



Ministerio de Economía y Competitividad
Secretaría de Estado de Investigación,
Desarrollo e Innovación

Currículum

Nombre: Saulo Vázquez Rodríguez

Fecha: Enero 2025

Fecha de nacimiento : Sexo:

Organismo: Universidad de Santiago de Compostela
Facultad, Escuela o Instituto: Facultad de Química
Depto./Secc./Unidad estr.: Química Física
Dirección postal:

Especialización (Códigos UNESCO): 2210 2210.91
 Categoría profesional: Catedrático de Universidad
 Situación administrativa

☒ Plantilla ☐ Contratado ☐ Interino ☐ Becario

☐ Otras situaciones especificar:

Líneas de investigación

Dinámica de reacciones químicas, dinámica molecular, trayectorias clásicas, interacciones péptidos-superficies, disociaciones inducidas por colisiones y por superficies.

Titulación Superior	Centro	Fecha
Licenciado en Ciencias Químicas	Universidad de Santiago de Compostela	Junio de 1984

Doctorado	Centro	Fecha
Ciencias Químicas	Universidad de Santiago de Compostela	Abril de 1989

Actividades anteriores de carácter científico profesional

Puesto	Institución	Fechas
Ayudante de Universidad (L.R.U.)	Universidad de Santiago de Compostela	1/89 a 11/90
Profesor Titular Interino (Universidad)	Universidad de Santiago de Compostela	11/90 a 12/92
Profesor Titular de Universidad	Universidad de Santiago de Compostela	12/92 al 05/2021
Catedrático de Universidad	Universidad de Santiago de Compostela	07/05/2021 - Presente

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

Idioma	Habla	Lee	Escribe
Inglés	B	C	C

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

(nacionales y/o internacionales)

Título del proyecto: Consolidación 2021 GRC GI-1905 - Química Teórica e Computacional - QTEC.

Entidad financiadora: Consellería de Cultura, Educación e Universidades, Xunta de Galicia (ED431C 2021/40)

Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela

Duración, desde: 01/01/2021 hasta: 20/11/2024

Cuantía de la subvención: 200.000,00 €

Investigador responsable: Jesús Rodríguez Otero

Número de investigadores participantes: 10

Título del proyecto: Simulación de biocombustibles y aditivos de gasolina.

Entidad financiadora: AEI – Agencia Estatal de Investigación (PID2019-107307RB-I00)

Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela

Duración, desde: 1/06/2020 hasta: 31/05/2024

Cuantía de la subvención: 60.500,00 €

Investigador responsable: Antonio Fernández Ramos

Número de investigadores participantes: 6

Título del proyecto: Simulación del proceso de combustión de bioalcoholes.

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad (CTQ2014-58617-R)

Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela

Duración, desde: 1/01/2015 hasta: 31/12/2017

Cuantía de la subvención: 87.120,00 €

Investigador responsable: Antonio Fernández Ramos

Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: Consolidación e estruturación. REDES GI-1595 RCMM: Red de Ciencias y Materiales Moleculares. (2014-PG135) Ref.R2014/051.

Entidad financiadora: Consellería de Cultura, Educación e Ordenación Universitaria

Duración, desde: 24/06/2014 hasta: 23/06/2016

Cuantía de la subvención: 120.000,00 €

Investigador responsable: Enrique Guitián Rivera

Número de investigadores participantes: 34

Título del proyecto: Minstrel (Mestrelab Interface for STRucture and Energy computation in the chemical Laboratory): Un sistema computacional de modelización molecular orientado a las industrias farmacéutica y químico-textil (MINSTREL) (2014-CE043).

Entidad financiadora: Xunta de Galicia

Duración, desde: 13/02/2014 hasta: 30/06/2015

Cuantía de la subvención: 93.439,10 €

Investigador responsable: Javier Francisco Sardina López

Número de investigadores participantes: 2

Título del proyecto: Consolidación e estruturación. (GPC) GI-2132 QUÍMICA SUPRAMOLECULAR E NANOTUBOS PEPTÍDICOS QSNTF (2013-PG047) Ref.GPC2013-039.

Entidad financiadora: Consellería de Cultura, Educación e Ordenación Universitaria

Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela

Duración, desde: 15/08/2013 hasta: 31/12/2015

Cuantía de la subvención: 87.120 €

Investigador responsable: Juan Ramón Granja Guillán

Número de investigadores participantes: 12

Título del proyecto: Consolidación e estruturación de unidades de investigación competitivas - REDES. (2012-PG208) Ref.CN 2012/314

Entidad financiadora: Consellería de Cultura, Educación e Ordenación Universitaria

Duración, desde: 17/06/2012 hasta: 16/06/2014
Investigador responsable: Enrique Guitián Rivera
Número de investigadores participantes: 87

Cuantía de la subvención: 120.000,00 €

Título del proyecto: Estudio teórico mediante métodos semiclásicos de procesos de transferencia protónica en zeolitas.
Entidad financiadora: Dirección Xeral de I + D (Xunta de Galicia; código 10PXIB209092PR)
Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela
Duración, desde: 10/08/2010 hasta: 30/09/2013
Investigador responsable: Antonio Fernández Ramos
Número de investigadores participantes: 3

Cuantía de la subvención: 44965 €

Título del proyecto: Simulaciones de la dinámica de colisión y adsorción de péptidos sobre superficies monocapa auto-organizadas.
Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación (CTQ2009-12588)
Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela
Duración, desde: 1/1/2010 hasta: 31/12/2012
Investigador responsable: Saulo Vázquez Rodríguez
Número de investigadores participantes: 4

Cuantía de la subvención: 60500 €

Título del proyecto: Partnership for International Research and Education (PIRE): Simulation of Electronic Non-Adiabatic Dynamics for Reactions with Organic Macromolecules, Liquids, and Surfaces* (<http://pire-europe.chem.ttu.edu/>)
Entidad financiadora: NSF (USA)
Entidades participantes: Texas Tech University, Iowa State University, Yale University, Università di Pisa, Universidad de Santiago de Compostela, y Universität of Wien
Duración, desde: 2006 hasta: 2010
Investigador responsable: William L. Hase
Número de investigadores participantes: 10

Cuantía de la subvención: 2500000 \$

*Este proyecto financia sólo a los participantes norteamericanos. Los europeos se benefician solamente con la incorporación temporal de estudiantes de grado, doctorado y post-doctorado americanos.

Título del proyecto: Simulaciones de procesos de "soft landing" de iones y péptidos sobre superficies monocapa auto-organizadas

Entidad financiadora: Xunta de Galicia (PGIDIT07PXIB209072PR)
Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela
Duración, desde: 1/11/2007 hasta: 31/10/2010
Investigador responsable: Saulo Vázquez Rodríguez
Número de investigadores participantes: 2

Cuantía de la subvención: 70265 €

Título del proyecto: Simulaciones dinámicas de la transferencia de energía y descomposición unimolecular en disociaciones inducidas por colisiones y por superficies

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología (CTQ2006-06301/BQU)
Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela
Duración, desde: 1/10/2006 hasta: 30/09/2009
Investigador responsable: Emilio Martínez Núñez
Número de investigadores participantes: 4

Cuantía de la subvención: 80000 €

Título del proyecto: Dinámica de sistemas complejos con un coste computacional razonable: desarrollo de métodos, programas y aplicaciones

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología (BQU2003-01639)
Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela
Duración, desde: 15/11/2003 hasta: 14/11/2006 Cuantía de la subvención: 54800 euros
Investigador responsable: Antonio Fernández Ramos
Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: Estudio de la fotogénesis de la vitamina D₃
Entidad financiadora: Xunta de Galicia (2003/PX199)
Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela
Duración, desde: 21/10/2003 hasta: 20/10/2006 Cuantía de la subvención: 63100 euros
Investigador responsable: Miguel A. Ríos Fernández
Número de investigadores participantes: 4

Título del proyecto: Dinámica clásica de derivados de hidrocarburos sencillos en fase gas
Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología (BQU2000-0462)
Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela
Duración, desde: 20/12/2000 hasta: 20/12/2003 Cuantía de la subvención: 4317600 pts
Investigador responsable: Saulo Vázquez Rodríguez
Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: Desarrollo y extensión de modelos teóricos para el estudio de procesos de transferencia protónica
Entidad financiadora: Xunta de Galicia (CICETGA) Ref: XUGA20903A98
Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela
Duración, desde: 1/1/1998 hasta: 31/12/2000 Cuantía de la subvención: 5665000 pts
Investigador responsable: Jesús Rodríguez Otero
Número de investigadores participantes: 6

Título del proyecto: Diseño de un modelo estructural para las interacciones entre la hormona de la vitamina D y su receptor".
Entidad financiadora: Xunta de Galicia (XUGA20903A91, D.O.G. 13-01-1992).
Duración, desde: 01/01/1992 hasta: 31/12/1994 Cuantía de la subvención: 3900000 pts
Investigador responsable: S.A. Vázquez Rodríguez.
Número de investigadores participantes: 4

Título del proyecto: "Mecánica molecular de β -lactamas. Parametrización de un campo de fuerzas para MM3 y aplicación a cefalosporinas".
Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia (DGICYT proyecto nº PB91-0543-C02-02, B.O.E. del 19-10-1991).
Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela
Duración, desde: 22/06/1992 hasta: 21/06/1994 Cuantía de la subvención: 2500000 pts
Investigador responsable: S.A. Vázquez Rodríguez.
Número de investigadores participantes: 2

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

Publicaciones o Documentos Científico-Técnicos

Autores/as (p.o. de firma): Enrique M. Cabaleiro-Lago, Berta Fernández, Roberto Rodríguez-Fernández, **Saulo A. Vázquez.**

Título: "Functional group corrections to the GFN2-xTB and PM6 semiempirical methods for noncovalent interactions in alkanes and alkenes "

Ref.: J. Chem. Phys.: Vol. 158, 124105 Año 2023.

