



---

**Ministerio de Ciencia, Innovación y  
Universidades**  
**Secretaría de Estado de Investigación,  
Desarrollo e Innovación**

---

## **Currículum**

Nombre: RAMÓN LÓPEZ RODRÍGUEZ

Fecha: 31 de octubre de 2025

Apellidos: LÓPEZ RODRÍGUEZ

Nombre: RAMÓN

---

### Situación profesional actual

Organismo: Universidad de Oviedo  
Facultad, Escuela o Instituto: Facultad de Química  
Depto./Secc./Unidad estr.: Departamento de Química Física y Analítica

Especialización (Códigos UNESCO): 2037

Categoría profesional: Profesor Titular Universidad

Fecha de inicio: 25/07/1999

Situación administrativa

☒ Plantilla

☐ Contratado

☐ Interino

☐ Becario

☐ Otras situaciones especificar:

Dedicación A tiempo completo ☒

A tiempo parcial ☐

Tramos de investigación que tiene acreditados: 5 (1990-1995, 1996-2001, 2002-2007, 2008-2013, 2014-2019)

---

### Líneas de investigación

Breve descripción, por medio de palabras claves, de la especialización y líneas de investigación actuales.

Química Computacional. Métodos QM. Modelos de Solvatación Continuos y Discreto-Continuos. Mecanismos de Reacción. Análisis de Propiedades Moleculares. Estudio de la Estructura, Reagrupamiento y Reactividad de Complejos Metálicos de Mo, Ru y Re con Interés en Síntesis Orgánica y Terapias Anticancerígenas. Modelización Molecular de Derivados Porfirínicos con Interés en el Tratamiento Fotodinámico del Cáncer y en la Generación de Células Solares Sensibilizadas con Colorantes. Descriptores Teóricos de la Reactividad Química.

---

### Formación Académica

Titulación Superior	Centro	Fecha
Licenciado en Ciencias Químicas	Facultad de Química. Universidad de Oviedo	09-12-1987

Doctorado	Centro	Fecha
Doctor en Ciencias Químicas	Facultad de Química. Universidad de Oviedo	06-10-1994

**Actividades anteriores de carácter científico profesional**

---

Puesto	Institución	Fechas
Becario MEC del Programa de Formación de Doctores en el Extranjero	Laboratoire de Chimie Théorique. Université Henri Poincaré-Nancy I (Francia)	1995
Profesor Asociado de Química Física a tiempo completo	Facultad de Química. Universidad de Oviedo	1989-1999

---

**Idiomas (R = regular, B = bien, C = correctamente)**

Idioma	Habla	Lee	Escribe
Francés	B	C	B
Inglés	B	B	C

Número ORCID: 0000-0001-8899-705X

## Participación en Proyectos de I+D financiados en Convocatorias públicas.

(nacionales y/o internacionales)

---

1. Título del proyecto: Interacciones moleculares en sistemas de interés biológico. (PB87-0724)

Entidad financiadora: D.G.I.C.Y.T.

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: 1988 hasta: 1991

Cuantía de la subvención: 4.135.000 pts

Investigador responsable: José Ángel Sordo Gonzalo

Número de investigadores participantes: 5

---

2. Título del proyecto: Estudio teórico ab initio y semiempírico de la química interestelar y de las llamas. (PB94-1314-C03-01)

Entidad financiadora: D.G.I.C.Y.T.

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: 1995 hasta: 1998

Cuantía de la subvención: 7.500.000 pts

Investigador responsable: Tomás Luis Sordo Gonzalo

Número de investigadores participantes: 5

---

3. Título del proyecto: Monobactamas: Estudio ab initio de su síntesis, aminólisis e hidrólisis. (PB-MAS96-23-SAL)

Entidad financiadora: Consejería de Educación y Ciencia del Principado de Asturias.

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: 1996 hasta: 1997

Cuantía de la subvención: 2.524.000 pts

Investigador responsable: Tomás Luis Sordo Gonzalo

Número de investigadores participantes: 5

---

4. Título del proyecto: Ayudas para petición de Infraestructura.

Entidad financiadora: Consejería de Educación y Ciencia del Principado de Asturias.

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: 1997 hasta: 1998

Investigador responsable: José Ángel Sordo Gonzalo

Número de investigadores participantes: 5

---

5. Título del proyecto: Estudio teórico-experimental de especies precursoras del hollín y de la reducción de las emisiones de NOx. (PB-AMB98-05C1)

Entidad financiadora: Consejería de Educación y Ciencia del Principado de Asturias.

Entidades participantes: Universidad de Oviedo, Instituto Nacional del Carbón

Duración, desde: 01/10/1998 hasta: 31/12/1999

Cuantía de la subvención: 5.233.280 pts

Investigador responsable: Tomás Luis Sordo Gonzalo

Número de investigadores participantes: 6

---

---

6. Título del proyecto: Estudio computacional de mecanismos homogéneos y heterogéneos para la formación y reducción de NOx durante la combustión. (PB-AMB99-07C2)

Entidad financiadora: Consejería de Educación y Ciencia del Principado de Asturias.

Entidades participantes: Universidad de Oviedo, Instituto Nacional del Carbón

Duración, desde: 01/12/1999 hasta: 31/12/2000 Cuantía de la subvención: 5.492.500 pts

Investigador responsable: Tomás Luis Sordo Gonzalo

Número de investigadores participantes: 6

---

7. Título del proyecto: Estudio teórico ab initio de la química de las beta-lactamas. (PB97-1300)

Entidad financiadora: D.G.I.C.Y.T.

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: 01/10/1998 hasta: 01/10/2001 Cuantía de la subvención: 5.900.000 pts

Investigador responsable: Tomás Luis Sordo Gonzalo

Número de investigadores participantes: 6

---

8. Título del proyecto: Formulación de taladrinas susceptibles de reutilización y/o eliminación mediante el uso de tecnologías ambientales limpias. (MCT-01-PPQ3442-C0201)

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: 28/12/2001 hasta: 27/12/2004 Cuantía de la subvención: 168.565,98 €

Investigador responsable: Carmen Pazos Medina

Número de investigadores participantes: 5

---

9. Título del proyecto: Modelización computacional de la actuación de metales, compuestos organometálicos y metaloenzimas en la química de las beta-lactamas. (PB02-045)

Entidad financiadora: Consejería de Educación y Ciencia del Principado de Asturias.

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: 01/12/2003 hasta: 01/12/2005 Cuantía de la subvención: 30.753,70 €

Investigador responsable: Tomás Luis Sordo Gonzalo

Número de investigadores participantes: 6

---

10. Título del proyecto: Modelización computacional de la hidrólisis del enlace peptídico asistida por metales: sistemas organometálicos y metaloproteinasas. (CTQ2004-06309/BQU)

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: 13/12/2004 hasta: 12/12/2007 Cuantía de la subvención: 73.400,00 €

Investigador responsable: Tomás Luis Sordo Gonzalo

Número de investigadores participantes: 5

---

---

11. Título del proyecto: Modelización molecular del colágeno: estructura y estabilidad de la triple hélice en la región hidrolizada por las MMPs. (IB05-076)

Entidad financiadora: Consejería de Educación y Ciencia del Principado de Asturias.

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: 01/12/2005 hasta: 31/12/2007

Cuantía de la subvención: 92.970,04 €

Investigador responsable: Tomás Luis Sordo Gonzalo

Número de investigadores participantes: 6

---

12. Título del proyecto: Ayudas FEDER a la realización de proyectos de infraestructura científica 2005-2006: Clúster Universitario de Modelización Científica. (UNOV-23-009)

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: 01/01/2005 hasta: 31/12/2006

Cuantía de la subvención: 315.000,00 €

Investigador responsable: Dimas Suárez Rodríguez

Número de investigadores participantes: 38

---

13. Título del proyecto: Caracterización de las safirinas como fotosensibilizadores en la formación de oxígeno molecular singlete y reactividad del oxígeno molecular singlete frente a péptidos. (MEC-06-PCI-2005-A7-0304)

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: 01/09/2006 hasta: 31/08/2009

Cuantía de la subvención: 8.000,00 €

Investigador responsable: María Isabel Menéndez Rodríguez

Número de investigadores participantes: 4

---

14. Título del proyecto: Ampliación del Clúster de Modelización Científica del Campus de Mieres. (SV-PA-08-FM-4)

Entidad financiadora: Consejería de Educación y Ciencia del Principado de Asturias.

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: 2007 hasta: 2009

Cuantía de la subvención: 220.292,00 €

Investigador responsable: Dimas Suárez Rodríguez

Número de investigadores participantes: 37

---

15. Título del proyecto: Modelización molecular de la ruptura selectiva de péptidos lineales y con estructura de triple hélice: catálisis por compuestos organometálicos y metalo-proteinasas. (CTQ2007-63266)

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: 01/10/2007 hasta: 30/09/2010

Cuantía de la subvención: 209.330,00 €

Investigador responsable: Dimas Suárez Rodríguez

Número de investigadores participantes: 8

---

---

16. Título del proyecto: Modelización computacional de la estructura y reactividad de molibdocenos implicados en reacciones orgánicas acuosas benignas con el medio ambiente y procesos bioinorgánicos

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: 01/01/2011 hasta: 31/12/2014

Cuantía de la subvención: 65.000,00 €

Investigador responsable: Ramón López Rodríguez

Número de investigadores participantes: 6

---

17. Título del proyecto: Modelización computacional de la estructura y reactividad de molibdocenos implicados en reacciones orgánicas acuosas benignas con el medio ambiente y procesos bioinorgánicos. (FC-11-COF11-20)

Entidad financiadora: Consejería de Educación y Ciencia del Principado de Asturias.

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: 01/01/2011 hasta: 31/12/2011

Cuantía de la subvención: 15.063,00 €

Investigador responsable: Ramón López Rodríguez

Número de investigadores participantes: 6

---

18. Título del proyecto: Estudio teórico-experimental de reacciones de desprotonación de grupos CH de moléculas orgánicas coordinadas a fragmentos metálicos. (Ref.: FC-15-GRUPIN14-103)

Entidad financiadora: Consejería de Educación y Ciencia del Principado de Asturias.

