHIOCARBOXYLATES. JOURNAL OF SOLID STATE CHEMISTRY. 47 - 3, pp. 350 - 360. 1983. ISSN 0022-4596
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 141** FG BELTRAN; JA SORDO; L PUEYO. TRANSFERABILITY OF EMPIRICAL CRYSTAL-FIELD PARAMETERS OF NI(II) COMPLEXES OF DIFFERENT SYMMETRIES. JOURNAL OF SOLID STATE CHEMISTRY. 44 - 3, pp. 298 - 306. 1982. ISSN 0022-4596
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 142** JA SORDO; J BERTRAN. IMPORTANCE OF SITE OF CHANGE TRANSFER IN DIELS-ALDER REACTION. ANALES DE QUIMICA. 74 - 2, pp. 333 - 335. 1978. ISSN 1130-2283
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 143** J. González; J.A. Sordo. RECENT RESEARCH DEVELOPMENTS IN ORGANIC CHEMISTRY. THEORETICAL RESULTS ON HETERO-DIELS-ALDER REACTIONS. TRANS. RES. NET., 1997.
Tipo de producción: Capítulo de libro
- 144** T.L. Sordo; C. Barrientos. STRUCTURE, INTERACTIONS, AND REACTIVITY. BASIS SETS. ELSEVIER, 1992.
Tipo de producción: Capítulo de libro **Tipo de soporte:** Libro
- 145** T.L. Sordo; J.A. Sordo. TRENDS IN ATOMIC AND MOLECULAR PHYSICS. A COMPARATIVE STUDY OF THE QUALITY OF BASIS SETS. UAM, 1990.
Tipo de producción: Capítulo de libro **Tipo de soporte:** Libro
- 146** L.A.G. Bernardo; T.L. Sordo; J.A. Sordo. QUÍMICA TEÓRICA. FUNCIONES DE BASE. CSIC, 1987.
Tipo de producción: Capítulo de libro **Tipo de soporte:** Libro
- 147** J.A. Sordo; M. Probst; S. Chin; G. Corongiu. NON-EMPIRICAL PAIR POTENTIALS FOR THE INTERACTION BETWEEN AMINO ACIDS. STRUCTURE AND DYNAMICS OF NUCLEIC ACIDS, PROTEINS, AND MEMBRANES. Plenum Pu. Co., 1986.
Tipo de producción: Capítulo de libro **Tipo de soporte:** Libro
- 148** S. Fraga; M. Klobukowski; J. Muszynska; E. San Fabián; K.M.S. Saxena; J.A. Sordo; T.L. Sordo. RESEARCH IN ATOMIC STRUCTURE. LECTURES NOTES IN CHEMISTRY. Springer Verlag, 1993.
Tipo de producción: Libro o monografía científica **Tipo de soporte:** Libro
- 149** I.G. Csizmadia; J.M. García de la Vega; J.A. Sordo. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE (THEOCHEM). COMPUTATIONAL QUANTUM CHEMISTRY: FROM ATOMS TO PROTEINS. Elsevier, 2001.
Tipo de producción: Editor **Tipo de soporte:** Revista



Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

- 1 Título del trabajo:** Gas-phase reactions of metal monocations with CH₃X (X = Cl, Br): Mechanism for the C-X bond activation
Nombre del congreso: ESPA-2014
Ciudad de celebración: Badajoz,
Fecha de celebración: 2014
C. Barrientos; P. Redondo; A. Largo; V.M. Rayon; G. Molpeceres; Jose A. Sordo. "Proceedings". 2013.
- 2 Título del trabajo:** Reactivity of alkaline-earth monocations with halomethane molecules: a computational kinetic study
Nombre del congreso: WATOC-2014
Ciudad de celebración: Santiago de Chile,
Fecha de celebración: 2014
C. Barrientos; P. Redondo; A. Largo; V.M. Rayon; G. Molpeceres; Jose A. Sordo. "Proceedings". 2013.
- 3 Título del trabajo:** C-F bond activation by main-fourth-period mono-cations
Nombre del congreso: QUITEL-2013
Ciudad de celebración: Granada,
Fecha de celebración: 2013
P. Redondo; C. Barrientos; V.M. Rayon; A. Largo; Jose A. Sordo. "Proceedings". 2013.
- 4 Título del trabajo:** C-F bond activation by main-fourth-period mono-cations
Nombre del congreso: QUITEL-2012
Ciudad de celebración: Natal, Brasil
Fecha de celebración: 2012
P. Redondo; C. Barrientos; V.M. Rayón; A. Largo; J.A. Sordo. "Proceedings". 2012.
- 5 Título del trabajo:** Chemistry of sulfur dioxide: desulfination of unsaturated sulfinic acids
Nombre del congreso: QUITEL-2012
Ciudad de celebración: Natal,
Fecha de celebración: 2012
A. Vareela-Alvarez; D. Markovic; P. Vogel; A. Largo; J.A. Sordo. "Proceedings". 2012.
- 6 Título del trabajo:** Gas phase reactions between fluoromethane and third-row monocations
Nombre del congreso: QUITEL-2011
Ciudad de celebración: Mexico,
Fecha de celebración: 2011
P. Redondo; C. Barrientos; V.M. Rayón; J.A. Sordo. "Proceedings". 2011.
- 7 Título del trabajo:** Ruthenium(IV)-catalyzed isomerization of the C=C bond of O-allylic substrates: a combined theoretical and experimental study
Nombre del congreso: QUITEL-2011
Ciudad de celebración: Mexico,
Fecha de celebración: 2011
Jose A. Sordo; A. Varela-Álvarez; E. Piedra; N.Nebra; V. Cadierno; J. Gimeno. "Proceedings". 2011.