Autores/as (p.o. de firma): **Saulo A. Vázquez**, Emilio Martínez-Núñez, Thomas J. Preston.

Título: "Exploring unimolecular reactions in disilanol and ethanol: Insights and challenges"

Ref.: Theor. Chem. Acc. 142:124 Año 2023.

Autores/as (p.o. de firma): Enrique M. Cabaleiro-Lago; Jesús Rodríguez-Otero; **Saulo A. Vázquez.**

Título: "Electrostatic Penetration Effects Stand at the Heart of Aromatic π Interactions "

Ref.: Phys. Chem. Chem. Phys.: Vol. 24, Pags. 8979-8991 Año 2022.

Autores/as (p.o. de firma): Martiño Ríos-García; Berta Fernández; Jesús Rodríguez-Otero; Enrique M. Cabaleiro-Lago; **Saulo A. Vázquez.**

Título: "The PM6-FGC Method: Improved Corrections for Amines and Amides"

Ref.: Molecules.: Vol. 27(5), Pags. 1678 Año 2022.

Autores/as (p.o. de firma): Sergio Pérez-Tabero, Berta Fernández, Enrique M. Cabaleiro-Lago, Emilio Martínez-Núñez, and **Saulo A. Vázquez.**

Título: "New Approach for Correcting Noncovalent Interactions in Semiempirical Quantum Mechanical Methods: The Importance of Multiple-Orientation Sampling"

Ref.: J. Chem. Theory Comput.: Vol. 17, Pags. 5556-5567 Año 2021.

Autores/as (p.o. de firma): Emilio Martínez-Núñez, George L. Barnes, David R. Glowacki, Sabine Kopec, Daniel Peláez, Aurelio Rodríguez, Roberto Rodríguez-Fernández, Robin J. Shannon, James J. P. Stewart, Pablo G. Tahoces, **Saulo A. Vázquez.**

Título: "AutoMeKin2021: An open-source program for automated reaction discovery"

Ref.: J. Comput. Chem.: Pags. 1-13, Año 2021.

Autores/as (p.o. de firma): Xiaoyong Zhang, **Saulo A. Vázquez** and Jeremy N. Harvey.

Título: "Vibrational Energy Relaxation of Deuterium Fluoride in d-Dichloromethane: Insights from Different Potentials "

Ref.: J. Chem. Theory Comput.: Vol. 17, Pags. 1277-1289, Año 2021.

Autores/as (p.o. de firma): Enrique M. Cabaleiro-Lago, Jesús Rodríguez Otero and **S. A. Vázquez.**

Título: "The relative position of p-p interacting rings notably changes the nature of the substituent effect"

Ref.: J. : Vol. 22, Pags. 12068-12081, Año 2020.

Autores/as (p.o. de firma): **S. A. Vázquez**, Xose L. Otero and E. Martínez-Núñez.

Título: "A Trajectory-Based Method to Explore Reaction Mechanisms"

Ref.: *Molecules*: Vol. 23, Pags. 3156/1-3156/21, Año 2018.

Autores/as (p.o. de firma): A. Rodríguez, R. Rodríguez-Fernández, **S. A. Vázquez**, G. L. Barnes, J. J. P. Stewart and E. Martínez-Núñez.

Título: "tsscds2018: A code for automated discovery of chemical reaction mechanisms and solving the kinetics"

Ref.: *J. Comput. Chem.*: Vol. 39, Pags. 1922-1930, Año 2018.

Autores/as (p.o. de firma): Ferro-Costas, David; Martínez-Núñez, Emilio; Rodríguez-Otero, Jesús; Cabaleiro-Lago, Enrique; Estevez, Carlos M.; Fernández, Berta; Fernández-Ramos, Antonio; **Vázquez, Saulo A.**

Título: "Influence of Multiple Conformations and Paths on Rate Constants and Product Branching Ratios. Thermal Decomposition of 1-Propanol Radicals"

Ref.: *J. Phys. Chem. A*: Vol. 122(21), Pags. 4790-4800, Año 2018.

Autores/as (p.o. de firma): Wilhelm, Michael J.; Martínez-Núñez, Emilio; González-Vázquez, Jesús; **Vázquez, Saulo A.**; Smith, Jonathan M.; Dai, Hai-Lung.

Título: "Is photolytic production a viable source of HCN and HNC in astrophysical environments? A laboratory-based feasibility study of methyl cyanoformate"

Ref.: *Astrophys. J.*: Vol. 849, Pags. 15/1-15/12, Año 2017.

Autores/as (p.o. de firma): Spezia R, Martínez-Núñez E, **Vázquez S**, Hase WL.

Título: "Theoretical and computational studies of non-equilibrium and non-statistical dynamics in the gas phase, in the condensed phase and at interfaces"

Ref.: *Phil. Trans. R. Soc. A*: Vol. 375, Pags. 20170035, Año 2017.

Autores/as (p.o. de firma): J. A. Varela, **S. A. Vázquez** and E. Martínez-Núñez

Título: "An Automated Method to Find Reaction Mechanisms and Solve the Kinetics in Organometallic Catalysis"

Ref.: *Chem. Sci*, Vol. 8, Pags 3843-3851 Año 2017.

Autores/as (p.o. de firma): Roberto Rodríguez-Fernández, Francisco B. Pereira, Jorge M. C. Marques, Emilio Martínez-Núñez and **Saulo A. Vázquez**

Título: "GAFit: a general-purpose, user-friendly program for fitting potential energy surfaces"

Ref.: *Comput. Physics Comm.*, Vol. 217, Pags. 89-98, Año 2017.

Autores/as (p.o. de firma): Wilhelm, Michael J.; Martínez-Núñez, Emilio; González-Vázquez, Jesús; **Vázquez, Saulo A.**; Smith, Jonathan M.; Dai, Hai-Lung

Título: "Predissociation of methyl cyanoformate: the HCN and HNC channels"

Ref.: *arXiv.org*, e-Print Archive, Pags. 1-10, Año 2016.

Autores/as (p.o. de firma): Perez-Soto, Raul; **Vázquez, Saulo A.**; Martínez-Núñez, Emilio

Título: "Photodissociation of acryloyl chloride at 193 nm: interpretation of the product energy distributions, and new elimination pathways"

Ref.: *Physical Chemistry and Chemical Physics*, Vol. 18(6), Pags. 5019-5026, Año 2016.

Autores/as (p.o. de firma): Casas, Jose S.; Castano, M. Victoria; Couce, Maria D.; Sanchez, Agustin; Sordo, Jose; Torres, M. Dolores; **Vázquez, Saulo A.**; Vázquez-Lopez, Ezequiel M.

Título: "Relevance of weak intermolecular forces on the supramolecular structure of free or DMSO solvated 5-(4-X-benzylidene)rhodanines (X = F, Cl, Br, I)"
Ref.: J. Mol. Struct., Vol. 1120, Pags. 100-114, Año 2016.

Autores/as (p.o. de firma): Calvelo, Martin; **Vazquez, Saulo**; Garcia-Fandino, Rebeca
Título: "Molecular dynamics simulations for designing biomimetic pores based on internally functionalized self-assembling α , γ -peptide nanotubes"
Ref.: Physical Chemistry and Chemical Physics, Vol. 17(43), Pags. 28586–28601, Año 2015.

Autores/as (p.o. de firma): **Saulo A. Vázquez**, Emilio Martinez-Nunez
Título: "HCN elimination from vinyl cyanide: product energy partitioning, the role of hydrogen-deuterium exchange reactions and a new pathway"
Ref.: Physical Chemistry Chemical Physics, Vol. 17(10), Pags. 6948–6955, Año 2015.

Autores/as (p.o. de firma): Preston, Thomas J.; Dunning, Greg T.; Orr-Ewing, Andrew J.; **Vázquez, Saulo A.**
Título: "Direct and Indirect Hydrogen Abstraction in Cl + Alkene Reactions"
Ref.: Journal of Physical Chemistry A, Vol. 118, Pags. 5595–5607, Año 2014.

Autores/as (p.o. de firma): Jonathan Booth, **Saulo Vázquez**, Emilio Martinez-Nunez, Alison Marks, Jeff Rodgers, David R. Glowacki, Dmitrii V. Shalashilin
Título: "Recent applications of boxed molecular dynamics: a simple multiscale technique for atomistic simulations"
Ref.: Philosophical Transactions of the Royal Society A, Vol. 372, Pags. 20130384, Año 2014.

Autores/as (p.o. de firma): Subha Pratihari, Swapnil C. Kohale, **Saulo A. Vázquez**, William L. Hase
Título: "Intermolecular Potential for Binding of Protonated Peptide Ions with Perfluorinated Hydrocarbon Surfaces"
Ref.: Journal of Physical Chemistry B, Vol. 118, Pags. 5577–5588, Año 2014.

Autores/as (p.o. de firma): Juan J. Nogueira, Yang Wang, Fernando Martín, Manuel Alcamí, David R. Glowacki, Dmitrii V. Shalashilin, Emanuele Paci, Antonio Fernández-Ramos, William L. Hase, Emilio Martínez-Núñez, **Saulo A. Vázquez**
Título: "Unraveling the Factors That Control Soft Landing of Small Silyl Ions on Fluorinated Self-Assembled Monolayers"
Ref.: Journal of Physical Chemistry C, Vol. 118, Pags. 10159–10169, Año 2014.