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: diciembre de 2014 hasta: 31/12/2017

Cuantía de la subvención: 60.000,00 €

Investigador responsable: Julio Antonio Pérez Martínez

Número de investigadores participantes: 9

---

19. Título del proyecto: Nuevos acoplamientos C-C y C-M en complejos organometálicos. (Ref.: MINECO-16-CTQ2015-70231-P)

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: 01/01/2016 hasta: 30/09/2019

Cuantía de la subvención: 123.299,00 €

Investigador responsable: Julio Antonio Pérez Martínez

Número de investigadores participantes: 5

---

20. Título del proyecto: Nuevos modos de reactividad N-heterociclos coordinados a fragmentos metálicos. (Ref.: PGC2018-100013-B-IOO)

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: 01/01/2019 hasta: 31/12/2021

Cuantía de la subvención: 107.000,00 €

Investigador responsable: Julio Antonio Pérez Martínez y Lucía Riera Menéndez

Número de investigadores participantes: 5

---

**Nota:** Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

---

21. Título del proyecto: Reactividad de N-heterociclos coordinados a complejos carbonílicos de Re(I) y Mo(II). (PAPI-21-TEQO)

Entidad financiadora: Universidad de Oviedo. UO-Acciones complementarias de la U.O.

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: 01/01/2021 hasta: 21/11/2021

Cuantía de la subvención: 2.000,00 €

Investigador responsable: M. Isabel Menéndez Rodríguez

Número de investigadores participantes: 4

---

22. Título del proyecto: Desprotonación de grupos C-H de N-heterociclos coordinados a metales de transición: nuevo acceso a ligandos muy dadores. (PAPI-23-GR-2021-0008)

Entidad financiadora: Universidad de Oviedo. UO-Acciones complementarias de la U.O.

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: 17/12/2023 hasta: 31/3/2024

Cuantía de la subvención: 9.000,00 €

Investigador responsable: M. Isabel Menéndez Rodríguez

Número de investigadores participantes: 4

---

23. Título del proyecto: LIGANDOS N-HETEROCICLICOS NO CONVENCIONALES EN QUIMICA ORGANOMETALICA Y CATALISIS. (PID2023-149607NB-I00)

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: 1/9/2024 hasta: 31/12/2027

Cuantía de la subvención: 122.400,00 €

Investigador responsable: Ramón López Rodríguez y Julio Antonio Pérez Martínez

Número de investigadores participantes: 4

---

24. Título del proyecto: Química Inorgánica y Catálisis (QUIMINORCAT). (IDE/2024/000727)

Entidad financiadora: Agencia de Ciencia, Competitividad Empresarial e Innovación del Principado de Asturias (SEKUENS)

Entidades participantes: Universidad de Oviedo

Duración, desde: 24/9/2024 hasta: 31/12/2026

Cuantía de la subvención: 165.900,00 €

Investigador responsable: Javier Ángel Cabeza de Marco

Número de investigadores participantes: 12

---



## Publicaciones o Documentos Científico-Técnicos

---

(CLAVE: L = libro completo, CL = capítulo de libro, A = artículo, R = "review", E = editor,  
S = Documento Científico-Técnico restringido. )

---

1. AUTORES (p.o. de firma): M. I. Menéndez, R. López, T. L. Sordo y J. A. Sordo  
TÍTULO: An Alternative Method to Assess the Quality of Hartree-Fock-Roothaan Wave Functions  
REF. REVISTA/LIBRO: *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* 166, 75-80 (1988) CLAVE: A

---

2. AUTORES (p.o. de firma): R. López, J. A. Sordo y T. L. Sordo  
TÍTULO: Theoretical Study of the Formation of Cyclopropenyl Cation from  $\text{CH}^+$  and Acetylene  
REF. REVISTA/LIBRO: *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* 254, 443-451 (1992) CLAVE: A

---

3. AUTORES (p.o. de firma): R. López, M. I. Menéndez, D. Suárez, T. L. Sordo y J. A. Sordo  
TÍTULO: ANACAL: A Program to carry out a Configurational Analysis of the Wave Function of Reactive Systems  
REF. REVISTA/LIBRO: *Comput. Phys. Commun.* 76, 235-249 (1993) CLAVE: A

---

4. AUTORES (p.o. de firma): R. López, T. L. Sordo, J. A. Sordo y J. González.  
TÍTULO: Torquoelectronic Effect in the Control of the Stereoselectivity of Ketene-Imine Cycloaddition Reactions  
REF. REVISTA/LIBRO: *J. Org. Chem.* 58, 7036-7037 (1993) CLAVE: A

---

5. AUTORES (p.o. de firma): R. López, J. A. Sordo y T. L. Sordo  
TÍTULO: Unfavourable Orbital Overlap at the Transition State of a Symmetry Allowed Reaction: A Theoretical Study  
REF. REVISTA/LIBRO: *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 1751-1753 (1993) CLAVE: A

---

6. AUTORES (p.o. de firma): X. Assfeld, J. González, R. López, M. F. Ruiz-López, J. A. Sordo y T. L. Sordo  
TÍTULO: Theoretical Analysis of the Role of the Solvent on the Reaction Mechanisms: One-Step versus Two-Step Ketene-Imine Cycloaddition  
REF. REVISTA/LIBRO: *J. Comput. Chem.* 15, 479-487 (1994) CLAVE: A

---

7. AUTORES (p.o. de firma): R. López, J. A. Sordo y T. L. Sordo  
TÍTULO: On the Effect of Basis Set Quality on the Description of Transition Structures: The  $\pi$  Attack of  $\text{CH}_3^+$  to  $\text{C}_2\text{H}_2$   
REF. REVISTA/LIBRO: *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* 330, 381-384 (1995) CLAVE: A

---

8. AUTORES (p.o. de firma): X. Assfeld, R. López, M. F. Ruiz-López, J. González, T. L. Sordo y J. A. Sordo.  
TÍTULO: Comments on "Ab Initio Studies on the Mechanism of the Cycloaddition Reaction of Fluoroketene with Imines: Substituent Effects (Z. Xu, D. Fang and X. Fu, *J. Mol. Struct. (Theochem)*), 305, 191 (1994))  
REF. REVISTA/LIBRO: *J. Mol. Struct. (Theochem)* 331, 1-2 (1995) CLAVE: A

---

9. AUTORES (p.o. de firma): R. López, D. Suárez, M. F. Ruiz-López, J. González, J. A. Sordo y T. L. Sordo  
TÍTULO: Solvent Effects on the Stereoselectivity of Ketene-Imine Cycloaddition Reactions  
REF. REVISTA/LIBRO: *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 1677-1678 (1995) CLAVE: A

---

10. AUTORES (p.o. de firma): D. Suárez, R. López, J. González, T. L. Sordo y J. A. Sordo  
TÍTULO: Ab Initio Study of the Effect of  $\text{CH}\cdots\text{O}$  Hydrogen Bonding on the Exo/Endo Stereoselectivity of Diels-Alder Reactions of 2-Substituted-1,3-Dienes with Sulfur Dioxide  
REF. REVISTA/LIBRO: *Int. J. Quantum Chem.* 57, 493-499 (1996) CLAVE: A

---

- 
11. AUTORES (p.o. de firma): R. López, J. A. Sordo, P. von Ragué Schleyer y T. L. Sordo  
 TÍTULO: Ab Initio Study of the Formation of  $C_3H_3^+$  from the Reaction of  $CH_3^+$  with Acetylene  
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Comput. Chem.* 17, 905-909 (1996) CLAVE: A
- 
12. AUTORES (p.o. de firma): R. López, M. F. Ruiz-López, D. Rinaldi, J. A. Sordo y T. L. Sordo  
 TÍTULO: Synthesis of  $\beta$ -Lactams from Fluoroketenes and Imines: Ab Initio Potential Energy Surfaces in Gas-Phase and in Solution  
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem.* 100, 10600-10608 (1996) CLAVE: A
- 
13. AUTORES (p.o. de firma): C. Selçuki, V. Aviyente, T. Varnali y R. López  
 TÍTULO: Conformational Analysis of 2-Substituted-1,3-Diheteroanes. A Theoretical Study of Solvent Effects  
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* 418, 41-47 (1997) CLAVE: A
- 
14. AUTORES (p.o. de firma): E. del Río, R. López y T. L. Sordo  
 TÍTULO: A Theoretical Study of the  $H_2$  Elimination from  $C_6H_7^+$ : An Example of the Role of Back-Donation in Carbocation Chemistry  
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. A* 101, 10090-10094 (1997) CLAVE: A
- 
15. AUTORES (p.o. de firma): E. del Río, M. I. Menéndez, R. López y T. L. Sordo  
 TÍTULO: The Role of Back-Bonding in the Determination of Classical vs. Non-Classical Bonding in  $EH_3^+$  and  $EH_5^+$  Minimum Structures for E = C, Si and Ge  
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 1779-1780 (1997) CLAVE: A
- 
16. AUTORES (p.o. de firma): R. López, E. del Río, N. Díaz, D. Suárez, M. I. Menéndez y T. L. Sordo  
 TÍTULO: Theoretical Studies of the Formation of  $\beta$ -Lactams  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Recent Research Developments in Physical Chemistry*, 2, 245- CLAVE: CL  
 257 (1998)
- 
17. AUTORES (p.o. de firma): R. López, D. Suárez, T. L. Sordo y M. F. Ruiz-López  
 TÍTULO: Theoretical Study of the [2+2] Cycloaddition of Thioketenes with Imines to form  $\beta$ -Thiolactams  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Chem. Eur. J.* 4, 328-334 (1998) CLAVE: A
- 
18. AUTORES (p.o. de firma): E. del Río, M. I. Menéndez, R. López y T. L. Sordo  
 TÍTULO: A Theoretical Analysis of the  $\pi$  Attack of  $CH_2F^+$  on Acetylene  
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* 429, 275-279 (1998) CLAVE: A
- 
19. AUTORES (p.o. de firma): E. del Río, R. López y T. L. Sordo  
 TÍTULO: A Theoretical Study of the  $H_2$  Elimination from  $C_2H_5^+$   
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. A* 102, 6831-6834 (1998) CLAVE: A
- 
20. AUTORES (p.o. de firma): E. del Río, R. López, M. I. Menéndez, T. L. Sordo y M. F. Ruiz-López  
 TÍTULO: Theoretical Study of Ester Enolate-Imine Condensation Route to  $\beta$ -Lactams  
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Comput. Chem.* 19, 1826-1833 (1998) CLAVE: A
- 
21. AUTORES (p.o. de firma): R. López, E. del Río, M. I. Menéndez y T. L. Sordo  
 TÍTULO: Ab Initio Study of the Reaction of  $CHO^+$  with  $H_2O$  and  $NH_3$   
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Comput. Chem.* 20, 1432-1443 (1999) CLAVE: A
- 
22. AUTORES (p.o. de firma): R. López, E. del Río, M. I. Menéndez y T. L. Sordo  
 TÍTULO: The Role of Back-Donation in Carbocation Chemistry  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Trends in Physical Chemistry* 7, 219-226 (1999) CLAVE: CL
-