- 8** **Título del trabajo:** C-F bond activation by alkaline-earth metal cations: Kinetics and Mechanisms
Nombre del congreso: 36ème CHITEL
Ciudad de celebración: Pau,
Fecha de celebración: 2010
V.M. Rayón; A. Largo; A. Varela-Álvarez; C. Barrientos; P. Redondo; J.A. Sordo. "Proceedings". 2010.
- 9** **Título del trabajo:** Comparative kinetical study of the C-H bond activation in methyl fluoride by trid-row cations in gas phase
Nombre del congreso: ESPA 2010
Ciudad de celebración: Oviedo,
Fecha de celebración: 2010
P. Redondo; C. Barrientos; V.M. Rayón; A. Largo; J.A. Sordo. "Proceedings". 2010.
- 10** **Título del trabajo:** Ruthenium(IV)-catalyzed isomerization of the C=C bond of O-allylic substrates: A combined theoretical and experimental study
Nombre del congreso: WATOC-2011
Ciudad de celebración: Santiago de Compostel,
Fecha de celebración: 2010
A. Varela-Álvarez; E. Piedra; N. Nebra; V. Cadierno; J.A. Sordo. "Proceedings". 2010.
- 11** **Título del trabajo:** C-F bond activation in methyl fluoride by alkaline-earth metal cations: análisis of the potencial energy hypersurface and kinetics calculations
Nombre del congreso: QUITEL09
Ciudad de celebración: San Andrés, Colombia
Fecha de celebración: 2009
P. Redondo; A. Varela-Álvarez; J.A. Sordo; A. Largo; C. Barrientos; V.M. Rayón. "Proceedings". 2009.
- 12** **Título del trabajo:** Estudio termodinámico y cinético de la reacción entre fluorometano y el monocatión calcio
Nombre del congreso: 7th Seminars of Advanced Studies on Molecular Design and Bioinformatics
Ciudad de celebración: La Habana, Cuba
Fecha de celebración: 2009
A. Varela-Álvarez; V.M. Rayón; P. Redondo; C. Barrientos; J.A. Sordo. "Proceedings". 2009.
- 13** **Título del trabajo:** Computational study of the reactivity of metal cations with methyl fluoride
Nombre del congreso: Electronic Structure, Principles and Applications 2008
Ciudad de celebración: P. Mallorca,
Fecha de celebración: 2008
C. Barrientos; A. Varela-Álvarez; V.M. Rayón; P. Redondo; L. Largo; A. Cimas; J.A. Sordo. "Proceedings". 2008.
- 14** **Título del trabajo:** Gas-phase reactivity of bare metal cations with CH₃F: the importante of formation of intermediates in chemiscal reactivity
Nombre del congreso: Electronic Structure, Principles and Applications 2008
Ciudad de celebración: P. Mallorca,
Fecha de celebración: 2008
C. Barrientos; A. Varela-Álvarez; V.M. Rayón; P. Redondo; L. Largo; A. Cimas; J.A. Sordo. "Proceedings". 2008.