Autores/as (p.o. de firma): Roberto Rodríguez-Fernández; **Saulo A. Vazquez**; Emilio Martínez-Núñez.
Título: "Collision-induced dissociation mechanisms of [Li(uracil)]⁺"
Ref.: Physical Chemistry and Chemical Physics, Vol. 15 (20), Pags. 7628-7637, Año 2013.

Autores/as (p.o. de firma): Teresa Cusati; Giovanni Granucci; Emilio Martínez-Núñez; Francesca Martini; Maurizio Persico; **Saulo A. Vazquez**.
Título: "Semiempirical Hamiltonian for simulation of azobenzene photochemistry"
Ref.: Journal of Physical Chemistry A, Vol. 116, Pags. 98-110, Año 2012.

Autores/as (p.o. de firma): Juan J Nogueira; Antonio Sanchez-Coronilla; Jorge M Marques; William L Hase; Emilio Martínez-Núñez; **Saulo A. Vazquez**.
Título: "Intermolecular potentials for simulations of collisions of SiNCS⁺ and (CH₃)₂SiNCS⁺ ions with fluorinated self-assembled monolayers"
Ref.: Chemical Physics, Vol. 399, Pags. 193-204 Año 2012

Autores/as (p.o. de firma): Nogueira, Juan; Homayoon, Zahra; **Vazquez, Saulo**; Martínez-Núñez, Emilio.
Título: "Chemical Dynamics Study of NO Scattering from a Perfluorinated Self-Assembled Monolayer"
Ref.: Journal of Physical Chemistry C, Vol. 115, Pags. 23817-23830 Año 2011.

Autores/as (p.o. de firma): Zahra Homayoon, **Saulo A. Vázquez**, Roberto Rodríguez-Fernández, Emilio Martínez-Núñez.
Título: "Ab Initio and RRKM Study of the HCN/HNC Elimination Channels from Vinyl Cyanide"
Ref.: Journal of Physical Chemistry A, Vol. 115(6), Pags. 979-985, Año 2011.

Autores/as (p.o. de firma): José S. Casas, Noelia Casanova, María S. García-Tasende, Agustín Sánchez, José Sordo, Ángeles Touceda, **Saulo Vázquez**.
Título: "Back to the Coordination Modes of the Thiosemicarbazone Chain: New Insights from Diorganolead(IV) and Lead(II) Derivatives of Isatin-3-thiosemicarbazone"
Ref.: European Journal of Inorganic Chemistry, Vol. 2010 (31), Pags. 4992–5004, Año 2010.

Autores/as (p.o. de firma): Nogueira, Juan; **Vazquez, Saulo**; Lourderaj, Upakarasamy; Hase, William; Martínez-Núñez, Emilio.
Título: "Chemical Dynamics Simulations of CO₂ in the Ground and First Excited Bend States Colliding with a Perfluorinated Self-Assembled Monolayer"
Ref.: Journal of Physical Chemistry C, Vol. 114(43), Pags. 18455-18464, Año 2010.

Autores/as (p.o. de firma): García-Fandiño, R.; Castedo, L.; Granja, J.R.; **Vázquez, S.A.**
Título: "Interaction and Dimerization Energies in Methyl-Blocked α,γ -Peptide Nanotube Segments"
Ref.: Journal of Physical Chemistry B, Vol. 114(15), Pags. 4973-4983, Año 2010.

Autores/as (p.o. de firma): Nogueira, Juan J.; **Vázquez, Saulo A.**; Mazyar, Oleg A.; Hase, William L.; Perkins, Bradford G., Jr.; Nesbitt, David J.; Martinez-Nunez, Emilio.
Título: "Dynamics of CO₂ Scattering off a Perfluorinated Self-Assembled Monolayer. Influence of the Incident Collision Energy, Mass Effects, and Use of Different Surface Models"
Ref.: Journal of Physical Chemistry A, Vol. 113(16), Pags. 3850-3865, Año 2009.

Autores/as (p.o. de firma): Nogueira, J. J.; Martinez-Nunez, E.; **Vázquez, S. A.**
Título: "Improved United-Atom Models for Perfluorinated Self-Assembled Monolayers"
Ref.: Journal of Physical Chemistry C, Vol. 113(8), Pags. 3300-3312, Año 2009.

Autores/as (p.o. de firma): Chang, Chih-Min; Huang, Yu-Hsuan; Liu, Suet-Yi; Lee, Yuan-Pern; Pombar-Perez, Marta; Martinez-Nunez, Emilio; **Vázquez, Saulo A**
Título: "Internal energy of HCl upon photolysis of 2-chloropropene at 193 nm investigated with time-resolved Fourier-transform spectroscopy and quasiclassical trajectories"
Ref.: Journal of Chemical Physics, Vol. 129(22), Pags. 224301/1-224301/11; Año 2008.

Autores/as (p.o. de firma): **Vázquez, Saulo A.**; Martínez-Núñez, Emilio.
Título: "Translational energy distributions in the photodissociation of fluorobenzene"
Ref.: Chemical Physics, Vol. 349(1-3), Pags. 219-225; Año 2008.

Autores/as (p.o. de firma): **Vázquez, Saulo A.**; Morris, John R.; Rahaman, Asif; Mazyar, Oleg A.; Vayner, Grigoriy; Addepalli, Srirangam V.; Hase, William L.; Martinez-Nunez, Emilio.
Título: Inelastic Scattering Dynamics of Ar from a Perfluorinated Self-Assembled Monolayer Surface.

Ref.: Journal of Physical Chemistry A, Vol. 111(49), Pags.12785-12794; Año 2007.

Autores/as (p.o. de firma): J. S. Casas, E. E. Castellano, J. Ellena, M. S. García-Tasende, A. Sánchez, J. Sordo, A. Touceda, **S. Vázquez**

Título: "New lead(II) complexes with N,S-ligands, including a lead pyrazolonate with unusual packing flexibility"

Ref.: POLYHEDRON; Vol. 26; Pags. 4228-4238; Año 2007

Autores/as (p.o. de firma): A. Fernández-Ramos, E. Martínez-Núñez, **S. A. Vázquez**, M. A. Ríos, C. M. Estévez, M. Merchán y L. Serrano-Andrés

Título: "Hydrogen transfer vs. proton transfer in 7-hydroxy-quinoline-(NH₃)₃. A CASSCF/CASPT2 study"

Ref.: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A; Vol. 111 (26); Pags. 5907-5912; Año 2007

Autores/as (p.o. de firma): S. H. Mousavipour, A. Fernández-Ramos, R. Meana-Pañeda, Emilio Martínez-Núñez, **S. A. Vázquez**, M. A. Ríos

Título: "Direct-Dynamics VTST Study of the [1,7] Hydrogen Shift in 7-Methylocta-1,3(Z),5(Z)-triene. A Model System for the Hydrogen Transfer Reaction in Previtamin D₃"

Ref.: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A; Vol. 111; Pags. 719-725; Año 2007

Autores/as (p.o. de firma): T. Tarrazo-Antelo, E. Martínez-Núñez, **S. A. Vázquez**

Título: "Ab initio and RRKM study of the elimination of HF and HCl from chlorofluoroethylene"

Ref.: CHEMICAL PHYSICS LETTERS; Vol. 435; Pags. 176-181; Año 2007

Autores (p.o. de firma): T. L. Sordo, J. M. Ugalde, **S. A. Vázquez**

Título: Foundations of Statistical Mechanics

Ref. ☐ Libro: Theoretical and Computational Chemistry: Foundations, Methods and Techniques

Clave: ISBN: 978-84-8021-615-9

Volumen:

Páginas, inicial: 95 final: 154

Fecha: 2007

Editorial (si libro): Publicacions de la Universitat Jaume I; Editores: Juan Andrés y Joan Bertran

Lugar de publicación: Castelló de la Plana, España

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, **S. Vázquez**

Título: "Rotational distributions of HBr in the photodissociation of vinyl bromide at 193nm: An investigation by direct quasiclassical trajectory calculations"

Ref.: CHEMICAL PHYSICS LETTERS; Vol. 425; Pags. 22-27; Año 2006

Autores/as (p.o. de firma): J. M. C. Marques, E. Martínez-Núñez, **S. A. Vázquez**

Título: "Trajectory Dynamics Study of Collision-Induced Dissociation of the Ar + CH₄ Reaction at Hyperthermal Conditions: Vibrational Excitation and Isotope Substitution."

Ref.: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A; Vol. 110; Pags. 7113-7121; Año 2006

Autores/as (p.o. de firma): R. García, J. M. Seco, **S. A. Vázquez**, E. Quiñoá, R. Riguera

Título: "Role of Barium(II) in the determination of the Absolute Configuration of chiral amines by ¹H NMR spectroscopy."

Ref.: JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY; Vol. 71; Pags. 1119-1130; Año 2006

Autores/as (p.o. de firma): E. Martinez-Nunez, **S. A. Vazquez**, F. J. Aoiz, J. F. Castillo

Título: "Quasiclassical Trajectory Study of the Collision-Induced Dissociation Dynamics of Ar + CH₃SH⁺ Using an Ab Initio Interpolated Potential Energy Surface."