- 
23. AUTORES (p.o. de firma): E. del Río, R. López, M. I. Menéndez y T. L. Sordo  
 TÍTULO: A Theoretical Study of the Reaction of  $\text{HCO}^+$  with  $\text{C}_2\text{H}_2$   
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Comput. Chem.* 21, 35-42 (2000) CLAVE: A
- 
24. AUTORES (p.o. de firma): R. López, M. I. Menéndez, N. Díaz, D. Suárez, P. Campomanes y T. L. Sordo  
 TÍTULO: Theoretical Studies of Hydrolysis, Alcoholysis and Amonolysis of  $\beta$ -Lactams  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Recent Research Developments in Physical Chemistry* 4, 157- 173 (2000) CLAVE: CL
- 
25. AUTORES (p.o. de firma): E. del Río, M. I. Menéndez, R. López y T. L. Sordo  
 TÍTULO: On the Structure of Phenonium Ions: the Important Role of Back-Bonding Interaction in Carbocation Chemistry  
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. A* 104, 5568-5571 (2000) CLAVE: A
- 
26. AUTORES (p.o. de firma): R. López, E. del Río, M. I. Menéndez, P. Campomanes y T. L. Sordo  
 TÍTULO: An Ab Initio Study of the Reaction of  $\text{CH}_2\text{F}^+$  with Acetylene  
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Mol. Struct. (Theochem)* 537, 193-198 (2001) CLAVE: A
- 
27. AUTORES (p.o. de firma): E. del Río, M. I. Menéndez, R. López y T. L. Sordo  
 TÍTULO: Rearrangements Involving the Phenonium Ion: A Theoretical Investigation  
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Am. Chem. Soc.* 123, 5064-5068 (2001) CLAVE: A
- 
28. AUTORES (p.o. de firma): R. López, E. del Río, M. I. Menéndez y T. L. Sordo  
 TÍTULO: An Ab Initio Study of the Reaction of Propargyl Cation with Ammonia  
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. A* 106, 4616-4622 (2002) CLAVE: A
- 
29. AUTORES (p.o. de firma): J. Pérez, V. Riera, A. Rodríguez, R. López, T. L. Sordo, S. García-Granda, E. García-Rodríguez y A. Galindo  
 TÍTULO: Structural Divergence in the Products of the Reaction of  $[\text{MoCl}(\eta^3\text{-C}_3\text{H}_5)(\text{CO})_2(\text{dmpm})]$  with Nucleophiles  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Organometallics* 22, 1540-1545 (2003) CLAVE: A
- 
30. AUTORES (p.o. de firma): R. López y T. L. Sordo  
 TÍTULO: A Density Functional Theory Study of  $\text{N}_2\text{O}$  Formation from the Reaction of NO with Pyridine and with Acridine  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Theor. Chem. Acc.* 112, 270-276 (2004) CLAVE: A
- 
31. AUTORES (p.o. de firma): R. López, E. del Río, M.I. Menéndez y T.L. Sordo  
 TÍTULO: An Ab Initio Study of the Reaction of Propargyl Cation with Water  
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Mol. Struct. (Theochem)* 683, 81-87 (2004) CLAVE: A
- 
32. AUTORES (p.o. de firma): P. Campomanes, M. I. Menéndez, R. López y T. L. Sordo  
 TÍTULO: A Theoretical Analysis of the Coordination Modes of  $\text{Cu}^{\text{II}}$  with Penicillins: Activation of the  $\beta$ -Lactam C-N Bond  
 REF. REVISTA/LIBRO: *ChemPhysChem* 6, 344-351 (2005) CLAVE: A
- 
33. AUTORES (p.o. de firma): P. Campomanes, M. I. Menéndez, R. López y T. L. Sordo  
 TÍTULO: Stereodynamics of Bond Rotation in Tertiary 1-Naphthoic Acid Amides: A Computational Study  
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Comput. Chem.* 26, 365-373 (2005) CLAVE: A
- 
34. AUTORES (p.o. de firma): B. Pelotier, M. Rajzmann, J. M. Pons, P. Campomanes, R. López y T. L. Sordo  
 TÍTULO: The Formation of Silylated  $\beta$ -Lactams from Silylketenes through Lewis Acid-Promoted [2+2] Cycloaddition. A Combined Theoretical and Experimental Study  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Eur. J. Org. Chem.* 2599-2606 (2005) CLAVE: A
-

- 
35. AUTORES (p.o. de firma): D. Ardura, R. López y T. L. Sordo  
TÍTULO: Relative Gibbs Energies in Solution through Continuum Models: Effect of the Loss of Translational Degrees of Freedom in Bimolecular Reactions on Gibbs Energy Barriers  
REF. REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. B* 109, 23618-23623 (2005) CLAVE: A
- 
36. AUTORES (p.o. de firma): R. López, M. I. Menéndez, N. Díaz, D. Suárez, P. Campomanes, D. Ardura y T. L. Sordo  
TÍTULO: Theoretical Studies on the Ring Opening of  $\beta$ -Lactams: Processes in Solution and in Enzymatic Media  
REF. REVISTA/LIBRO: *Curr. Org. Chem.* 10, 805-821 (2006) CLAVE: A
- 
37. AUTORES (p.o. de firma): D. Ardura, R. López y T. L. Sordo  
TÍTULO: A Theoretical Study of Rhodium(I) Catalyzed Carbonylative Ring Expansion of Aziridines to  $\beta$ -Lactams: Crucial Activation of the Breaking C-N Bond by Hyperconjugation  
REF. REVISTA/LIBRO: *J. Org. Chem.* 71, 7315-7321 (2006) CLAVE: A
- 
38. AUTORES (p.o. de firma): E. Suárez, D. Suárez, M. I. Menéndez, R. López y T. L. Sordo  
TÍTULO: Formation of Trichlorinated Dibenzo-*p*-dioxins from 2,4-Dichlorophenol and 2,4,5-Trichlorophenolate Anion: A Theoretical Study  
REF. REVISTA/LIBRO: *ChemPhysChem* 7, 2331-2338 (2006) CLAVE: A
- 
39. AUTORES (p.o. de firma): D. Ardura y R. López  
TÍTULO: A Theoretical Investigation of the  $\text{Co}(\text{CO})_4$ -Catalyzed Carbonylative Ring Expansion of *N*-Benzoyl-2-methylaziridine to  $\beta$ -Lactams: Reaction Mechanism and Effect of Substituent at the Aziridine  $\text{C}_\alpha$  Atom  
REF. REVISTA/LIBRO: *J. Org. Chem.* 72, 3259-3267 (2007) CLAVE: A
- 
40. AUTORES (p.o. de firma): N. de-los-Santos Álvarez, P. de-los-Santos-Álvarez, M. J. Lobo-Castañón, R. López, A. J. Miranda-Ordieres y P. Tuñón-Blanco  
TÍTULO: Electrochemical Oxidation of Guanosine and Adenosine: Two Convergent Pathways  
REF. REVISTA/LIBRO: *Electrochem. Commun.* 9, 1862-1866 (2007) CLAVE: A
- 
41. AUTORES (p.o. de firma): V. Yeguas, P. Campomanes y R. López  
TÍTULO: The Importance of a Conformational Equilibrium on the Reactivity of Molybdenum and Rhenium Hydroxo-Carbonyl Complexes toward Phenyl Acetate: A Theoretical Investigation  
REF. REVISTA/LIBRO: *Organometallics* 26, 5271-5277 (2007) CLAVE: A
- 
42. AUTORES (p.o. de firma): G. I. Cárdenas-Jirón, C. Venegas, R. López y M. I. Menéndez  
TÍTULO: Theoretical Insight into Pyrrole Inversion and Planarity in 5,10,15,20-Tetraphenylsapphyrin and 5,10,15,20-Tetraphenyl-26,28-Diheterosapphyrins with Two O, S, or Se Atoms  
REF. REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. A* 112, 8100-8106 (2008) CLAVE: A
- 
43. AUTORES (p.o. de firma): V. Yeguas, N. Díaz, P. Campomanes y R. López  
TÍTULO: Ring Opening at N1-C2 Bond of Azetidin-2-ones by a Molybdenum Hydroxo-Carbonyl Complex: Evidence from a Computational Study  
REF. REVISTA/LIBRO: *Dalton Trans.* 6427-6434 (2008) CLAVE: A
- 
44. AUTORES (p.o. de firma): V. Yeguas, P. Campomanes y R. López  
TÍTULO: Theoretical Study on the Reactivity of a Rhenium Hydroxo-Carbonyl Complex toward  $\beta$ -Lactams  
REF. REVISTA/LIBRO: *Eur. J. Inorg. Chem.* 4547-4554 (2008) CLAVE: A
-