- 15 Título del trabajo:** New Organic Chemistry of Sulfur Dioxide: A synergic combination of experimental and computational treatments
Nombre del congreso: WATOC 2008. Eighth triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists
Ciudad de celebración: Sydney, Australia
Fecha de celebración: 2008
J.A. Sordo. "Proceedings". 2008.
- 16 Título del trabajo:** Sulfur dioxide chemistry: retro-ene mechanism
Nombre del congreso: Electronic Structure, Principles and Applications 2008
Ciudad de celebración: P. Mallorca,
Fecha de celebración: 2008
A. Varela-Álvarez; J.A. Sordo. "Proceedings". 2008.
- 17 Título del trabajo:** Doping of polyaniline: a new mechanism
Nombre del congreso: Electronic Structure, Principles and Applications 2006
Ciudad de celebración: Sant. de Compostela,
Fecha de celebración: 2006
A. Varela-Álvarez; J.A. Sordo. "Proceedings". 2006.
- 18 Título del trabajo:** Doping of polyaniline: a theoretical analysis
Nombre del congreso: Electronic Structure, Principles and Applications 2006
Ciudad de celebración: Sant. de Compostela,
Fecha de celebración: 2006
A. Varela-Álvarez; J.A. Sordo. "Proceedings". 2006.
- 19 Título del trabajo:** A new strategy for polyol selective semi-protection using polysulfones as neutral organocatalysts
Nombre del congreso: Workshop on Hydrogen bonding (IUPAC)
Ciudad de celebración: Pisa, Italia
Fecha de celebración: 2005
J.A. Sordo. "Proceedings". 2005.
- 20 Título del trabajo:** New insights into the mechanism of catalyzed redox isomerization of allyl alcohols into carbonyl compounds
Nombre del congreso: User's Meeting CSCS
Ciudad de celebración: Manno, Suiza
Fecha de celebración: 2005
A. Varela-Álvarez; J.A. Sordo. "Proceedings". 2005.
- 21 Título del trabajo:** "The use of symmetry-adapted perturbation theory (SAPT) methods for the decomposition of hydrogen bonding and other intermolecular interactions"
Nombre del congreso: 28th Internacional Symposium on Free Radicals
Ciudad de celebración: Leysin, Suiza
Fecha de celebración: 2005
J.A. Sordo. "Proceedings". 2005.
- 22 Título del trabajo:** "Doping polyaniline by acid-base chemistry: ab initio calculations with periodic boundary conditions"
Nombre del congreso: American Chemical Society meeting
Ciudad de celebración: California,



Fecha de celebración: 2004

G.E. Scuseria; A. Varela-Álvarez; J.A. Sordo. "Proceedings". 2004.

23 Título del trabajo: "Hybrid DFT studies of PuO₂ and Pu₂O₃"

Nombre del congreso: Sanibel Symposium

Ciudad de celebración: Florida,

Fecha de celebración: 2004

I. Prodan; G.E. Scuseria; K.N. Kudin; J.A. Sordo; R.L. Martin. "Proceedings". 2004.

24 Título del trabajo: "Radical-radical reactions involving very high internal energies: a computational study of N(2D) + CH₂F"

Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications

Ciudad de celebración: Valladolid,

Fecha de celebración: 2004

A. Cimas; V.M. Rayón; M. Aschi; J.A. Sordo; A. Largo. "Proceedings". 2004.

25 Título del trabajo: "The Ramberg-Bäcklund reaction: an ab initio mechanistic study"

Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications

Ciudad de celebración: Valladolid,

Fecha de celebración: 2004

R.Meana; J.A. Sordo. "Proceedings". 2004.

26 Título del trabajo: "The Ramberg-Bäcklund reaction: an ab initio mechanistic study"

Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications

Ciudad de celebración: Valladolid,

Fecha de celebración: 2004

R.Meana; J.A. Sordo. "Proceedings". 2004.

27 Título del trabajo: "Theoretical investigation of the N(4S; 2D) + CH₂X(X = Cl, Br) reactions: a comparative ab initio and DFT study"

Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications

Ciudad de celebración: Valladolid,

Fecha de celebración: 2004

A. Cimas; V.M. Rayón; J.A. Sordo; C. Barrientos; A. Largo. "Proceedings". 2004.

28 Título del trabajo: "Theoretical investigation of the N(4S; 2D) + CH₂X(X = Cl, Br) reactions: a comparative ab initio and DFT study"

Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications

Ciudad de celebración: Valladolid,

Fecha de celebración: 2004

A. Cimas; V.M. Rayón; J.A. Sordo; C. Barrientos; A. Largo. "Proceedings". 2004.

29 Título del trabajo: "Theoretical study on the kinetics of the N(4S) + CH₂F(2A') reaction"

Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications

Ciudad de celebración: Valladolid,

Fecha de celebración: 2004

A. Cimas; M. Aschi; C. Barrientos; V.M. Rayón; J.A. Sordo; A. Largo. "Proceedings". 2004.

30 Título del trabajo: "Theoretical study on the kinetics of the N(4S) + CH₂F(2A') reaction"

Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications

Ciudad de celebración: Valladolid,



Fecha de celebración: 2004

A. Cimas; M. Aschi; C. Barrientos; V.M. Rayón; J.A. Sordo; A. Largo. "Proceedings". 2004.

31 Título del trabajo: "Why study weakly-bound systems?"

Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications

Ciudad de celebración: Valladolid,

Fecha de celebración: 2004

J.A. Sordo. "Proceedings". 2004.

32 Título del trabajo: "Why study weakly-bound systems?"

Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications

Ciudad de celebración: Valladolid,

Fecha de celebración: 2004

J.A. Sordo. "Proceedings". 2004.