Ref.: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A; Vol. 110; Pags. 1225-1231; Año 2006

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, **S. A. Vázquez**, J. M. C. Marques, M. Xue, W. L. Hase

Título: "Quasiclassical dynamics simulation of the collision-induced dissociation of $\text{Cr}(\text{CO})_6^+$ with Xe."

Ref.: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS; Vol. **123**; Pags. 154311/1-154311/9; Año 2005

Autores/as (p.o. de firma): J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos y **S. Vázquez**

Título: "Quasiclassical Trajectory Study of the $\text{F} + \text{CH}_4$ Reaction Dynamics on a Dual-Level Interpolated Potential Energy Surface"

Ref.: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A; Vol. 109; Pags. 8459–8470; Año 2005

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, **S. Vázquez**, G. Granucci, M. Persico y C. Estévez

Título: "Photodissociation of formic acid: A trajectory surface hopping study"

Ref.: CHEMICAL PHYSICS LETTERS; Vol. **412**; Pags. 35–40; Año 2005

Autores/as (p.o. de firma): Marques, J. M. C.; Martínez-Núñez, E.; Fernández-Ramos, A.; **Vázquez, S. A.**;

Título: "Trajectory Dynamics Study of the $\text{Ar} + \text{CH}_4$ Dissociation Reaction at High Temperatures: the Importance of Zero-Point-Energy Effects"

Ref.: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A; Vol. 109; Pags. 5415–5423; Año 2005

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, **S. A. Vázquez**, I. Borges Jr., A. B. Rocha, C. M. Estévez, J. F. Castillo y F. J. Aoiz

Título: On the Conformational Memory in the Photodissociation of Formic Acid

Ref.: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A; Vol. 109; Pags. 2836–2839; Año 2005

Autores/as (p.o. de firma): I. Borges, Jr., A.B. Rocha, E. Martínez-Núñez, **S. Vázquez**

Título: "Theoretical investigations on the vibronic coupling between the electronic states S_0 and S_1 of formic acid including the photodissociation at 248 nm"

Ref.: CHEMICAL PHYSICS LETTERS; Vol. **407**; Pags. 166–170; Año 2005

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y **S. A. Vázquez**

Título: "Quasiclassical trajectory calculations on the photodissociation of CF_2CHCl at 193 nm: product energy distributions for the HF and HCl eliminations

Ref.: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS; Vol. **122**; Pags. 104316/1-104316/7; Año 2005

Autores/as (p.o. de firma): J. González-Vázquez, E. Martínez-Núñez, **S. A. Vázquez**, J. Santamaría, L. Bañares

Título: "RRKM and direct MP2/6-31G(d,p) quasiclassical trajectory study of the H_2 elimination in the photodissociation of vinyl chloride at 193 nm"

Ref.: CHEMICAL PHYSICS LETTERS; Vol. **396**; Pags. 442–447; Año 2004

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y **S. A. Vázquez**

Título: "Rotational distributions of HF in the photodissociation of vinyl fluoride at 193 nm: A direct MP2 quasiclassical trajectory study"

Ref.: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS; Vol. **121**; Pags. 5179–5182; Año 2004

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, **S. A. Vázquez** y J. M. C. Marques

Título: "Quasiclassical trajectory study of the collision-induced dissociation of $\text{CH}_3\text{SH}^+ + \text{Ar}$ "

Ref.: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS; Vol. **121**; Pags. 2571–2577; Año 2004

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, **S. A. Vázquez**, F. J. Aoiz, L. Bañares y J. F. Castillo

Título: "Further investigation of the HCl elimination in the photodissociation of vinyl chloride at 193 nm: a direct MP2/6-31G(d,p) trajectory study"

Ref.: CHEMICAL PHYSICS LETTERS; Vol. **386**; Pags. 225–232; Año 2004

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, M. N. D. S. Cordeiro, **S. A. Vázquez**, F. J. Aoiz y L. Bañares

Título: "A direct classical trajectory study of the acetone photodissociation on the triplet surface"

Ref.: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS; Vol. **119**; Pags. 10618–10625; Año 2003

Autores/as (p.o. de firma): M. N. D. S. Cordeiro, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos y **S. A. Vázquez**

Título: "Direct dynamics study of the photodissociation of triplet propanal at threshold"

Ref.: CHEMICAL PHYSICS LETTERS; Vol. **381**; Pags. 37–44; Año 2003

Autores/as (p.o. de firma): T.-S. Ho, H. Rabitz, F. J. Aoiz, L. Bañares, **S. A. Vázquez** and L. B. Harding

Título: "Implementation of a fast analytic ground state potential energy surface for the $\text{N}(2\text{D}) + \text{H}_2$ reaction"

Ref.: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS; Vol. **119**; Pags. 3063–3070; Año 2003

Autores/as (p.o. de firma): L. Bañares, F. J. Aoiz, **S. A. Vázquez**, T.-S. Ho, H. Rabitz

Título: "Quasi-classical trajectory calculations on a fast analytic potential energy surface for the $\text{C}(1\text{D}) + \text{H}_2$ reaction"

Ref.: CHEMICAL PHYSICS LETTERS; Vol. **374**; Pags. 243–251; Año 2003

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, **S. A. Vázquez**, F. J. Aoiz y L. Bañares

Título: "A direct classical trajectory study of HCl elimination from the 193 nm photodissociation of vinyl chloride"

Ref.: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A; Vol. **107**; Pags. 7611–7618; Año 2003

Autores/as (p.o. de firma): M. N. D. S. Cordeiro, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos y **S. A. Vázquez**

Título: "A direct DFT dynamics study of the photodissociation of triplet acetaldehyde"

Ref.: CHEMICAL PHYSICS LETTERS; Vol. **375**; Pags. 591–597; Año 2003

Autores/as (p.o. de firma): **S. A. Vázquez**, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Santamaría, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos

Título: "Quasi-classical trajectory study of H_2 elimination in the photodissociation of difluoroethylenes at 193 nm"

Ref.: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS; Vol. **118**; Pags. 6941–6945; Año 2003

Autores/as (p.o. de firma): A. Fernández-Ramos, E. Martínez-Núñez, J. M. C. Marques y **S. A. Vázquez**

Título: "Dynamics calculations for the $\text{Cl} + \text{C}_2\text{H}_6$ abstraction reaction. Thermal rate constants and kinetic isotope effects"

Ref.: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS; Vol. **118**; Pags. 6280–6288; Año 2003

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, A. Peña-Gallego y **S. A. Vázquez**

Título: "Product energy distributions from ethylene photodissociation at 193 nm. A DFT direct classical trajectory study"

Ref.: CHEMICAL PHYSICS LETTERS; Vol. **369**; Pags. 1–7; Año 2003

Autores (p.o. de firma): J. González-Vázquez, A. Fernández-Ramos, E. Martínez-Núñez y **S. A. Vázquez**
Título: "Dissociation of difluoroethylenes. I. Global potential energy surface, RRKM and VTST calculations"
Ref. ☐ revista: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A; Vol. 107; Pags. 1389–1397 ; Año: 2003
Clave: A

Autores (p.o. de firma): J. González-Vázquez, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, y **S. A. Vázquez**
Título: "Dissociation of difluoroethylenes. II. Direct classical trajectory study of the HF elimination from 1,2-difluoroethylene"
Ref. ☐ revista: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A ; Vol. 107; Pags. 1398–1404; Año: 2003
Clave: A

Autores (p.o. de firma): J. R. Flores, E. Martínez-Núñez, S. A. Vázquez y F. J. Gómez
Título: "A theoretical study of the dynamics of the S+cC3H reaction"

Ref. ☐ revista: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A ☐ Libro
Clave: A Volumen: 106 Páginas, inicial: 8811 final: 8819 Fecha: 2002

Autores (p.o. de firma): J. Rodríguez-Otero, E. Martínez-Núñez, A. Peña-Gallego y S. A. Vázquez
Título: "The role of aromaticity in the planarity of lumiflavin"

Ref. ☐ revista: JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY ☐ Libro
Clave: A Volumen: 67 Páginas, inicial: 6347 final: 6352 Fecha: 2002

Autores (p.o. de firma): Garcia, Rosa; Seco, Jose M.; Vazquez, Saulo A.; Quinoa, Emilio; Riguera, Ricardo
Título: "Absolute Configuration of Secondary Alcohols by 1H NMR: In Situ Complexation of α -Methoxyphenylacetic Acid Esters with Barium(II)"

Ref. ☐ revista: JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY ☐ Libro
Clave: A Volumen: 67 Páginas, inicial: 4579 final: 4589 Fecha: 2002

Autores (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, S. A. Vázquez y M. A. Ríos
Título: "Rate constants and kinetic isotope effects for $\text{Cl}+\text{CH}_4 \rightarrow \text{ClH}+\text{CH}_3$. A comparison between LSC-IVR and statistical theories"

Ref. ☐ revista: CHEMICAL PHYSICS LETTERS ☐ Libro
Clave: A Volumen: 360 Páginas, inicial: 59 final: 64 Fecha: 2002

Autores/as (p.o. de firma): A. Peña-Gallego, E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Dissociation of ethylene and several deuterated derivatives at 157 and 193 nm by direct classical trajectories"
Clave: A Revista: CHEMICAL PHYSICS LETTERS;
Vol. 353; Pags. 418–425; Año 2002

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, S. A. Vázquez y A. J. C. Varandas
Título: "Unimolecular reaction dynamics of HSO. Further analysis of the influence of different barrier samplings on the product energy distributions"
Clave: A Revista: PHYSICAL CHEMISTRY AND CHEMICAL PHYSICS
Vol. 4; Pags. 279–287; Año 2002