- 
45. AUTORES (p.o. de firma): M. E. García, S. Melón, M. A. Ruiz, R. López, T. L. Sordo, L. Marchiò y A. Tiripicchio  
 TÍTULO: Low-Temperature N-O Bond Cleavage of Nitrogen Monoxide in Heterometallic Carbonyl Complexes. An Experimental and Theoretical Study  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Inorg. Chem.* 47, 10644-10655 (2008) CLAVE: A
- 
46. AUTORES (p.o. de firma): A. Arenillas, B. Arias, F. Rubiera, J. J. Pis, R. López, P. Campomanes, C. Pevida y M. I. Menéndez  
 TÍTULO: Heterogeneous Reaction Mechanisms of the Reduction of Nitric Oxide on Carbon Surfaces: A Theoretical Analysis  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Theor. Chem. Acc.* 127, 95-108 (2010) CLAVE: A
- 
47. AUTORES (p.o. de firma): V. Yeguas, G. I. Cárdenas-Jirón, M. I. Menéndez y R. López  
 TÍTULO: A Computational Study on the Stability-Aromaticity Correlation of Triply N-Confused Porphyrins  
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Mat. Chem.* 48, 137-144 (2010) CLAVE: A
- 
48. AUTORES (p.o. de firma): R. López, M. I. Menéndez, M. Santander-Nelli y G. I. Cárdenas-Jirón  
 TÍTULO: A Theoretical Investigation on the Spectroscopic Properties and Photosensitizing Capability of 5,10,15,20-Tetraphenylsapphyrin and 5,10,15,20-Tetraphenyl-26,28-Diheterosapphyrins with two O, S, or Se Atoms  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Theor. Chem. Acc.* 127, 475-484 (2010) CLAVE: A
- 
49. AUTORES (p.o. de firma): V. Yeguas, R. López, A. Lambert, G. Monard y M. F. Ruiz-López  
 TÍTULO: Computer Simulation of Reactions in  $\beta$ -Cyclodextrin Molecular Reactors: Transition State Recognition  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Org. Biomol. Chem.* 8, 4346-4355 (2010) CLAVE: A
- 
50. AUTORES (p.o. de firma): V. Yeguas, P. Campomanes y R. López  
 TÍTULO: Reactivity of a Rhenium Hydroxo-Carbonyl Complex toward Carbon Disulfide: Insights from Theory  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Dalton Trans.* 39, 874-882 (2010) CLAVE: CL
- 
51. AUTORES (p.o. de firma): V. Yeguas, P. Campomanes, R. López, N. Díaz y D. Suárez  
 TÍTULO: Understanding Regioselective Cleavage in Peptide Hydrolysis by a Palladium(II) Aqua Complex: A Theoretical Point of View  
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. B* 114, 8525-8535 (2010) CLAVE: A
- 
52. AUTORES (p.o. de firma): M. A. Huertos, J. Pérez, L. Riera, J. Díaz y R. López  
 TÍTULO: Effect of the Nature of the Substituent in N-alkylimidazole Ligands on the Outcome of Deprotonation: Ring-Opening versus the Formation of N-Heterocyclic Carbene Complexes  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Chem. Eur. J.* 16, 8495-8507 (2010) CLAVE: A
- 
53. AUTORES (p.o. de firma): M. A. Huertos, J. Pérez, L. Riera, J. Díaz y R. López  
 TÍTULO: From Bis(N-Alkylimidazole) to Bis(NH-NHC) in Rhenium Carbonyl Complexes  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Ang. Chem. Int. Ed.* 49, 6409-6412 (2010) CLAVE: A
- 
54. AUTORES (p.o. de firma): E. Tílviz, N. Díaz, M. I. Menéndez, D. Suárez y R. López  
 TÍTULO: Quantum Chemical Calculations of Stability Constants: Study of Ligand Effects on the Relative Stability of Pd(II)-Peptide Complexes  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Theor. Chem. Acc.* 128, 465-475 (2011) CLAVE: A
- 
55. AUTORES (p.o. de firma): G. I. Cárdenas-Jirón, M. Santander-Nelli, R. López y M. I. Menéndez  
 TÍTULO: Quantitative Structure Property Relationships to Evaluate the Photosensitizing Capability in Porphyrins and Chlorins  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Int. J. Quantum. Chem.* 111, 1570-1582 (2011) CLAVE: A
-

- 
56. AUTORES (p.o. de firma): M. Brill, J. Díaz, M. A. Huertos, R. López, J. Pérez y L. Riera  
 TÍTULO: Imidazole to NHC Rearrangements at Molybdenum Centers: An Experimental and Theoretical Study  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Chem. Eur. J.* 17, 8584-8595 (2011) CLAVE: A
- 
57. AUTORES (p.o. de firma): V. Yeguas, M. Altarsha, G. Monard, R. López y M. F. Ruiz-López  
 TÍTULO: Peptide Binding to  $\beta$ -Cyclodextrins: Structure, Dynamics, Energetics, and Electronic Effects  
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. A* 115, 11810-11817 (2011) CLAVE: A
- 
58. AUTORES (p.o. de firma): L. Ion, S. Nieto, J. Pérez, L. Riera, V. Riera, J. Díaz, R. López, K. M. Anderson y J. W. Steed  
 TÍTULO: Two Different Hydrogen Bond Donor Ligands Together: A Selective Improvement in Organometallic  $\{\text{Re}(\text{CO})_3\}$  Anion Hosts  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Inorg. Chem.* 50, 8524-8531 (2011) CLAVE: A
- 
59. AUTORES (p.o. de firma): G. I. Cárdenas, C. A. Barboza, R. López y M. I. Menéndez  
 TÍTULO: Theoretical Study on the Electronic Excitations of a Porphyrin-Polypyridil Ruthenium(II) Photosensitizer  
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. A* 115, 11988-11997 (2011) CLAVE: A
- 
60. AUTORES (p.o. de firma): E. Tílviz, M. I. Menéndez y R. López  
 TÍTULO: On the Mechanism of the  $[\text{Cp}_2\text{Mo}(\text{OH})(\text{OH}_2)]^+$ -Catalyzed Nitrile Hydration to amides: A Theoretical Study  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Organometallics* 31, 1618-1626 (2012) CLAVE: A
- 
61. AUTORES (p.o. de firma): E. Tílviz, M. I. Menéndez y R. López  
 TÍTULO: A Theoretical Investigation on the Oxidation of Carbon Monoxide by an Aqueous Molybdocene  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Eur. J. Inorg. Chem.* 4445-4453 (2012) CLAVE: CL
- 
62. AUTORES (p.o. de firma): B. Alcaide, P. Almendros, R. Carrascosa, R. López y M. I. Menéndez  
 TÍTULO: Gold-Catalyzed Bis-Cyclization of 1,2-Diol- or Acetonide-Tethered Alkynes. Synthesis of  $\beta$ -Lactam-Bridged Acetals: A Combined Experimental and Theoretical Study  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Tetrahedron* 68, 10748-10760 (2012) CLAVE: A
- 
63. AUTORES (p.o. de firma): J. Méndez-Hurtado, R. López, D. Suárez y M. I. Menéndez  
 TÍTULO: Theoretical Study of the Oxidation of Histidine by Singlet Oxygen  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Chem. Eur. J.* 18, 8437-8447 (2012) CLAVE: A
- 
64. AUTORES (p.o. de firma): D. Morales, M. Puerto, I. del Río, J. Pérez y R. López  
 TÍTULO: Interaction between Anions and Molybdenum Allyl Dicarbonyl Complexes of 1,4,7-Trithiacyclononane  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Chem. Eur. J.* 18, 16186-16195 (2012) CLAVE: A
- 
65. AUTORES (p.o. de firma): B. Alcaide, P. Almendros, T. Quirós, R. López, M. I. Menéndez y A. Sochacka-Cwikla  
 TÍTULO: Unveiling the Reactivity of Propargylic Hydroperoxides under Gold Catalysis  
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Am. Chem. Soc.* 135, 898-905 (2013) CLAVE: A
- 
66. AUTORES (p.o. de firma): M. Altarsha, V. Yeguas, F. Ingrosso, R. López y M. F. Ruiz-López  
 TÍTULO: Taste for Chiral Guests: Investigating the Stereoselective Binding of Peptides to  $\beta$ -Cyclodextrins  
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. B* 117, 3091-3097 (2013) CLAVE: A
-