33 Título del trabajo: "Hybrid DFT studies of PuO₂ and Pu₂O₃"

Nombre del congreso: XIth International Congress of Quantum Chemistry

Ciudad de celebración: Bonn, Alemania

Fecha de celebración: 2003

I. Prodan; J. A. Sordo; K.N. Kudin; G.E. Scuseria; R.L. Martin. "Proceedings". 2003.

34 Título del trabajo: "Hybrid DFT studies of bulk plutonium dioxide"

Nombre del congreso: Fall meeting of the Materials Research Society

Ciudad de celebración: Boston,

Fecha de celebración: 2003

I. Prodan; G.E. Scuseria; K.N. Kudin; J. A. Sordo; G.E. Scuseria; R.L. Martin. "Proceedings". 2003.

35 Título del trabajo: "Kinetic isotopic effects for the Diels-Alder Reactions between dienes and sulfur dioxide"

Nombre del congreso: Visiting Seminars

Ciudad de celebración: Houston,

Fecha de celebración: 2002

R. Meana; J. A. Sordo. 2002.

36 Título del trabajo: "The hetero-Diels-Alder additions of SO₂ to

1-[(2H₂)-methylidene-2-methylidencyclohexane: concerted vs. stepwise mechanism"

Nombre del congreso: ESPA2002 Electronic Structure: Principles and Applications

Ciudad de celebración: Sevilla, España

Fecha de celebración: 2002

R. Meana; F. Monnat; P. Vogel; J. A. Sordo. "Proceedings". 2002.

37 Título del trabajo: "Estudio comparativo ab initio y DFT de la reacción (4S)N + CH₂F"

Nombre del congreso: Journées des utilisateurs de CSCS

Ciudad de celebración: Manno, Suiza

Fecha de celebración: 2001

A. Cimas; C. Barrientos; A. Largo; B. Menéndez; J. A. Sordo. "Proceedings". 2001.

38 Título del trabajo: "Some recent results on the research carried out at the Universidad de Oviedo"

Nombre del congreso: 27ème congrès des CHImistes Théoriciens d'Expression Latine

Ciudad de celebración: Toulouse, Francia

Fecha de celebración: 2001

J. A. Sordo. "Proceedings". 2001.



- 39 Título del trabajo:** "Cycloaddition Reactions of Imines with 1,3-Dipoles"
Nombre del congreso: ACS National Meeting
Ciudad de celebración: San Francisco,
Fecha de celebración: 2000
B. Menéndez; C. del Pozo; J. A. Sordo; F. López-Ortiz; J. González. "Proceedings". 2000.
- 40 Título del trabajo:** "Hetero-Diels-Alder and Cheletropic Reactions Between 1-Fluorobutadiene and Sulfur Dioxide: A Theoretical Study"
Nombre del congreso: Third European Conference on Computational Chemistry EUCO-CC3
Ciudad de celebración: Budapest, Hungría
Fecha de celebración: 2000
P. Braña; B. Menéndez; J. A. Sordo. "Proceedings". 2000.
- 41 Título del trabajo:** "High Level CCSDT/cc-pVXZ (X= D, T, Q) Calculations on Diatomic Molecules"
Nombre del congreso: ACS National Meeting
Ciudad de celebración: San Francisco,
Fecha de celebración: 2000
J. A. Sordo. "Proceedings". 2000.
- 42 Título del trabajo:** "High Level ab initio Predictions of CO₂•••N₂O Structure"
Nombre del congreso: IV Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER 2000
Ciudad de celebración: El Escorial, España
Fecha de celebración: 2000
V. M. Rayón; H. Valdés; J. A. Sordo. "Proceedings". 2000.
- 43 Título del trabajo:** "New Chemistry of SO₂ cycloaddition reactions with dienes"
Nombre del congreso: Third European Conference on Computational Chemistry EUCO-CC3
Ciudad de celebración: Budapest, Hungría
Fecha de celebración: 2000
F. Monnat; P. Vogel; J. A. Sordo. "Proceedings". 2000.
- 44 Título del trabajo:** "The Role of Bridged Structures in the Reaction Between Chlorine Atom and Ethylene: Does the Dissociation Mechanism Involve Any Subtle Motion?"
Nombre del congreso: Third European Conference on Computational Chemistry EUCO-CC3
Ciudad de celebración: Budapest, Hungría
Fecha de celebración: 2000
P. Braña. B. Menéndez; T. Fernández; J. A. Sordo. "Proceedings". 2000.
- 45 Título del trabajo:** "CCSDT Spectroscopic Constants for First-Row Diatomic Hydrides"
Nombre del congreso: World Congress of Theoretically Oriented Chemists WATOC'99
Ciudad de celebración: Londres,
Fecha de celebración: 1999
J. A. Sordo. "Proceedings". 1999.
- 46 Título del trabajo:** "On the Violation of Legon-Millen's Rules for Predicting Angular Geometries of Hydrogen-Bonded Dimers: An ab initio Study"
Nombre del congreso: World Congress of Theoretically Oriented Chemists WATOC'99
Ciudad de celebración: Londres,
Fecha de celebración: 1999
H. Valdés; V. M. Rayón; J. A. Sordo. "Proceedings". 1999.