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez

Título: "Dinámica de reacciones unimoleculares. Desviaciones del comportamiento estadístico"

Clave: A Revista: QUIMICA NOVA;

Vol. 25; Pags. 579–588; Año 2002

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, I. Borges Jr. y S. A. Vázquez

Título: "Rate constants for the $\text{CH}_3\text{O} + \text{NO} \rightarrow \text{CH}_3\text{ONO}^*$ reaction by classical trajectory and canonical variational transition state theory calculations"

Clave: A Revista: JOURNAL OF PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY;

Vol. 15; Pags. 123–129; Año 2002

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, J. M. C. Marques y S. A. Vázquez

Título: "A direct dynamics study of the H_2 elimination from 2,5-dihydrofuran"

Clave A Revista: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS;

Vol. 115; Pags. 7872–7880; Año 2001

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, C. M. Estévez, J. R. Flores y S. A. Vázquez

Título: "Product energy distributions in the HF elimination from 1,1-difluoroethylene. A direct dynamics study"

Clave A Revista: CHEMICAL PHYSICS LETTERS;

Vol. 348; Pags. 81–88; Año 2001

Autores/as (p.o. de firma): A. Fernández-Ramos, E. Martínez-Núñez, Z. Smedarchina y S. A. Vázquez

Título: "Rate constants and isotope effects for the $\text{CH}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}$ reaction by an approximate semiclassical-initial value representation method"

Clave A Revista: CHEMICAL PHYSICS LETTERS;

Vol. 241; Pags. 351–357; Año 2001

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez

Título: "Ab initio calculations on the vinyl fluoride fragmentation reactions"

Clave: A Revista: STRUCTURAL CHEMISTRY;

Vol. 12; Pags. 95–100; Año 2001

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez

Título: "Anharmonic quasi-classical barrier sampling in trajectory calculations and their influence on the computed product energy distributions"

Clave: A Revista: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A;

Vol. 105; Pags. 4808–4813; Año 2001

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, A. Peña-Gallego, y S. A. Vázquez

Título: "The unimolecular dissociation of the propionyl radical. A classical dynamics study"

Clave: A Revista: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS;

Vol. 114; Pags. 3546–3553; Año 2001

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez

Título: "Three-center vs four-center HF elimination from vinyl fluoride. A classical dynamics study"

Clave: A Revista: CHEMICAL PHYSICS LETTERS;

Vol. 332; Pags. 583–590; Año 2000

Autores/as (p.o. de firma): A. Peña-Gallego, E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Dynamics of the cis-trans isomerization and Cl–O dissociation of chlorine nitrite. A statistical and classical trajectory study"
Clave: A Revista: PHYSICAL CHEMISTRY AND CHEMICAL PHYSICS;
Vol. 2; Pags. 5393–5299; Año 2000

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, A. Peña-Gallego, R. Rodríguez-Fernández y S. A. Vázquez
Título: "Direct dynamics simulation of methanethiol decomposition"
Clave: A Revista: CHEMICAL PHYSICS LETTERS;
Vol. 324; Pags. 88–94; Año 2000

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. Vázquez-Rodríguez
Título: "Ab initio and RRKM calculations on the dissociation of the propionyl radical"
Clave: A Revista: JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE;
Vol. 556; Pags. 123–129; Año 2000. Special issue in honor to Prof. Lou Allinger

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Rotational effects in the unimolecular dissociation of the acetyl radical"
Clave: A Revista: CHEMICAL PHYSICS LETTERS;
Vol. 316; Pags. 471–476; Año 2000

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Unimolecular decomposition of CH_3SH^+ : an ab initio and RRKM study"
Clave: A Revista: JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE (THEOCHEM);
Vol. 505; Pags. 109–116; Año 2000

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Further dynamical studies of the dissociation and elimination reactions of methyl nitrite"
Clave: A Revista: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS;
Vol. 111; Pags. 10501–10510; Año 1999

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Classical dynamics study of the unimolecular decomposition of CH_3SH^+ "
Clave: A Revista: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A;
Vol. 103; Pags. 9783–9793; Año 1999

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "A statistical study of the methyl nitrite isomerization reaction. Inverse secondary isotope effects"
Clave: A Revista: CHEMICAL PHYSICS LETTERS;
Vol. 310; Pags. 209–214; Año 1999

Autores/as (p.o. de firma): A. Peña-Gallego, E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Nonstatistical effects in the unimolecular dissociation of the acetyl radical"
Clave: A Revista: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS;
Vol. 110; Pags. 11323–11333; Año 1999

Autores/as (p.o. de firma): A. Peña-Gallego, E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Classical trajectory study of the cis-trans isomerization and F–O dissociation of FONO"
Clave: A Revista: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A;
Vol. 102; Pags. 8708–8715; Año 1998

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Dynamical study of the dissociation and elimination channels in the decomposition of methyl nitrite"
Clave: A Revista: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS;
Vol. 109; Pags. 8907–8919; Año 1998

Autores/as (p.o. de firma): A. Fernández-Ramos, E. Martínez-Núñez, M. A. Ríos, J. Rodríguez-Otero, S. A. Vázquez, y C. M. Estévez
Título: "Direct dynamics study of the dissociation and elimination channels in the thermal decomposition of methyl nitrite"
Clave: A Revista: JOURNAL OF AMERICAN CHEMICAL SOCIETY;
Vol. 120; Pags. 7594–7601; Año 1998

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: "Further studies of methyl nitrite cis-trans isomerization"
Clave: A Revista: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS;
Vol. 107; Pags. 5393–5405; Año 1997

Autores/as (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, S. A. Vázquez, y R. A. Mosquera
Título: "Conformational analysis of model compounds of Vitamin D by theoretical calculations"
Clave: A Revista: JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY;
Vol. 18; Pags. 1647–1655; Año 1997

Autores: B. Fernández, S.A. Vázquez y M.A. Ríos.
Título: "A Theoretical Study of 1-Amino-3-Butene and 3-Butene-1-Thiol".
Clave: A Revista: STRUCTURAL CHEMISTRY
Vol: 3, Pags 225-229. Año 1992

Autores: S.A. Vázquez, M.A. Ríos y L. Carballeira.
Título: "A Molecular Mechanics Study of Conformational Trends in Simple Alcohols and Ethers. Part II: Intramolecular Hydrogen Bonding."
Clave: A Revista: JOURNAL COMPUTATIONAL CHEMISTRY
Vol: 13, Pags: 851-859. Año 1992

Autores: B. Fernández, S.A. Vázquez y M.A. Ríos
Título: "Theoretical Study of some Nitriles: Intramolecular Hydrogen Bonds and Anomeric Effect"
Clave: A Revista: JOURNAL COMPUTATIONAL CHEMISTRY
Vol: 13, Pags 722-729. Año 1992

Autores: S.A. Vázquez, J.S. Andrews, C.W. Murray, R.D. Amos y N.C. Handy.
Título: "An Investigation of the Three Oxidation Forms of Lumiflavin"
Clave: A Revista: JOURNAL CHEMICAL SOCIETY PERKIN TRANS 2
Vol: (6) Pags 889-895. Año 1992

Autores: N.L. Allinger, S.A. Vázquez y K. Chen
Título: "Molecular Mechanics Calculations (MM3) on Conjugated Ketones"
Clave: A Revista: JOURNAL MOLECULAR STRUCTURE (TEOCHEM)
Vol: 260, Pags 161-178. Año 1992

Autores: S.A. Vázquez, M.A. Ríos y L. Carballeira.
Título: "A Molecular Mechanics Study of Conformational Trends in Simple Alcohols and Ethers. Part I: Geometric Trends."
Clave: A Revista: JOURNAL COMPUTATIONAL CHEMISTRY
Vol: 12, Pags: 872-879. Año 1991

Autores: L. Carballeira, B. Fernández, R.A. Mosquera, M.A. Ríos, J. Rodríguez y S. Vázquez
Título: "An "Ab Initio" Gradient Study of Polyazacyclohexanes"
Clave: A Revista: JOURNAL MOLECULAR STRUCTURE (TEOCHEM)
Vol: 205, Pags: 223-234. Año 1990

Autores: R.A. Mosquera, S. Vázquez, M.A. Ríos y C. Van Alsenoy
Título: "An "Ab Initio" Gradient Study of Ethylhydrazine".
Clave: A Revista: JOURNAL MOLECULAR STRUCTURE (TEOCHEM)
Vol: 206, Pags: 49-66. Año 1990

Autores: R.A. Mosquera, S. Vázquez, M.A. Ríos y C.A. Van Alsenoy
Título: "An Ab-Initio Gradient Study of Trimethylhydrazine"
Clave: A Revista: JOURNAL MOLECULAR STRUCTURE (TEOCHEM)
Vol: 184 Pags 311-322. Año 1989

Autores: S. Vázquez, R.A. Mosquera, M.A. Ríos y C.A. Van Alsenoy
Título: "Ab-Initio Gradient Optimized Molecular Geometry and Conformational Analysis of 1,2-Propanediol at the 4-21G Level"
Clave: A Revista: JOURNAL MOLECULAR STRUCTURE (TEOCHEM)
Vol: 184, Pags 323-342. Año 1989

Autores: S. Vázquez, R.A. Mosquera, M.A. Ríos y C.A. Van Alsenoy
Título: "Ab-Initio Optimized Molecular Geometry and Conformational Analysis of 2-Methoxyethanol at the 4-21G Level"
Clave: A Revista: JOURNAL MOLECULAR STRUCTURE (TEOCHEM)
Vol: 95, Pags: 95-104. Año 1989

Autores: B. Fernández, R.A. Mosquera, M.A. Ríos y S. Vázquez
Título: "Geometrical Trends and Rotational Constants of 1-fluoro-2-propanol and 2-fluoropropanol by "ab initio" calculations".
Clave: A Revista: TETRAHEDRON COMPUTER METHODOLOGY
Vol: 2, Pags: 85-92. Año 1989

Autores: S. Vázquez, R.A. Mosquera, M.A. Ríos y C.A. Van Alsenoy
Título: "Ab Initio-Gradient Optimized Molecular Geometry and Conformational Analysis of 1,3-Propanediol at the 4-21G level"
Clave: A Revista: JOURNAL MOLECULAR STRUCTURE (TEOCHEM)
Vol: 181 Pags: 149-167 Año 1988

Autores: L. Carballeira, M.A. Ríos y S.A. Vázquez

Título: "Estructura y Conformación de Compuestos Dihidro aromáticos. Estudio por Mecánica Molecular deDihidrofenantrenos".