- 
67. AUTORES (p.o. de firma): E. Tílvez, M. I. Menéndez y R. López  
 TÍTULO: Unravelling the Reaction Mechanism on Nitrile Hydration Catalyzed by  $[\text{Pd}(\text{OH}_2)_4]^{2+}$ : Insights from Theory  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Inorg. Chem.* 118, 1194-1199 (2013) CLAVE: A
- 
68. AUTORES (p.o. de firma): D. Suárez, M. Zakarianezhad y R. López  
 TÍTULO: Insights on the Hydrolytic Chemistry of Molybdocene Dichloride: A Theoretical Chemistry Viewpoint  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Theor. Chem. Acc.* 132, 1409-1419 (2013) CLAVE: A
- 
69. AUTORES (p.o. de firma): D. Suárez, N. Díaz y R. López  
 TÍTULO: A Combined Semiempirical and DFT Computational Protocol for Studying Bioorganometallic Complexes: Application to Molybdocene-Cysteine Complexes  
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Comput. Chem.* 35, 324-334 (2014) CLAVE: A
- 
70. AUTORES (p.o. de firma): J. Méndez-Hurtado, M. I. Menéndez, R. López y M. F. Ruiz-López  
 TÍTULO: An Ab Initio Analysis of the Structure of L-Tryptophan Tautomers in Microhydrated Environments, in Water and in Hydrophobic Solvents  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Comput. Theor. Chem.* 1034, 17-25 (2014) CLAVE: A
- 
71. AUTORES (p.o. de firma): J. Méndez-Hurtado, R. López, M. I. Menéndez y M. F. Ruiz-López  
 TÍTULO: Unravelling the Intramolecular Cyclization Mechanism of Oxidized Tryptophan in Aqueous Solution as a Function of pH  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Org. Biomol. Chem.* 13, 8695-8702 (2015) CLAVE: A
- 
72. AUTORES (p.o. de firma): E. Tílvez, G. I. Cárdenas-Jirón, M. I. Menéndez y R. López  
 TÍTULO: Understanding the Hydrolysis Mechanism of Ethyl Acetate Catalyzed by an Aqueous Molybdocene: A Computational Chemistry Investigation  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Inorg. Chem.* 54, 1223-1231 (2015) CLAVE: A
- 
73. AUTORES (p.o. de firma): A. Cebollada, M. Espinal-Viguri, J. Pérez, J. Díaz, R. López y L. Riera  
 TÍTULO: Influence of the N-N Coligand: C-C Coupling Instead of Formation of Imidazol-2-yl Complexes at  $\{\text{Mo}(\eta^3\text{-allyl})(\text{CO})_2\}$  Fragments. Theoretical and Experimental Studies  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Inorg. Chem.* 54, 2580-2590 (2015) CLAVE: A
- 
74. AUTORES (p.o. de firma): E. Tomás-Mendivil, V. Cadierno, M. I. Menéndez y R. López  
 TÍTULO: Unmasking the Action of Phosphinous Acid Ligands in Nitrile Hydration Reactions Catalyzed by Arene-Ruthenium(II) Complexes  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Chem. Eur. J.* 21, 16874-16886 (2015) CLAVE: A
- 
75. AUTORES (p.o. de firma): S. Fombona, M. Espinal-Viguri, M. A. Huertos, J. Díaz, R. López, M. I. Menéndez, J. Pérez y L. Riera  
 TÍTULO: Activation of Aromatic C-C Bonds of 2,2'-Bipyridine Ligands  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Chem. Eur. J.* 22, 17160-17164 (2016) CLAVE: A
- 
76. AUTORES (p.o. de firma): R. Arévalo, M. I. Menéndez, R. López, I. Merino, L. Riera y J. Pérez  
 TÍTULO: Nucleophilic Additions to Coordinated 1,10-phenanthroline: Intramolecular, Intermolecular, Reversible and Irreversible  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Chem. Eur. J.* 22, 17972-17975 (2016) CLAVE: A
- 
77. AUTORES (p.o. de firma): M. I. Menéndez, R. López, M. Yáñez y G. I. Cárdenas-Jirón  
 TÍTULO: Tautomerization Mechanism and Spectral Properties of Porphyrin-Glucose Complexes as Models of Antibacterial Material  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Theor. Chem. Acc.* 135, 122-136 (2016) CLAVE: A
-

- 
78. AUTORES (p.o. de firma): Y. Fernández-Pulido, E. Suárez, R. López, M. Isabel Menéndez  
 TÍTULO: The Role of CuCl on the Mechanism of Dibenzo-p-Dioxin Formation from Poly-Chlorophenol Precursors: A Computational Study  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Chemosphere* 145, 77-82 (2016) CLAVE: A
- 
79. AUTORES (p.o. de firma): D. Álvarez, R. Mera-Adasme, L. Riera, G. I. Cárdenas-Jirón, J. Pérez, J. Díaz, M. I. Menéndez, y R. López  
 TÍTULO: Insights on the Reactivity of Terminal Phosphanido Metal Complexes toward Activated Alkynes from Theoretical Computations  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Inorg. Chem.* 56, 6652-6661 (2017) CLAVE: A
- 
80. AUTORES (p.o. de firma): R. González-Fernández, P. Crochet, V. Cadierno, M. I. Menéndez y R. López  
 TÍTULO: Phosphinous Acid-Assisted Hydration of Nitriles: Understanding the Controversial Reactivity of Osmium and Ruthenium Catalysts  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Chem. Eur. J.* 23, 15210-15221 (2017) CLAVE: A
- 
81. AUTORES (p.o. de firma): M. Espinal-Viguri, S. Fombona, D. Álvarez, J. Díaz, M. I. Menéndez, R. López, J. Pérez y L. Riera  
 TÍTULO: Regiochemistry Control by Bipy Substituents in the Deprotonation of Re(I) and Mo(II) N-Alkylimidazole Complexes  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Chem. Eur. J.* 25, 9253-9265 (2019) CLAVE: A
- 
82. AUTORES (p.o. de firma): Y. Fernández-Pulido, R. López y M. I. Menéndez  
 TÍTULO: Gold(I) Catalyzed Intermolecular Dioxolane Addition to Alkynes: The Role of Water  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Theor. Chem. Acc.* 138, 74 (2019) CLAVE: A
- 
83. AUTORES (p.o. de firma): D. Álvarez, E. Castro-López, Y. Fernández-Pulido, M. Isabel Menéndez y R. López  
 TÍTULO: [Cp<sub>2</sub>Mo(OH)(OH<sub>2</sub>)]<sup>+</sup>-Catalyzed Hydrolysis of Mono- and Difunctional Ethers: Theoretical Understanding of Their Divergent Reactivity  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Eur. J. Inorg. Chem.* 2924-2932 (2019) CLAVE: A
- 
84. AUTORES (p.o. de firma): M. Borges-Martínez, D. Álvarez, N. Montenegro-Pohlhammer, M. Isabel Menéndez, R. López y G. I. Cárdenas-Jirón  
 TÍTULO: Assessment of BODIPY-Oxasmaragdyrin Dyads for Dye Sensitized Solar Cells: Aromaticity, Photosensitization Capability and Charge Transport  
 REF. REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. C* 123, 19362-19375 (2019) CLAVE: A
- 
85. AUTORES (p.o. de firma): D. Álvarez, J. Díaz, M. Isabel Menéndez y R. López  
 TÍTULO: Addition of Re-Bonded Nucleophilic Ligands to Activated Alkynes: A Theoretical Rationalization  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Eur. J. Inorg. Chem.* 269-280 (2020) CLAVE: A
- 
86. AUTORES (p.o. de firma): R. González-Fernández, D. Álvarez, P. Crochet, V. Cadierno, M. Isabel Menéndez y R. López  
 TÍTULO: Catalytic Hydration of Cyanamides with Phosphinous Acid-Based Ruthenium(II) and Osmium(II) Complexes: Scope and Mechanistic Insights  
 REF. REVISTA/LIBRO: *Catal. Sci. Technol.* 10, 4084-4098 (2020) CLAVE: A
- 

**Nota:** Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.



- 
87. AUTORES (p.o. de firma): D. Álvarez, Elena López-Castro, A. Guerrero, L. Riera, J. Pérez, J. Díaz, M. Isabel Menéndez y R. López  
TÍTULO: Influence of the Nucleophilic Ligand on the Reactivity of Carbonyl Rhenium(I) Complexes towards Methyl Propiolate: A Computational Chemistry Perspective  
REF. REVISTA/LIBRO: *Molecules* 25, 4134 (2020) CLAVE: A
- 
88. AUTORES (p.o. de firma): R. Arévalo, R. López, L. R. Falvello, L. Riera y J. Pérez  
TÍTULO: Building C(sp<sup>3</sup>) Molecular Complexity on 2,2'-Bipyridine and 1,10-Phenanthroline in Rhenium Tricarbonyl Complexes  
REF. REVISTA/LIBRO: *Chem. Eur. J.* 27, 379-389 (2021) CLAVE: A
- 
89. AUTORES (p.o. de firma): D. Álvarez, M. I. Menéndez y R. López  
TÍTULO: Computational Design of Rhenium(I) Carbonyl Complexes for Anticancer Photodynamic Therapy  
REF. REVISTA/LIBRO: *Inorg. Chem.* 61, 439-455 (2022) CLAVE: A
- 
90. AUTORES (p.o. de firma): P. Cañadas, J. Pérez, R. López y L. Riera  
TÍTULO: 1,10-Phenanthroline Ring-Opening Mediated by *cis*-{Re(CO)<sub>2</sub>} Complexes  
REF. REVISTA/LIBRO: *Inorg. Chem. Front.* 10, 900-907 (2023) CLAVE: A
- 
91. AUTORES (p.o. de firma): M. I. Menéndez, N. Montenegro-Pohlhammer, R. Pino-Ríos, R. Urzúa-Leiva, S. Morales-Lovera, M. Borges-Martínez, K. Granados-Tavera, R. López y G. Cárdenas-Jirón  
TÍTULO: Near-Infrared Absorption of Fused Core-Modified Expanded Porphyrins for Dye-Sensitized Solar Cells  
REF. REVISTA/LIBRO: *J. Chem. Phys.* 158, 164305 (2023) CLAVE: A
- 
92. AUTORES (p.o. de firma): P. Cañadas, J. Díaz, R. López, M. I. Menéndez, J. Pérez, y L. Riera  
TÍTULO: Elucidation of the Pyridine Ring-Opening Mechanism of 2,2'-Bipyridine or 1,10-Phenanthroline Ligands at Re(I) Carbonyl Complexes  
REF. REVISTA/LIBRO: *Inorg. Chem.* 63, 8593-8603 (2024) CLAVE: A
- 
93. AUTORES (p.o. de firma): D. Álvarez, R. López y M. I. Menéndez  
TÍTULO: Theoretical Insights on Spectral and Electrochemical Properties of BODIPY-bipyridine and Re(BODIPY-bipyridine)(CO)<sub>3</sub>Cl Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells  
REF. REVISTA/LIBRO: *J. Indian Chem. Soc.* 102, 101953 (2025) CLAVE: A
-

**Estancias en Centros extranjeros**  
(estancias continuadas superiores a un mes)

CLAVE: D = doctorado, P = postdoctoral, I = invitado, C = contratado, O = otras (especificar).