- 47** **Título del trabajo:** "Reactions of Atomic Chlorine with Ethylene: A Theoretical Study"
Nombre del congreso: World Congress of Theoretically Oriented Chemists WATOC'99
Ciudad de celebración: Londres,
Fecha de celebración: 1999
P. Braña; B. Menéndez; T. Fernández; J. A. Sordo. "Proceedings". 1999.
- 48** **Título del trabajo:** "Using Fuzzy Set Theory to Assess Basis Set Quality"
Nombre del congreso: III Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER 98
Ciudad de celebración: Mira, Portugal
Fecha de celebración: 1998
J. A. Sordo. "Proceedings". 1998.
- 49** **Título del trabajo:** "Van der Waals Complexes between Cyclopropane and Sulfur Dioxide"
Nombre del congreso: I:U:P:A:C: Conference
Ciudad de celebración: Mexico, México
Fecha de celebración: 1998
V. M. Rayón; J. A. Sordo. "Proceedings". 1998.
- 50** **Nombre del congreso:** Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Ciudad de celebración: Puerto Real,
Fecha de celebración: 1998
"Actas". 1998.
- 51** **Título del trabajo:** "New Reactions with Sulfur Dioxide: Theory and Applications to Asymmetric Synthesis"
Nombre del congreso: VIII Convegno Nazionale sulle Reazioni Pericicliche
Ciudad de celebración: Siena, Italia
Fecha de celebración: 1997
P. Vogel; J. A. Sordo. "Proceedings". 1997.
- 52** **Título del trabajo:** "Estudio Teórico de la Formación de C₃H₃⁺ a Partir del Ataque del CH₂F⁺ al Acetileno"
Nombre del congreso: XXIII Congreso Internacional de Química Teórica de Expresión Latina
Ciudad de celebración: Cáceres, España
Fecha de celebración: 1996
E. Rio; R. López; M. I. Menéndez; T. L. Sordo; J. A. Sordo. "Actas". 1996.
- 53** **Título del trabajo:** "Pathways for Thermal 1,2-Elimination of H₂ From CH₂=OH⁺, CH₂=NH₂⁺ and CH₂=SH⁺ Cations: A Theoretical Study"
Nombre del congreso: XXIII Congreso Internacional de Química Teórica de Expresión Latina
Ciudad de celebración: Cáceres, España
Fecha de celebración: 1996
D. Suárez; J. A. Sordo; T. L. Sordo. "Actas". 1996.
- 54** **Título del trabajo:** "Stereoselective Synthesis of Polypropionates Based on Sulfur Dioxide Cycloadditions"
Nombre del congreso: Fourth World Congress of Theoretically Oriented Chemists-WATOC'96
Ciudad de celebración: Jerusalem, Israel
Fecha de celebración: 1996
P. Vogel; B. Deguin; J. M. Roulet; E. Roversi; F. Monnat; V. Narkevitch; S. Megeand; J. A. Sordo. "Proceedings". 1996.



- 55** **Título del trabajo:** "Síntesis de Beta-Lactamas a Partir de Fluorocetenos e Imidas: Superficies de Energía Potencial ab initio en fase Gas vs. Disolución"
Nombre del congreso: XXIII Congreso Internacional de Química Teórica de Expresión Latina
Ciudad de celebración: Cáceres, España
Fecha de celebración: 1996
R. López; M. F. Ruiz-López; D. Rinaldi; T. L. Sordo; J. A. Sordo. "Actas". 1996.
- 56** **Título del trabajo:** "Un Estudio ab initio de la Reacción $C_2H_5^+ + C_2H_3 + H_2$ "
Nombre del congreso: XXIII Congreso Internacional de Química Teórica de Expresión Latina
Ciudad de celebración: Cáceres, España
Fecha de celebración: 1996
E. Rio; R. López; T. L. Sordo; J. A. Sordo. "Actas". 1996.
- 57** **Título del trabajo:** "A Theoretical Study of Solvent Effects on the Mechanism of Fluoroketene-Formaldehyde Cycloaddition Reaction"
Nombre del congreso: 5th European Symposium on Organic Reactivity
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 1995
R. López; M. F. Ruiz-López; T. L. Sordo; J. A. Sordo. "Proceedings". 1995.
- 58** **Título del trabajo:** "Complejos de van der Waals Entre el trifluoruro de Boro y el Monóxido de Carbono: Un Estudio Teórico"
Nombre del congreso: 5th European Symposium on Organic Reactivity
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 1995
V. M. Rayón; T. L. Sordo; J. A. Sordo. "Proceedings". 1995.
- 59** **Título del trabajo:** "Electronic Configuration Analysis of the Inward-Outward Transition States in the Ketene-Imine Cycloadditions Reactions"
Nombre del congreso: 5th European Symposium on Organic Reactivity
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 1995
R. López; M. F. Ruiz-López; T. L. Sordo; J. A. Sordo. "Proceedings". 1995.
- 60** **Título del trabajo:** "Solvent Effects by ab initio Calculations on the Anionic Ester Enolate-Imine Condensation Route to β -lactams"
Nombre del congreso: 5th European Symposium on Organic Reactivity
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 1995
R. López; M. F. Ruiz-López; T. L. Sordo; J. A. Sordo. "Proceedings". 1995.
- 61** **Título del trabajo:** "Stereoselectivity of the Termal and Lewis Acis Catalyzed Diels-Alder Reaction of Cyclopentadiene with Monothionofumarate"
Nombre del congreso: 8th International Congress of Quantum Chemistry
Ciudad de celebración: Praga, República Checa
Fecha de celebración: 1994
J. A. Sordo; B. Pascual; T. L. Sordo; J. González. "Proceedings". 1994.
- 62** **Título del trabajo:** "Substituents Effect on the Hetero Diels-Alder Reaction of Sulfur Dioxide with 1,3-Dienes: The Importance of $CH\cdots O$ Hydrogen Bonding"
Nombre del congreso: 8th International Congress of Quantum Chemistry