Clave: A Revista: ANALES DE QUÍMICA

Vol: 82 Pags: 462-467 Año: 1986.

Autores: F.J. Sardina, E. Quiñoá, L. Castedo, R. Riguera, R.A. Mosquera y S. Vázquez

Título: "Complete Structural Analysis of Cyclic Polyhalogenated Monoterpenes. A Force Field-2D NMR Study"

Clave: A Revista: JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY

Vol: 51 Pags: 4970-4973. Año 1986

Autores: L. Carballeira, P. Pérez Herraiz, M.A. Ríos y S. Vázquez.

Título: "Estudio Conformacional de Dialquilacetamidas por Mecánica Molecular".

Clave: A Revista: STUDIA CHEMICA

Vol: 11, Pags : 645-650 Año 1986

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

Participación en contratos de I+D de especial relevancia con Empresas y/o Administraciones
(nacionales y/o internacionales)

Título del contrato/proyecto:

Tipo de contrato:

Empresa/Administración financiadora:

Entidades participantes:

Duración, desde: hasta:

Investigador responsable:

Número de investigadores participantes:

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO:

Título del contrato/proyecto:

Tipo de contrato:

Empresa/Administración financiadora:

Entidades participantes:

Duración, desde: hasta:

Investigador responsable:

Número de investigadores participantes:

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO:

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

Patentes y Modelos de utilidad

Inventores (p.o. de firma):

Título:

N. de solicitud:

País de prioridad:

Fecha de prioridad:

Entidad titular:

Países a los que se ha extendido:

Empresa/s que la están explotando:

Inventores (p.o. de firma):

Título:

N. de solicitud:

País de prioridad:

Fecha de prioridad:

Entidad titular:

Países a los que se ha extendido:

Empresa/s que la están explotando:

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

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

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

Centro: Departamento de Química			
Localidad: Amberes	País Bélgica	Fecha: 19/1/87	Duración (semanas): 8
Tema: Cálculos ab initio en éteres y alcoholes			
Clave: D			

Centro: Departamento de Química			
Localidad: Amberes	País Bélgica	Fecha: 9/11/88	Duración (semanas): 8
Tema: Cálculos ab initio en éteres y alcoholes			
Clave: P			

Centro: Departamento de Química			
Localidad: Georgia	País USA	Fecha: 10/5/89	Duración (semanas): 24
Tema: Desarrollo de un campo de fuerzas de mecánica molecular para aldehidos y cetonas conjugadas.			
Clave: P			

Centro: Departamento de Química			
Localidad: Cambridge	País Inglaterra	Fecha: 28/2/90	Duración (semanas): 34
Tema: Aplicación de un método directo para los cálculos ab initio de radicales.			
Clave: P			

Centro: Departamento de Química			
Localidad: Cambridge	País Inglaterra	Fecha: 9/7/91	Duración (semanas): 6
Tema: Aplicación de un método directo para los cálculos ab initio de radicales (continuación).			
Clave: P			

Centro: Departamento de Química			
Localidad: Bristol	País Inglaterra	Fecha: 3/9/2013	Duración (semanas): 12
Tema: Estudio computacional de reacciones en disolución.			
Clave: I			

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

Contribuciones a Congresos

Autores:
Título:
Tipo de participación:
Congreso:

Publicación:

Lugar celebración:

Fecha:

Autores: S.A. Vázquez

Título: A simple approach to improve the accuracy of semiempirical methods for intermolecular interactions.

Tipo de participación: Ponencia invitada

Congreso: 17th Quantum reactive scattering Workshop

Lugar celebración: Estambul (Turquía)

Fecha: 24-28 Junio 2024

Autores: S.A. Vázquez

Título: The FGC approach for correcting noncovalent interactions in semiempirical quantum mechanical methods.

Tipo de participación: Ponencia invitada

Congreso: Eleventh International Meeting on Photodynamics and Related Aspects

Lugar celebración: Habana (Cuba)

Fecha: 7-11 Noviembre 2022

Autores: S.A. Vázquez

Título: Functional group-based corrections for the calculation of noncovalent interactions by semiempirical quantum mechanical methods.

Tipo de participación: Ponencia invitada

Congreso: Symposium (GEFAM) "Frontiers in Molecular Physics", XXXVII Reunión Bienal Real Sociedad Española de Física

Lugar celebración: Zaragoza

Fecha: 15-16 Julio 2019

Autores: S.A. Vázquez

Título: GAFit: a general-purpose, user-friendly program for fitting potential energy surfaces.

Tipo de participación: Ponencia invitada

Congreso: MOLIM Workshop on Intermolecular Interactions

Lugar celebración: Santiago de Compostela

Fecha: 2-4 Octubre 2017

Autores: S.A. Vázquez

Título: Decomposition: Formation of HCN and HNC via concerted three-body dissociations.

Tipo de participación: Ponencia invitada

Congreso: XIV International Workshop on Quantum Reactive Scattering (QRS XIV)

Lugar celebración: Trieste (Italia)

Fecha: 3-6 Julio 2017

Autores: S.A. Vázquez

Título: Computer simulations of soft landing of ions on self-assembled monolayers.

Tipo de participación: Ponencia invitada

Congreso: XIII Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2015)

Lugar celebración: Aveiro (Portugal)

Fecha: 6-9 Septiembre 2015

Autores: S.A. Vázquez

Título: Dynamics simulations of collisions of gases with a perfluorinated self-assembled monolayer.

Tipo de participación: Ponencia invitada

Congreso: XIV International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP-XIV)

Lugar celebración: El Escorial (Madrid)

Fecha: 13-19 Septiembre 2009

Autores: J.J. Nogueira, E. Martínez-Núñez, S.A. Vázquez

Título: Classical trajectory simulations of soft-landing of silyl ions onto a fluorinated self-assembled monolayer surface

Tipo de participación: póster

Congreso: 9th Iberian Join Meeting on Atomic and Molecular Physics

Publicación:

Lugar celebración: Capuchos, Portugal

Fecha: 7-9 Septiembre 2008

Autores: M. Pombar Pérez, E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez

Título: Chemical dynamics simulations of the 2-chloropropene photodissociation channels at 193 nm.

Tipo de participación: póster

Congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2008)

Publicación:

Lugar celebración: Palma de Mallorca

Fecha: 2-5 Septiembre 2008

Autores: J.J. Nogueira, E. Martínez-Núñez, S.A. Vázquez

Título: Soft-landing of silyl ions on a fluorinated self-assembled monolayer surface simulated by classical trajectories

Tipo de participación: comunicación oral presentada por J.J. Nogueira

Congreso: 19th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry

Publicación:

Lugar celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha: 13-18 Julio 2008

Autores: E. Martínez-Núñez, J.J. Nogueira, S.A. Vázquez, O. Mazyar, A. Rahaman y W. L. Hase

Título: Inelastic scattering dynamics of Ar and CO₂ on a fluorinated self-assembled monolayer surface.

Tipo de participación: comunicación oral de 20 minutos (presentada por E. Martínez-Núñez)

Congreso: Elementary Reactive Processes at Surfaces

Publicación:

Lugar celebración: San Sebastián

Fecha: 30 Agosto-1 Septiembre 2007

Autores: E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, S.A. Vázquez, J.M.C. Marques, M. Xue y W. L. Hase

Título: Quasiclassical dynamics simulation of the collision-induced dissociation of Cr(CO)₆⁺ with Xe.

Tipo de participación: comunicación oral de 20 minutos (presentada por S.A. Vázquez)

Congreso: 20th International Conference on Molecular Energy Transfer

Publicación:

Lugar celebración: Arcachon (Francia)

Fecha: 3-7 Junio 2007

Autores: E. Martínez-Núñez, S.A. Vázquez, F. J. Aoiz y J. F. Castillo

Título: Quasiclassical trajectory study of the collision-induced dissociation dynamics of Ar + CH₃SH⁺ using ab initio interpolated potential energy surface.

Tipo de participación: póster

Congreso: 20th International Conference on Molecular Energy Transfer

Publicación:

Lugar celebración: Arcachon (Francia)

Fecha: 3-7 Junio 2007

Autores: A. Fernández-Ramos, E. Martínez-Núñez, S. Vázquez-Rodríguez, M. A. Ríos, C. M. Estévez, L. Serrano-Andrés y M. Merchán

Título: "Proton transfer vs. hydrogen transfer in 7-hydroxy-quinoline·(NH₃)₃. A CASSCF/CASPT2 study"

Tipo de participación: póster

Congreso: XIIth International Congress of Quantum Chemistry

Publicación:

Lugar celebración: Kyoto, Japón

Fecha: 21-26 mayo 2006

Autores: J.M.C. Marques, E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez

Título: Collision-induced dissociation of methane with rare-gas atoms at hyperthermal energies: a trajectory dynamics study.