---

Centro: Laboratoire de Chimie Théorique. Université Henri Poincaré-Nancy I  
Localidad: Vandoeuvre-lès-Nancy País: Francia Fecha: 1995 Duración (semanas): 52  
Tema: Estudio ab initio de reacciones químicas en fase líquida.  
Clave: P

---

Centro: Equipe de Chimie et Biochimie Théoriques. Université Henri Poincaré-Nancy I  
Localidad: Vandoeuvre-lès-Nancy País: Francia Fecha: abril-mayo 2008 Duración (semanas): 8,5  
Tema: Estudio químico-computacional de la hidrólisis selectiva de enlaces peptídicos X-Pro mediante un complejo conjugado Pd(II)-beta-ciclodextrina  
Clave: I

---

Centro: Equipe de Chimie et Biochimie Théoriques. Université Henri Poincaré-Nancy I  
Localidad: Vandoeuvre-lès-Nancy País: Francia Fecha: abril-junio 2009 Duración (semanas): 13  
Tema: Estudio químico-computacional de la hidrólisis selectiva de enlaces peptídicos X-Pro mediante un complejo conjugado Pd(II)-beta-ciclodextrina  
Clave: I

---

Centro: Departamento de Ciencias del Ambiente. Facultad de Química y Biología. Universidad de Santiago de Chile  
Localidad: Santiago País: Chile Fecha: mayo-julio 2016 Duración (semanas): 13  
Tema: Diseño molecular y estudio DFT/TD-DFT de nuevas porfirinas expandidas para células solares sensibilizadas por colorantes  
Clave: I

---

---

**Nota:** Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

## Contribuciones a Congresos

---

1. AUTORES: R. López, J. A. Sordo y T.L. Sordo.  
TÍTULO: An alternative method to assess the quality of Hartree-Fock-Roothaan wave functions.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: XVII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Peñíscola (España) FECHA: 22-25/9/1987

---

2. AUTORES: R. López, J. A. Sordo y T.L. Sordo.  
TÍTULO: Theoretical study of the formation of cyclopropenyl cation from  $\text{CH}^+$  and acetylene.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: XX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Roma (Italia) FECHA: 10-14/9/1990

---

3. AUTORES: R. López, J. A. Sordo, T.L. Sordo y F. J. González.  
TÍTULO: Estudio teórico de la cicloadición de iminas con cetenos.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: Congreso de Química Orgánica.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Valencia (España) FECHA: Abril, 1992

---

4. AUTORES: R. López, J. A. Sordo y T.L. Sordo.  
TÍTULO: El efecto de la calidad de las bases en la descripción de las estructuras de transición: Estudio del ataque  $\pi$  del catión metilo al acetileno.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: XXI Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: GrènoBLE (Francia) FECHA: 20-24/9/1993

---

5. AUTORES: R. López, J. A. Sordo y T.L. Sordo.  
TÍTULO: Ab initio study of the formation of  $\text{C}_3\text{H}_3^+$  from the reaction of  $\text{CH}_3^+$  with acetylene.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 8th. International Congress of Quantum Chemistry.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Praga (República Checa) FECHA: 19-23/6/1994

---

6. AUTORES: D. Suárez, R. López, T. L. Sordo y J. A. Sordo.  
TÍTULO: Substituents effects on the hetero-Diels-Alder reaction of sulfur dioxide with 1,3-dienes: The importance of CH...O hydrogen.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 8th. International Congress of Quantum Chemistry.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Praga (República Checa) FECHA: 19-23/6/1994

---

7. AUTORES: R. López, M.F. Ruiz-López, T.L. Sordo y J.A. Sordo.  
TÍTULO: Electronic configuration analysis of the *inward-outward* transition states in the ketene-imine cycloaddition reactions.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 5th European Symposium on Organic Reactivity.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santiago de Compostela (España) FECHA: 16-21/7/1995

---

---

8. AUTORES: R. López, M.F. Ruiz-López, J.A. Sordo y T.L. Sordo.  
TÍTULO: Solvents effects by ab initio calculations on the anionic ester enolate-imine condensation route to  $\beta$ -lactams.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 5th European Symposium on Organic Reactivity.

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santiago de Compostela (España) FECHA: 16-21/7/1995

---

9. AUTORES: R. López, J.A. Sordo, T.L. Sordo y M.F. Ruiz-López.  
TÍTULO: A theoretical study of solvent effects on the mechanism of fluoroketene-formaldimine cycloaddition reaction.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 5th European Symposium on Organic Reactivity.

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santiago de Compostela (España) FECHA: 16-21/7/1995

---

10. AUTORES: R. López  
TÍTULO:  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia.  
CONGRESO: 6th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics.

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: París (Francia) FECHA: 29/8/95-1/9/1995

---

11. AUTORES: R. López  
TÍTULO:  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia.  
CONGRESO: 4<sup>ème</sup> Université d'Été de Physico-Chimie Théorique: Methods, dynamique réactionnelle et chimie organométallique.

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Mittelwihr, Haut-Rhin (Francia) FECHA: 18-22/9/1995

---

12. AUTORES: R. López, E. del Río, M.I. Menéndez, J.A. Sordo y T.L. Sordo.  
TÍTULO: Estudio teórico de la formación de  $C_3H_3^+$  a partir del ataque del  $CH_2F^+$  al acetileno.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: XXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Cáceres (España) FECHA: 16-20/9/1996

---

13. AUTORES: E. del Río, R. López, J.A. Sordo y T.L. Sordo.  
TÍTULO: Estudio ab initio de la reacción  $C_2H_5^+ \rightarrow C_2H_3^+ + H_2$ .  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: XXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Cáceres (España) FECHA: 16-20/9/1996

---

14. AUTORES: R. López, M.F. Ruiz-López, D. Rinaldi, J.A. Sordo y T.L. Sordo.  
TÍTULO: Síntesis de  $\beta$ -lactamas a partir de fluorocetenos e iminas: Superficies de energía potencial ab initio en fase gas *versus* disolución.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación oral.  
CONGRESO: XXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Cáceres (España) FECHA: 16-20/9/1996

---

---

15. AUTORES: R. López, D. Suárez, M.F. Ruiz-López y T.L. Sordo.  
TÍTULO: Theoretical study of the [2+2] cycloaddition of thioketenes with imines to give  $\beta$ -thiolactams.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: Second European Conference on Computational Chemistry (EUCC-2).

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lisboa (Portugal) FECHA: 2-6/9/1997

---

16. AUTORES: E. del Río, R. López y T.L. Sordo.  
TÍTULO: A theoretical study of the  $H_2$  elimination from  $C_6H_7^+$ : An example of the role of back-donation in carbocation chemistry.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación oral.  
CONGRESO: Second European Conference on Computational Chemistry (EUCC-2).

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lisboa (Portugal) FECHA: 2-6/9/1997

---

17. AUTORES: E. del Río, R. López, M.I. Menéndez y T.L. Sordo.  
TÍTULO: Gas-phase interconversion of  $HCO^+$  into  $COH^+$  and their reaction with  $H_2O$  and  $NH_3$ : An ab initio study.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: III Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Mira (Portugal) FECHA: 4-7/5/1998

---

18. AUTORES: E. del Río, R. López, M.I. Menéndez y T.L. Sordo.  
TÍTULO: Ab initio study of the reaction of  $HCO^+$  with  $C_2H_2$ .  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 5th World Congress of Theoretically Oriented Chemists (WATOC'99).

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Londres (Reino Unido) FECHA: 1-6/8/1999

---

19. AUTORES: E. del Río, R. López, M.I. Menéndez y T.L. Sordo.  
TÍTULO: Ab initio study of the reaction of  $C_3H_3^+$  with  $NH_3$  and  $H_2O$ .  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 5th World Congress of Theoretically Oriented Chemists (WATOC'99).

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Londres (Reino Unido) FECHA: 1-6/8/1999

---

20. AUTORES: E. del Río, R. López, M.I. Menéndez y T.L. Sordo.  
TÍTULO: Theoretical study of formation of phenonium ion.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 5th World Congress of Theoretically Oriented Chemists (WATOC'99).

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Londres (Reino Unido) FECHA: 1-6/8/1999

---

21. AUTORES: R. López y T.L. Sordo.  
TÍTULO: A DFT study of sites of complexation of Cu(II) with penicillins.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: Electronic Structure and Chemical Reactivity.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona (España) FECHA: 19-22/9/2001

---

---

22. AUTORES: R. López y T.L. Sordo.  
TÍTULO: A theoretical study of the N<sub>2</sub>O formation from the reaction of NO with pyridine.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 3<sup>rd</sup> Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2002)

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Sevilla (España) FECHA: 11-13/9/2002

---

23. AUTORES: R. López y T.L. Sordo.  
TÍTULO: A theoretical study of structural divergence in the [MoX(η<sup>3</sup>-C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>)(CO)<sub>2</sub>(dmpm)] (X = N<sub>3</sub>, CN) complexes.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: Modelling Chemical Reactivity: from gas-phase to solution and enzymes.

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Nancy (Francia) FECHA: 16-18/7/2003

---

24. AUTORES: E. Suárez, R. López y T.L. Sordo  
TÍTULO: A DFT study of the anionic mechanism of formation of poly-chlorinated dibenzo-*p*- dioxins from 2,4-dichlorophenol.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: Modelling Chemical Reactivity: from gas-phase to solution and enzymes.