Ciudad de celebración: Praga, República Checa

Fecha de celebración: 1994

D. Suárez; R. López; J. González; T. L. Sordo; J. A. Sordo. "Proceedings". 1994.

63 Título del trabajo: "The (?2s+?4s) Chelotropic Reaction versus the (?4s+?2s) Cycloaddition of Sulfur Dioxide to 1,3-Dienes: Kinetic and Thermodynamic Controls"

Nombre del congreso: 8th International Congress of Quantum Chemistry

Ciudad de celebración: Praga, República Checa

Fecha de celebración: 1994

D. Suárez; J. González; T. L. Sordo; J. A. Sordo. "Proceedings". 1994.

64 Título del trabajo: "Theoretical Analysis of the Electrophile Desolvation Process in Nucleophile-Electrophile Combination Reactions: A Comparative Study of the Addition of H₃O⁺ to Acetylene and Ethylene"

Nombre del congreso: 8th International Congress of Quantum Chemistry

Ciudad de celebración: Praga, República Checa

Fecha de celebración: 1994

M. I. Menéndez; J. A. Sordo; T. L. Sordo. "Proceedings". 1994.

65 Título del trabajo: "Ab Initio Study of the Formation of C₃H₃⁺ from the Reaction of CH₃⁺ with Acetylene"

Nombre del congreso: XXI Congres des Chimistes Thericiens d'expression Latine

Ciudad de celebración: Grenoble, Francia

Fecha de celebración: 1993

R. López; J. A. Sordo; T. L. Sordo. "Proceedings". 1993.

66 Título del trabajo: "Efecto Electrostatico del Disolvente en las Reacciones de Cicloadición de Cetenos con Iminas"

Nombre del congreso: 1º Reunión Hispano-Italiana de Química Orgánica

Ciudad de celebración: Valencia, España

Fecha de celebración: 1992

X. Assfeld; J. A. Sordo; J. González; M. F. Ruiz-López; T. L. Sordo. "Actas". 1992.

67 Título del trabajo: "El Efecto de la Calidad de las Bases en la Dscripción de las Estructuras de Transición: Estudio del Ataque ? del CH₃⁺ al C₂H₂"

Nombre del congreso: XX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Ciudad de celebración: Mérida, Venezuela

Fecha de celebración: 1992

R. López; J. A. Sordo; T. L. Sordo. "Actas". 1992.

68 Título del trabajo: "Estudio Teórico de la Cicloadición de Iminas con Cetenos"

Nombre del congreso: Congresso Internazionale dei Chimici teorici dei Paesi di Espressione Latina