Tipo de participación: comunicación oral de 20 minutos (presentada por J.M.C. Marques)

Congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2006)

Publicación:

Lugar celebración: Santiago de Compostela

Fecha: 18-21 Julio 2006

Autores: R. Meana-Pañeda, S. A. Vázquez y A. Fernández-Ramos
Título: Direct dynamics study of the hydrogen abstraction reaction from propane by atomic hydrogen.
Tipo de participación: póster
Congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2006)
Publicación:
Lugar celebración: Santiago de Compostela Fecha: 18-21 Julio 2006

Autores: S. Vázquez, E. Martínez-Núñez, I. Borges Jr., A. B. Rocha, C. M. Estévez, J. F. Castillo y F. J. Aoiz
Título: On the Conformational Memory in the Photodissociation of Formic Acid
Tipo de participación: póster
Congreso: 7th Iberian Join Meeting on Atomic and Molecular Physics
Publicación:
Lugar celebración: Lisboa (Portugal) Fecha: 21-23 Marzo 2005

Autores: S. Vázquez y E. Martínez-Núñez
Título: Rovibrational distributions of HF in the photodissociation of vinyl fluoride at 193 nm: A direct MP2 quasiclassical trajectory study
Tipo de participación: póster
Congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA2004)
Publicación:
Lugar celebración: Valladolid Fecha: 15-17 Septiembre 2004

Autores: E. Martínez-Núñez, S. A. Vázquez, y J.M.C. Marques
Título: "Quasiclassical trajectory study of the collision-induced dissociation of $\text{CH}_3\text{SH}^+ + \text{Ar}$.
Tipo de participación: póster
Congreso: 18th International Symposium on Gas Kinetics
Publicación:
Lugar celebración: Bristol (UK) Fecha: 7-12 Agosto 2004

Autores: S. Vázquez y E. Martínez-Núñez
Título: Rovibrational distributions of HF in the photodissociation of vinyl fluoride at 193 nm: A direct MP2 quasiclassical trajectory study
Tipo de participación: póster
Congreso: 18th International Symposium on Gas Kinetics
Publicación:
Lugar celebración: Bristol (UK) Fecha: 7-12 Agosto 2004

Autores: J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, S. Vázquez, E. Martínez-Núñez y A. Fernández-Ramos
Título: Quasiclassical trajectory studies of the $\text{F} + \text{CH}_4$ reaction using an ab initio potential energy surface constructed by interpolation
Tipo de participación: póster
Congreso: 27th International Symposium on Free Radicals
Publicación:
Lugar celebración: Taipei (Taiwan) Fecha: 25-30 Julio 2004

Autores: E. Martínez-Núñez, J.M.C. Marques y S. A. Vázquez
Título: Dissociation of the methanethiol radical cation induced by collisions with Ar atoms: an investigation by quasiclassical trajectories
Tipo de participación: póster
Congreso: 27th International Symposium on Free Radicals
Publicación:
Lugar celebración: Taipei (Taiwan) Fecha: 25-30 Julio 2004

Autores: E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez
Título: Quasiclassical trajectory study of the 193 nm photodissociation of CF_2CHCl
Tipo de participación: póster
Congreso: 27th International Symposium on Free Radicals

Publicación:

Lugar celebración: Taipei (Taiwan)

Fecha: 25-30 Julio 2004

Autores: S. A. Vázquez, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, F.J. Aoiz, L. Bañares y J. F. Castillo

Título: "A direct classical trajectory study of the HCl elimination from the 193 nm photodissociation of vinyl chloride"

Tipo de participación: póster

Congreso: XVIII International Conference on Molecular Energy Transfer

Publicación:

Lugar celebración: El Escorial, Madrid

Fecha: junio de 2003

Autores: E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, S. A. Vázquez, F.J. Aoiz, L. Bañares y M.N.D.S. Cordeiro

Título: "A direct classical trajectory study of the acetone photodissociation on the triplet surface"

Tipo de participación: comunicación oral de 20 minutos (presentada por S. A. Vázquez)

Congreso: XVIII International Conference on Molecular Energy Transfer

Publicación:

Lugar celebración: El Escorial, Madrid

Fecha: 15-20 junio de 2003

Autores: S. A. Vázquez

Título: "Statistical vs. nonstatistical dynamics in unimolecular reactions: an investigation by classical trajectories"

Tipo de participación: ponencia invitada (plenary lecture)

Congreso: Electronic structure: Principles and applications (ESPA2002)

Publicación:

Lugar celebración: Sevilla

Fecha: septiembre de 2002

Autores: Jesús González-Vázquez, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos and S. A. Vázquez

Título: "Direct classical trajectory study of the HF elimination from difluoroethylenes. Analysis of the product energy distributions"

Tipo de participación: Póster

Congreso: Electronic structure: Principles and applications (ESPA2002)

Publicación:

Lugar celebración: Sevilla

Fecha: 11-13, septiembre de 2002

Autores/as: A. Peña-Gallego, E. Martínez-Núñez, y S. A. Vázquez

Título: "A direct classical trajectory study of the product energy distribution from ethylene excited at 193 and 157 nm"

Tipo de participación: Póster

Congreso: Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics 2002 (IBER2002)

Lugar de celebración: Lisboa (Portugal).

Año: 2002

Autores/as: A. Peña-Gallego, E. Martínez-Núñez, y S. A. Vázquez

Título: "Product energy partitioning in the dissociation of ethylene by direct classical trajectories"

Tipo de participación: Póster

Congreso: Quantum simulations of complex many-body systems: from theory to algorithms.

Lugar de celebración: Kerkrade (Holanda).

Año: 2002

Autores/as: J. González-Vázquez, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos y S. A. Vázquez

Título: "Product energy partitioning in the dissociation of 1,2-difluoroethylene by direct classical trajectories"

Tipo de participación: Póster

Congreso: Quantum simulations of complex many-body systems: from theory to algorithms.

Lugar de celebración: Kerkrade (Holanda).

Año: 2002

Autores/as: E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos y S. A. Vázquez

Título: "A linearized semiclassical-initial value representation study of the forward and reverse $\text{Cl} + \text{CH}_4 \rightarrow \text{ClH} + \text{CH}_3$ reaction and H/D kinetic isotope effects."

Tipo de participación: Póster

Congreso: Quantum simulations of complex many-body systems: from theory to algorithms.

Lugar de celebración: Kerkrade (Holanda).

Año: 2002

Autores/as: I. Borges, Jr., E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez

Título: "Classical trajectory and canonical variational calculations of rate constants"

Tipo de participación: Póster

Congreso: XI Simpósio brasileiro de química teórica.

Lugar de celebración: Caxambu (Brasil).

Año: 2001

Autores/as: C. M. Estévez, E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez

Título: "HF vibrational quantum number distributions on the unimolecular decomposition of 1,1 and 1,2 difluoroethylene"

Tipo de participación: Póster

Congreso: ESCR: Electronic Structure and Chemical Reactivity. An International Symposium in Honor of Prof. Juan Bertran.

Lugar de celebración: Bellaterra (España).

Año: 2001

Autores/as: E. Martínez-Núñez, A. Peña-Gallego, S. A. Vázquez y A. J. C. Varandas

Título: "Unimolecular reaction dynamics of HSO. Analysis of the influence of different barrier samplings on the product energy distributions"

Tipo de participación: Póster

Congreso: ESCR: Electronic Structure and Chemical Reactivity. An International Symposium in Honor of Prof. Juan Bertran.

Lugar de celebración: Bellaterra (España).

Año: 2001

Autores/as: A. Peña-Gallego, E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez

Título: "Direct dynamics simulation of the ethylene dissociation"

Tipo de participación: Póster

Congreso: ESCR: Electronic Structure and Chemical Reactivity. An International Symposium in Honor of Prof. Juan Bertran.

Lugar de celebración: Bellaterra (España).

Año: 2001

Autores/as: E. Martínez-Núñez, A. Peña-Gallego y S. A. Vázquez

Título: "Anharmonic quasi-classical barrier samplings in trajectory calculations and their influence on the computed product energy distributions"

Tipo de participación: Póster

Congreso: ESCR: Electronic Structure and Chemical Reactivity. An International Symposium in Honor of Prof. Juan Bertran.

Lugar de celebración: Bellaterra (España).

Año: 2001

Autores/as: E. Martínez-Núñez, S. A. Vázquez y A. J. C. Varandas

Título: "Unimolecular reaction dynamics of HSO"

Tipo de participación: Póster

Congreso: Vth Femtochemistry Conference

Lugar de celebración: UCLM-Toledo (España).