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Nancy (Francia) FECHA: 16-18/7/2003

---

25. AUTORES: R. López y T.L. Sordo.  
TÍTULO: N<sub>2</sub>O formation from the reaction of NO with acridine: a theoretical investigation.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: Modelling Chemical Reactivity: from gas-phase to solution and enzymes.  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Nancy (Francia) FECHA: 16-18/7/2003

---

26. AUTORES: R. López y T.L. Sordo.  
TÍTULO: Implications of β-hydroxyethyl phenyl ether and benzenesulfonate anion in the formation of dibenzo-*p*-dioxins: a theoretical study.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 4<sup>th</sup> Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2004)

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Valladolid (España) FECHA: 15-17/9/2004

---

27. AUTORES: R. López, J. Pérez y T.L. Sordo.  
TÍTULO: Estudio teórico de la influencia de un ácido de Lewis en la geometría de coordinación del complejo [MoCN(η<sup>3</sup>-C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>)(CO)<sub>2</sub>(dmpm)].  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: XXXI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 2005)

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Margarita (Venezuela) FECHA: 2-6/10/2005

---

28. AUTORES: V. Yeguas, P. Campomanes y R. López  
TÍTULO: A theoretical investigation of the reactivity of molybdenum and rhenium hydroxo-carbonyl complexes toward esters.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 5<sup>th</sup> Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2006)

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santiago de Compostela (España) FECHA: 18-21/7/2006

---

---

29. AUTORES: V. Yeguas, N. Díaz, P. Campomanes y R. López  
TÍTULO: Ring opening at N1-C2 bond of azetidin-2-ones by a molybdenum hydroxo-carbonyl complex: evidence from computational studies.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 6<sup>th</sup> Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2008)

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Palma de Mallorca (España) FECHA: 2-5/9/2008

---

30. AUTORES: V. Yeguas, N. Díaz, D. Suárez, P. Campomanes y R. López  
TÍTULO: Understanding the selective cleavage of peptides and proteins by palladium(II) complexes through computational modeling techniques.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: Conference on Theoretical Chemistry: Modeling reactivity from gas phase to biomolecules and solids.

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona (España) FECHA: 29/6-3/7 2009

---

31. AUTORES: V. Yeguas, G. I. Cárdenas-Jirón, M. I. Menéndez y R. López  
TÍTULO: A computational study on the stability-aromaticity correlation of triply N-confused porphyrins.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: International Conference on Computational and Mathematical Methods in Science and Engineering CMMSE 2009.

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Gijón (España) FECHA: 30/6-3/7 2009

---

32. AUTORES: V. Yeguas, P. Campomanes y R. López  
TÍTULO: A computational study on the fluxional behaviour of molybdenum- $\eta^3$ -allylcarbonyl complexes: Comparison of density functionals and basis sets.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: XXXII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oviedo (España) FECHA: 13-18/9/2009

---

33. AUTORES: R. López, M. I. Menéndez, P. Campomanes, V. Yeguas y M. Zakarianezhadmiri  
TÍTULO: Understanding the conformation of molybdenum and rhenium hydroxo-carbonyl complexes: A theoretical study.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 7<sup>th</sup> Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2010)

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oviedo (España) FECHA: 29/6/2010-2/7/2010

---

34. AUTORES: V. Yeguas, R. López, A. Lambert, G. Monard y M. F. Ruiz-López  
TÍTULO: Modelling reactions in molecular reactors: Ester hydrolysis in a  $\beta$ -cyclodextrin as a test case.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 7<sup>th</sup> Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2010)

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oviedo (España) FECHA: 29/6/2010-2/7/2010

---

35. AUTORES: M. I. Menéndez, R. López y C. Iglesias  
TÍTULO: Oxydation of methionine by singlet molecular oxygen.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 7<sup>th</sup> Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2010)

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oviedo (España) FECHA: 29/6/2010-2/7/2010

---

---

36. AUTORES: E. Tílviz, M. I. Menéndez, N. Díaz, D. Suárez y R. López  
TÍTULO: Ligand effects on the relative stability of Pd(II)/peptide complexes.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 7<sup>th</sup> Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2010)

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oviedo (España) FECHA: 29/6/2010-2/7/2010

---

37. AUTORES: E. Tílviz, M. I. Menéndez y R. López  
TÍTULO: A DFT investigation on the acrylonitrile hydration to acrylamide catalyzed by aqueous molybdocenes  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 9<sup>th</sup> Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2011)

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santiago de Compostela (España) FECHA: 17-22/7/2011

---

38. AUTORES: J. Méndez-Hurtado, R. López, M. I. Menéndez y M. F. Ruiz-López  
TÍTULO: Theoretical study of reaction mechanism of tryptophan-hydroperoxide decomposition through a tricyclic hydroperoxide intermediate.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 9<sup>th</sup> Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2011)

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santiago de Compostela (España) FECHA: 17-22/7/2011

---

39. AUTORES: E. Tílviz, M. I. Menéndez y R. López  
TÍTULO: A Theoretical Investigation on the Oxidation of Carbon Monoxide by Aqueous Molybdocenes  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 8th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2012)

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona (España) FECHA: 26-29/6/2012

---

40. AUTORES: R. López, E. Tílviz y M. I. Menéndez  
TÍTULO: Unravelling the reaction mechanism on nitrile hydration catalyzed by  $[Pd(OH_2)_4]^{2+}$ : insights from theory  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: XXXIX International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression (QUITEL2013)

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Granada (España) FECHA: 30/6/2013-5/7/2013

---

41. AUTORES: R. López, D. Suárez y M. Zakarianezhad  
TÍTULO: Insights on the hydrolytic chemistry of molybdocene dichloride: a theoretical chemistry viewpoint  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: XXXIX International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression (QUITEL2013)

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Granada (España) FECHA: 30/6/2013-5/7/2013

---

42. AUTORES: R. López, Y. Fernández y M. I. Menéndez  
TÍTULO: A DFT Investigation on Ether Hydrolysis by Molybdocenes.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 9th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2014)

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Badajoz (España) FECHA: 2-4/7/2014

---



---

43. AUTORES: M. I. Menéndez, Méndez-Hurtado y R. López  
TÍTULO: Ring-Chain and Neutral-Zwitterionic Tautomerizations of Aqueous 3-Hydroperoxyindolenine: A PCM Description.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 9th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2014)

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Badajoz (España) FECHA: 2-4/7/2014

---

44. AUTORES: G. I. Cárdenas-Jirón, E. Tílvex, M. I. Menéndez y R. López  
TÍTULO: A Computational Chemistry Study on the Hydrolysis Mechanism of Ethyl Acetate Catalyzed by an Aqueous Molybdocene.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 10th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2014)

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santiago (Chile) FECHA: 5-10/10/2014

---

45. AUTORES: R. López y J. Díaz  
TÍTULO: New reactivities in the deprotonation of  $\{\text{Mo}(\eta^3\text{-allyl})(\text{CO})_2(\text{N-RIm})\}$ -containing complexes: A theoretical mechanistic investigation.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: Organometallic Chemistry Directed Towards Organic Synthesis (OMCOS18)

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Sitges-Barcelona (España) FECHA: 28/6/2015-2/7/2015

---

46. AUTORES: M. I. Menéndez, D. Álvarez-Lorenzo y R. López  
TÍTULO: Understanding the reactivity of terminal(phosphanido)metal complexes toward activated alkynes by means of DFT computations  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 10th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2016)

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Castellón de la Plana (España) FECHA: 28/6/2016-1/7/2016

---

47. AUTORES: R. López, D. Álvarez y M. I. Menéndez  
TÍTULO: A theoretical mechanistic study on the reaction of a rhenium hydroxo complex toward methyl propiolate  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Asistencia y presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2017)

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Munich (Alemania) FECHA: 27/8/2017-1/9/2017

---

48. AUTORES: M. I. Menéndez, D. Álvarez Lorenzo y R. López  
TÍTULO: New aspects of the reactivity of rhenium tricarbonyl complexes towards activated alkynes through DFT calculations  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2017)

---

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Munich (Alemania) FECHA: 27/8/2017-1/9/2017

---

---

49. AUTORES: M. I. Menéndez, Y. Fernández-Pulido, O. Martínez-Rico y R. López  
TÍTULO: Transition metal complexes to activate or insert alkynyl compounds  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 11th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2018)

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Toledo (España) FECHA: 17/7/2018-19/7/2018

---

50. AUTORES: D. Álvarez-Lorenzo, S. Fombona, L. Riera, J. Pérez, M. I. Menéndez y R. López  
TÍTULO: Intramolecular rearrangements of  $[\text{Re}(4,4'\text{-NMe}_2\text{-}2,2'\text{-bipy})(\text{CO})_3(\text{N-RIm})]$ : R=Mes vs R=Me. Effect of the dispersion energy  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 11th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2018)

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Toledo (España) FECHA: 17/7/2018-19/7/2018

---

51. AUTORES: D. Álvarez-Lorenzo, E. Castro, R. López y M. I. Menéndez  
TÍTULO: Hidrólisis de éteres catalizada por molibdocenos  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: XXXVII Biental de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ-2019)

LUGAR DE CELEBRACIÓN: San Sebastián (España) FECHA: 26/5/2019-30/5/2019

---

52. AUTORES: D. Álvarez, M. I. Menéndez y R. López  
TÍTULO: Computational design of rhenium(I) carbonyl complexes for anticancer photodynamic therapy  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: XVII Simposio de Investigadores Jóvenes de la Real Sociedad Española de Química

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Alcalá de Henares (España) FECHA: 23/11/2021-26/11/2021

---

53. AUTORES: M. I. Menéndez, R. López y D. Álvarez  
TÍTULO: New Re-BODIPY complexes as dyes for dye sensitized solar cells  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 12th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2022)

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Vigo (España) FECHA: 21/6/2022-24/6/2022

---

54. AUTORES: P. Cañadas, J. Pérez, R. López y L. Riera  
TÍTULO: 1,10-Phenanthroline ring-opening mediated by cis- $\{\text{Re}(\text{CO})_2\}$  complexes  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: XXXIX Reunión Biental de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ)

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Zaragoza (España) FECHA: 25/6/2023-29/6/2023

---

55. AUTORES: M. Isabel Menéndez, R. López y D. Álvarez  
TÍTULO: Photo-physical/chemical properties of new Mo/Re carbonyl complexes  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación de una comunicación escrita.  
CONGRESO: 13th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2025)

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oslo (Noruega) FECHA: 22/6/2025-27/6/2025

---

---

**Nota:** Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

## Tesis Doctorales dirigidas

---

1. Título: Reacciones ión-molécula en la Química Interestelar y de la Combustión: Estudio Teórico.

Doctoranda: Emma del Río Redondo

Universidad: Universidad de Oviedo

Facultad/Escuela: Facultad de Química

Año: 1999

Calificación: Apto Cum Laude

---

2. Título: Reacciones de fragmentación y expansión radicalaria e iónica de ciclos pequeños asistida por HFIP y complejos de rodio y cobalto: Estudio teórico en disolución.