Ciudad de celebración: Roma, Italia

Fecha de celebración: 1990

T. L. Sordo; J. A. Sordo; J. González. "Proceedings". 1990.

69 Título del trabajo: "Theoretical Study of the Formation of Cyclopropenyl Cation"

Nombre del congreso: NATO Advanced Study Institute

Ciudad de celebración: Vimeiro, Portugal

Fecha de celebración: 1990

R. López; J. A. Sordo; T. L. Sordo. "Proceedings". 1990.



- 70 Título del trabajo:** "Estudio Comparativo de Complejos Donor-Aceptor de BH₃, BF₃, BCl₃ y AlCl₃"
Nombre del congreso: Bienal de la Real Sociedad Española de Física
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca,
Fecha de celebración: 1989
V. M. Rayón; J. A. Sordo. "Actas". 1989.
- 71 Título del trabajo:** "Theoretical Study of Addition of H⁺ and H₃O to C₂H₂"
Nombre del congreso: International Symposium on Biological and Artificial Intelligence Systems
Ciudad de celebración: Trento, Italia
Fecha de celebración: 1988
M. I. Menéndez; J. A. Sordo; T. L. Sordo. "Proceedings". 1988.
- 72 Título del trabajo:** "A Systematic Study on the Basis Set Effects in the Calculation of Interaction Energies of Systems of Biological Interest"
Nombre del congreso: Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina
Ciudad de celebración: Peñíscola, España
Fecha de celebración: 1987
J. A. Sordo; T. L. Sordo; G. M. Fernández; R. Gomperts; S. Chin; E. Clementi. "Actas". 1987.
- 73 Título del trabajo:** "Un Método Alternativo para Valorar la Calidad de las Funciones de Onda Hartree-Fock-Roothaan"
Nombre del congreso: Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina
Ciudad de celebración: Peñíscola, España
Fecha de celebración: 1987
J. A. Sordo; T. L. Sordo; M. I. Menéndez; R. López. "Actas". 1987.
- 74 Título del trabajo:** "Un Potencial Analítico para la Interacción entre Amino Ácidos"
Nombre del congreso: International Symposium on Structure and Dynamics in Biomolecules
Ciudad de celebración: Riva del Garda, Italia
Fecha de celebración: 1986
J. A. Sordo; S. Chin; E. Clementi. "Proceedings". 1986.
- 75 Título del trabajo:** "Non-empirical Pair Potentials for the Interaction Between Aminoacids"
Nombre del congreso: International Congress on Quantum Chemistry
Ciudad de celebración: Montreal, Canadá
Fecha de celebración: 1985
J. A. Sordo; F. M. Probst; G. Corongiu; S. Chin; E. Clementi. "Proceedings". 1985.
- 76 Título del trabajo:** "Bases de Alta Calidad para los Elementos de la Primera Serie de Transición"
Nombre del congreso: Bienal de la Real Sociedad Española de Física y Química
Ciudad de celebración: Castellón,
Fecha de celebración: 1984
L. A. G. Bernardo; J. A. Sordo; L. Pueyo. "Actas". 1984.
- 77 Título del trabajo:** "Cálculo Analógico de Trayectorias"
Nombre del congreso: Bienal de la Real Sociedad Española de Física y Química
Ciudad de celebración: Castellón,
Fecha de celebración: 1984
G. F. Rodrigo; J. A. Sordo; T. L. Sordo. "Actas". 1984.



- 78 Título del trabajo:** "Estudio Sistemático del Error por Superposición de Bases en Sistemas de Interés Biológico"
Nombre del congreso: Bienal de la Real Sociedad Española de Física y Química
Ciudad de celebración: Castellón,
Fecha de celebración: 1984
J. A. Sordo; T. L. Sordo. "Actas". 1984.
- 79 Título del trabajo:** "Research in Atomic Structure"
Nombre del congreso: Congresso dos Quimicos Teoricos de Expressao Latina
Ciudad de celebración: Viana do Castelo, Portugal
Fecha de celebración: 1984
J. A. Sordo; M. Klobukowski; S. Fraga. "Proceedings". 1984.
- 80 Título del trabajo:** "Niveles Electrónicos del Ni(B) en (Ni(C₆H₅-COS)₂)₂ según una Descripción Electroestática Simple"
Nombre del congreso: Congres dels Quimics Teorics d'expressio Llatina
Fecha de celebración: 1981
J. A. Sordo; F. Gómez Beltran; L. Pueyo.
- 81 Título del trabajo:** "Sobre la Calidad de las Funciones de Onda Atómicas Hartree-Fock-Roothaan"
Nombre del congreso: Congres dels Quimics Teorics d'expressio Llatina
Ciudad de celebración: Barcelona,
Fecha de celebración: 1981
J. A. Sordo; L. Pueyo. "Actas". 1981.
- 82 Título del trabajo:** "Estructura Electrónica del Ión Ni²⁴⁺ y su Relación con el Enlace Metal-Metal en Complejos Binucleares de Ni (II)"
Nombre del congreso: Bienal de la Real Sociedad Española de Física y Química
Ciudad de celebración: Burgos,
Fecha de celebración: 1980
J. A. Sordo; F. Gómez Beltran; L. Pueyo. "Actas". 1980.
- 83 Título del trabajo:** "Obtención de Parámetros de Campo Cristalino en Clusters no-Octaédricos por Linearización Sistemática de las Matrices Electroestáticas"
Nombre del congreso: Bienal de la real Sociedad Española de Física y Química
Fecha de celebración: 1980
J. A. Sordo; F. Gómez Beltran; L. Pueyo.



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

Comités científicos, técnicos y/o asesores

- 1 Título del comité:** Expert exterieur de Thèse
Entidad de afiliación: Universite de Lausanne
Fecha de inicio-fin: 2000 - 2000
- 2 Título del comité:** External Reviewer
Entidad de afiliación: Swiss National Science Foundation
Ciudad entidad afiliación: Berna, Suiza
Fecha de inicio: 2015

Organización de actividades de I+D+i

Título de la actividad: XXXII Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Tipo de actividad: Vicepresidente **Ámbito geográfico:** Nacional
Fecha de inicio: 2009

Otros méritos

Estancias en centros públicos o privados

- 1 Entidad de realización:** Ecole Polytechnique Federale de Lausanne
Ciudad entidad realización: Lausanne, Suiza
Fecha de inicio-fin: 1995 - 2008 **Duración:** 98 días
Nombre del programa: Mecanismos de las Reacciones Químicas
Objetivos de la estancia: Acciones Integradas
- 2 Entidad de realización:** Rice University
Ciudad entidad realización: Houston,
Fecha de inicio-fin: 2002 - 2002 **Duración:** 3 meses
Nombre del programa: Metodología DFT con condiciones periódicas de contorno (PBC)
Objetivos de la estancia: Beca MECyD
- 3 Entidad de realización:** Pacific Northwest National Laboratory (PNNL)
Ciudad entidad realización: Richland,
Fecha de inicio-fin: 1999 - 1999 **Duración:** 3 meses
Nombre del programa: Cálculos ab initio correlacionados
Objetivos de la estancia: Beca MEC
- 4 Entidad de realización:** Université Henry Poincaré
Ciudad entidad realización: Nancy, Francia
Fecha de inicio-fin: 1995 - 1996 **Duración:** 14 días
Nombre del programa: Cálculos ab initio incorporando la solvatación
Objetivos de la estancia: Acciones Integradas



- 5** **Entidad de realización:** University of Sheffield
Ciudad entidad realización: Sheffield,
Fecha de inicio-fin: 1989 - 1991 **Duración:** 42 días
Nombre del programa: Efectos de la base en cálculos moleculares
Objetivos de la estancia: Acciones Integradas
- 6** **Entidad de realización:** IBM-Kingston
Ciudad entidad realización: New York,
Fecha de inicio-fin: 1987 - 1987 **Duración:** 6 meses
Nombre del programa: Interacciones moleculares
Objetivos de la estancia: Contratado/a
- 7** **Entidad de realización:** IBM-Kingston
Ciudad entidad realización: New York,
Fecha de inicio: 1986 **Duración:** 336 días
Nombre del programa: Interacciones moleculares
Objetivos de la estancia: Contratado/a
- 8** **Entidad de realización:** University of Alberta
Ciudad entidad realización: Edmonton, Canadá
Fecha de inicio: 1985 **Duración:** 336 días
Nombre del programa: Interacciones moleculares y cálculos atómicos relativistas
Objetivos de la estancia: Posdoctoral

Períodos de actividad investigadora

Nº de tramos reconocidos: 5

Fecha de obtención: 2009

Resumen de otros méritos

- 1** **Descripción del mérito:** 1. Tengo reconocidos hasta el momento seis (6) quinquenios docentes.
- 2** **Descripción del mérito:** 2. Soy miembro del Consejo Editorial de la revista Journal of Physical Organic Chemistry publicada por John Wiley & Sons
- 3** **Descripción del mérito:** 3. He actuado hasta el momento como revisor para las siguientes revistas internacionales: International Journal of Quantum Chemistry, Journal of Molecular Structure (Theochem), Journal of Computational Chemistry, Journal of the American Chemical Society, Bull. Soc. Chim. France, Journal of Organic Chemistry, Journal of Physical Organic Chemistry, Chemistry. A European Journal, Journal of Physical Chemistry, Organic Letters, Chemical Physics, European Journal of Organic Chemistry, European Journal of Inorganic Chemistry, Journal of Chemical Education, Environmental Sci. and Tech., Journal of Chemical Theory and Computation, Journal of Organometallic Chemistry, Royal Chemical Society (todas las revistas), Journal of Chemical Physics.



- 4 Descripción del mérito:** 4. Actúo como asesor de la Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva desde 1989.
- 5 Descripción del mérito:** 5. Actúo como evaluador de la Agencia para la Calidad del Sistema Universitario de Castilla y León desde 2012.
- 6 Descripción del mérito:** 6. He impartido: Métodos avanzados de la Mecánica Cuántica (3 créditos). Curso Interuniversitario de doctorado con Mención de Calidad (Química Teórica y Computacional). Universidad de Cantabria 2006-2007 y Universidad de Murcia 2007-2008.
- 7 Descripción del mérito:** 7. Actúo como evaluador externo para la Swiss National Science Foundation