Doctorando: Diego Ardura Martínez

Universidad: Universidad de Oviedo

Facultad/Escuela: Facultad de Química

Año: 2007

Calificación: Sobresaliente Cum Laude

---

3. Título: Reacciones de adición-eliminación de complejos organometálicos y/o agua a disulfuro de carbono, ésteres, amidas y péptidos: Un estudio teórico.

Doctoranda: Violeta Yeguas García

Universidad: Universidad de Oviedo

Facultad/Escuela: Facultad de Química

Año: 2009

Calificación: Sobresaliente Cum Laude

---

4. Título: Química organometálica en disolución acuosa: estudio teórico de reacciones catalizadas por molibdocenos y complejos de paladio.

Doctorando: Elkin Alberto Tílviz Marrugo

Universidad: Universidad de Oviedo

Facultad/Escuela: Facultad de Química

Año: 2014

Calificación: Sobresaliente Cum Laude

---

5. Título: Reactivity and Photoactivity on Rhenium and Molybdenum Complexes: A Theoretical Study.

Doctorando: Daniel Álvarez Lorenzo

Universidad: Universidad de Oviedo

Facultad/Escuela: Facultad de Química

Año: 2021

Calificación: Sobresaliente Cum Laude

---

## Experiencia en organización de actividades de I+D+i

Organización de congresos, seminarios, jornadas, etc., científico-tecnológicos

---

Título: Electronic Structure: Principles and Applications – ESPA2010

Tipo de actividad: Organización de Congreso

Ámbito: Internacional

Fecha: 29 de junio-2 de julio de 2010

---

---

**Nota:** Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

### Otros méritos o aclaraciones que se desee hacer constar

- 1) Premio Extraordinario de Doctorado en el Curso Académico 1994-1995 por la Tesis Doctoral titulada "Mecanismo de la formación de ciclos de tres y cuatro centros: Estudio Teórico."
- 2) Estancias de Investigación en otros Centros (duración inferior a un mes):
  - Departamento de Química Física de la Universidad de Valencia durante los días 2 al 9 de septiembre de 1995.
  - Departamento de Química de la Universidad Autónoma de Barcelona durante los días 15 al 19 de diciembre de 1998.
  - Departamento de Ciencias Químicas de la Facultad de Química y Biología de la Universidad de Santiago de Chile desde el 12 al 20 de diciembre de 2006.
  - Departamento de Ciencias Químicas de la Facultad de Química y Biología de la Universidad de Santiago de Chile desde el 27 de noviembre al 10 de diciembre de 2011.
- 3) Participación en cursos informáticos: Introducción al Trabajo Interactivo con el Ordenador IBM-4341, celebrado en el mes de marzo de 1987, en el Centro de Proceso de Datos de la Universidad de Oviedo, Introducción al Sistema Operativo VM/SP, Nivel II llevado a cabo en el Centro de Proceso de Datos de la Universidad de Oviedo en mayo de 1988, Programación en Paralelo de IBM impartido en la Universidad de Extremadura, Badajoz, desde el 11 al 13 de abril de 2000 y Aplicaciones de la dinámica molecular de Car-Parrinello al estudio de problemas biológicos celebrado en el Parc Científic de Barcelona del 23 al 26 de noviembre de 2004.
- 4) Presentación de la conferencia titulada "Estudios teóricos sobre mecanismos de formación de  $\beta$ -lactamas a partir de reacciones de cicloadición ceteno-imina" en la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad de Burjasot (Valencia) en el año 1995.
- 5) Tres tesis de licenciatura dirigidas: Estudio teórico de la formación de dibenzo-*p*-dioxinas policloradas a través de un mecanismo aniónico del licenciado D. Ernesto Suárez Álvarez (Noviembre, 2005), Estudio teórico de la reactividad de hidroxocomplejos carbonílicos de renio y molibdeno con el acetato de fenilo de la licenciada D<sup>a</sup> Violeta Yeguas García (Noviembre, 2006) y Formación de dibenzo-*p*-dioxina por condensación de 2-clorofenol catalizada por cobre: estudio teórico de la licenciada D<sup>a</sup> Yoana Fernández Pulido (julio 2012).
- 6) Un seminario de investigación dirigido: Estudio teórico de la reactividad de hidroxocomplejos carbonílicos de renio y molibdeno hacia 2-azetidinona: Efecto del SO<sub>3</sub> de la licenciada D<sup>a</sup> Violeta Yeguas García (junio, 2007).
- 7) Un trabajo fin de master dirigido: Insights on the reactivity of terminal phosphanido metal complexes toward activated alkynes from theoretical computations presentado por el graduado en Química D. Daniel Álvarez Lorenzo el día 6 de julio de 2017.
- 8) Concesión de una ayuda del Programa de "Ayudas para estancias breves de profesores de la Universidad de Oviedo en otros centros de investigación" (Resolución de 8 de abril de 2008 del Vicerrectorado de Investigación y Relaciones con la Empresa de la Universidad de Oviedo).
- 9) Concesión de una ayuda (Ref.: PR2008-0021) del Programa de "Estancias de movilidad de profesores e investigadores seniors en centros extranjeros de enseñanza superior e investigación, excepcionalmente españoles, incluido el Programa Salvador de Madariaga" (Resolución de 30 de julio de 2008 de la Secretaría de Estado de Universidades del Ministerio de Ciencia e Investigación).
- 10) Concesión de una ayuda (Ref.: PR2015-00259) del Programa de "Estancias de movilidad de profesores e investigadores seniors en centros extranjeros de enseñanza superior e investigación, incluido el Programa Salvador de Madariaga" (Resolución de 23 de noviembre de 2015 de la Secretaría de Estado de Educación, Formación Profesional y Universidades del Ministerio de Educación, Cultura y Deportes).

- 11) Participación como Tutor en el programa de *Inmersión en la Investigación*, organizado por la Facultad de Química de Oviedo entre el 20 y el 24 de junio de 2005 con una duración de 25 horas.
- 12) Colaboración científica con: Mohammad Zakarianezhad (Payame Noor University of Tehran, Irán), Benito Alcalde (Universidad Complutense de Madrid, España), Gloria I. Cárdenas Jirón (USACH, Chile), Manuel F. Ruiz-López (University of Lorraine, Nancy, Francia), Julio A. Pérez (Universidad de Oviedo, España), Jesús Díaz (Universidad de Extremadura, España), Victorio Cadierno (Universidad de Oviedo, España) y Pablo Campomanes (University of Fribourg, Suiza).
- 13) Censor de revistas internacionales pertenecientes a las editoriales Elsevier (*Computational and Theoretical Chemistry*, *Journal of Molecular Modeling*, *Journal of Molecular Structure*, *Biochemistry and Biophysics Reports* y *Chemical Physics Letters*), Springer (*Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis* y *Theoretical Chemistry Accounts*), Royal Society of Chemistry (*RSC Advances*) y American Chemical Society (*Inorganic Chemistry*, *Journal of Organic Chemistry* y *Macromolecules*).
- 14) Evaluación positiva de cinco sexenios de investigación y seis quinquenios de docencia.
- 15) Concesión de dos Proyectos de Innovación Docente por la Universidad de Oviedo en concurrencia competitiva: 1) Material didáctico informático para la asignatura Introducción a la Experimentación en Química Física (PB-03-016; 21 de mayo de 2015); 2) Vídeos tutoriales: una herramienta para el aprendizaje autónomo en laboratorios de Química e Ingeniería Química (Expediente 304004, 28 de noviembre de 2022).
- 16) Publicación en la Revista Latinoamericana de Tecnología Educativa (RELATEC) del trabajo titulado “Una experiencia sobre la elaboración de material didáctico informático para complementar una asignatura de laboratorio en la Licenciatura en Química” (Ref.: T.L. Sordo Gonzalo, R. López Rodríguez y M. I. Menéndez Rodríguez, *Relatec*, Vol. 3, Nº 1, 369-374, 2004).
- 17) Profesor de la asignatura *Química Computacional* del Máster en *Química y Desarrollo Sostenible* del Departamento de Química Orgánica e Inorgánica de la Universidad de Oviedo en los cursos académicos 2014-2015, 2015-2016, 2016-2017, 2017-2018, 2018-2019, 2019-2020, 2020-2021, 2021-2022, 2022-2023, 2023-2024, 2024-2025 y 2025-2026.
- 18) Profesor de la asignatura *Deepening in Methods of Theoretical Chemistry* del Máster Universitario Internacional en *Theoretical Chemistry and Computational Modelling* (Mención a la excelencia MEE2011-0153) en los cursos académicos 2018-2019, 2019-2020, 2020-2021 y 2021-2022.
- 19) Evaluador de proyectos de investigación presentados al Concurso Nacional de Proyectos FONDECYT (Fondo Nacional de Desarrollo Científico y Tecnológico) de Chile en 2019.
- 20) Miembro de una Comisión Técnica de la Universidad de Agricultura de Faisalabad (Pakistán) encargada de evaluar la labor desarrollada durante seis años por un docente en pruebas de dicha universidad.
- 21) Coautor del trabajo “Vídeos tutoriales: una herramienta para el aprendizaje autónomo en laboratorios de Química e Ingeniería Química” publicado en el libro titulado “Nuevos ecosistemas de aprendizaje: innovaciones y experiencias educativas” por la editorial OCTAEDRO de Barcelona (España), ISBN: 978-84-199000-81-4, en el mes de enero de 2024.
- 22) Coautor del artículo destacado en el área de Química por la Sección Territorial de Asturias de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ) en el año 2023 del trabajo titulado “1,10-Phenanthroline ring-opening mediated by cis-{Re(CO)<sub>2</sub>} complexes” (*Inorganic Chemistry Frontiers* **2023**, 10, 900-907).