Año: 2001

Autores/as: E. Martínez-Núñez, A. Peña-Gallego, S. A. Vázquez
Título: "Nonstatistical effects in the unimolecular dissociation of the propionyl radical"
Tipo de participación: Póster
Congreso: 16th International Symposium on Gas Kinetics
Lugar de celebración: Cambridge (Gran Bretaña). Año: 2000

Autores/as: . E. Cabaleiro-Lago, A. Fernández-Ramos, J. M. Hermida-Ramón, E. Martínez-Núñez, A. Peña-Gallego, y S. A. Vázquez.
Título: "Dynamical study of the unimolecular dissociation of the acetyl radical"
Tipo de participación: Póster
Congreso: 5th World Congress of Theoretically Oriented Chemists. WATOC
Lugar de celebración: Londres (Gran Bretaña) Año: 1999

Autores/as: . E. Cabaleiro-Lago, A. Fernández-Ramos, J. M. Hermida-Ramón, E. Martínez-Núñez, A. Peña-Gallego, y S. A. Vázquez
Título: "Unimolecular decomposition of CH_3SH^+ : an ab initio and RRKM study"
Tipo de participación: Póster
Congreso: 5th World Congress of Theoretically Oriented Chemists. WATOC
Lugar de celebración: Londres (Gran Bretaña) Año: 1999

Autores/as: E. Cabaleiro-Lago, A. Fernández-Ramos, J. M. Hermida-Ramón, E. Martínez-Núñez, A. Peña-Gallego, y S. A. Vázquez.
Título: "Dynamical study of three decomposition channels of CH_3SH^+ "
Tipo de participación: Póster
Congreso: 5th World Congress of Theoretically Oriented Chemists. WATOC
Lugar de celebración: Londres (Gran Bretaña) Año: 1999

Autores/as: E. Martínez-Núñez, A. Peña-Gallego and S. A. Vázquez
Título: "The unimolecular decomposition of MeONO.II : classical dynamics simulations"
Tipo de participación: Póster
Congreso: Second European Conference on Computational Chemistry.
Lugar de celebración: Lisboa (Portugal) Año: 1997

Autores/as: S. A. Vázquez, A. Fernández-Ramos, E. Martínez-Núñez, and M. A. Ríos.
Título: "The unimolecular decomposition of MeONO.I : a direct dynamics study"
Tipo de participación: Póster
Congreso: Second European Conference on Computational Chemistry.
Lugar de celebración: Lisboa (Portugal) Año: 1997

Autores/as: A. Peña-Gallego, E. Martínez-Núñez, y S. A. Vázquez.
Título: "Classical trajectory study of the cis-trans isomerization of FONO"
Tipo de participación: Póster
Congreso: Second European Conference on Computational Chemistry..
Lugar de celebración: Lisboa (Portugal) Año: 1997

Autores/as: S. A. Vázquez y E. Martínez-Núñez
Título: "Cálculos ab initio para el potencial de isomerización cis-trans del nitrito de metilo"
Tipo de participación: Póster

Congreso: XXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.
Lugar de celebración: Cáceres (España)

Año: 1996

Autores/as: E. Martínez-Núñez y S. A. Vázquez

Título: "Estudio dinámico de la isomerización cis-trans del nitrito de metilo"

Tipo de participación: Póster

Congreso: XXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

Lugar de celebración: Cáceres (España)

Año: 1996

Título: "Estudio por mecánica molecular de la barrera de interconversión conformacional en 9,10-dihidrofenantrenos",

Tipo de presentación: Póster

Congreso: XX Reunión Bienal de la R.S.E.Q.,

Lugar: Castellón, Septiembre-1984.

Título: "Conformaciones de ciclohexanos polihalogenados. Mecánica molecular y ecuación de Karplus generalizada",

Tipo de presentación: póster

Congreso: XXI Reunión Bienal de la R.S.E.Q.,

Lugar Santiago de Compostela, Septiembre-1986.

Título: "Diseño de Campos de Fuerzas de Mecánica Molecular en Base a Cálculos ab initio. II. Hidracinas Alifáticas",

Tipo de presentación: póster

Congreso: XXII Reunión Bienal de la R.S.E.Q.,

Lugar: Murcia, Septiembre-1988.

Título: "Estudio ab initio de 1-oxa-3-azociclohexano",

Tipo de presentación póster

Congreso: XXII Reunión Bienal de la R.S.E.Q.,

Lugar: Murcia, Septiembre-1988.

Título: "Efecto de la Rotación de los Metilos en la Estabilidad de la Forma Enólica de la Acetilacetona. Estudio ab initio",

Tipo de presentación póster

Congreso XXII Reunión Bienal de la R.S.E.Q.,

Lugar: Murcia, Septiembre-1988.

Título: "Potencial de Hidrógeno O-H..O en Cálculos de Mecánica Molecular",

Tipo de presentación póster

Congreso XXII Reunión Bienal de la R.S.E.Q.,

Lugar: Murcia, Septiembre-1988.

Título: "Modificación del campo de fuerzas de Allinger y col.",

Tipo de presentación póster

Congreso XI Encontro da Sociedade Portuguesa de Química,

Lugar: Lisboa, Diciembre-1988.

Título: "Relaciones estructura actividad a través de cálculos de mecánica molecular: barreras de rotación del verapamilo y análogos",

Tipo de presentación póster

Congreso VI Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica,

Lugar Granada, Septiembre-1989.

Titulo: "Relaciones estructura-actividad en analogos del ácido clavulánico: Estudio AM1 de derivados con el grupo hidroxilo sustituido",

Tipo de presentación póster

Congreso 7º Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica,

Lugar: Jaca, Septiembre-1991.

Titulo: "On the reliability of 4-21G(O*) basis set for the conformational description of peroxides",

Tipo de presentación póster

Congreso 13º Encontro Sociedade Portuguesa de Química,

Lugar Lisboa, Enero-1992.

Titulo: "Análisis conformacional de trimetilhidracina mediante cálculos ab initio",

Tipo de presentación póster

Congreso XVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina,

Lugar Peñíscola, Septiembre-1987.

Titulo: "Análisis conformacional de etilhidracina mediante cálculos ab initio",

Tipo de presentación póster

Congreso XVII Congreso Q.T.E.L.,

Lugar Peñíscola, Septiembre-1987.

Titulo "Análisis conformacional de propanodiolos mediante cálculos ab initio. Parte I: 1,2-propanodiol",

Tipo de presentación póster

Congreso XVII Congreso Q.T.E.L.,

Lugar Peñíscola, Septiembre-1987.

Titulo "Análisis conformacional de propanodiolos mediante cálculos ab initio. Parte II: 1,3-propanodiol",

Tipo de presentación póster

Congreso XVII Congreso Q.T.E.L.,

Lugar Peñíscola, Septiembre-1987.

Titulo "Conformational Ab-Initio Analysis of Metanolmethylamine",

Tipo de presentación póster

Congreso: Workshop on Quantum Chemistry,

Lugar Girona, Junio-1988.

Titulo "Conformational Analysis of Poliazacyclohexanes by Ab-Initio Calculations",

Tipo de presentación póster

Congreso Workshop on Quantum Chemistry,

Lugar Girona, Junio-1988.

Titulo "Ab Initio Calculations and Conformational Analysis of 2-Methoxyethanol",

Tipo de presentación póster

Congreso Workshop on Quantum Chemistry,

Lugar Girona, Junio-1988.

Titulo "Empirical Molecular Mechanics Force Fields Developed by Fitting Ab Initio Calculations. I. Linear and Cyclic Peroxides",
Tipo de presentación póster
Congreso Workshop on Quantum Chemistry,
Lugar Girona, Junio-1988.

Titulo "Intramolecular Hydrogen Tunneling in 2,3-dihydroxypropenal",
Tipo de presentación póster
Congreso NATO Advanced Study Institute on New Theoretical Concepts for Understanding Organic Reactions,
Lugar Sant Feliu de Guíxols (Girona), Junio-1988.

Titulo "Conformational Study and Intramolecular Proton Transfer in the enol form of acetylacetone by ab initio calculations",
Tipo de presentación póster
Congreso NATO Advanced Study Institute on New Concepts for Understanding Organic Reactions,
Lugar Sant Feliu de Guíxols (Girona), Junio-1988.

Titulo "Modification of the MM2 Force Field for Alcohols and Ethers. Conformational Trends",
Tipo de presentación póster
Congreso "Sixth European Symposium on Organic Chemistry",
Lugar Belgrado (Yugoslavia), septiembre-1989.

Titulo "Molecular Mechanics for the N-C-O Unit",
Tipo de presentación: comunicación oral presentada por B. Fernández
Congreso "Sixth European Symposium on Organic Chemistry",
Lugar Belgrado (Yugoslavia), Septiembre -1989.

Titulo "Conformational Analysis of the Core of the Prostaglandin Endoperoxide PGH₂ and Other Cyclic Peroxides by Molecular Mechanics",
Tipo de presentación póster
Congreso "Sixth European Symposium on Organic Chemistry",
Lugar Belgrado (Yugoslavia), Septiembre-1989.

Autores/as: B. Fernández, M.A. Ríos, M.A. Mosquera y S. A. Vázquez
Titulo "Study of the Geometric Trends of 1-Fluoro-2-Propanol and 2-Fluoropropanol by Ab Initio Calculations",
Tipo de presentación: póster
Congreso "Forty Years of Quantum Chemistry",
Lugar Athens (U.S.A.), 16-19 octubre-1989.

Titulo "Ab Initio Conformational Analysis of Propanonitriles",
Tipo de presentación póster
Congreso "Forty Years of Quantum Chemistry",
Lugar Athens (U.S.A.), 16-19 Octubre-1989.

Titulo "An Structural Comparison of Potential HIV Inhibitors: 2',3'-Didesoxynucleosides and 2',3'-Carbonucleosides",
Tipo de presentación póster
Congreso NATO Advanced Study Institute on the Application of Charge Density Research to Chemistry and Drug Design",
Lugar: Sant Feliu de Guixols, Abril-1990.

Titulo "An Ab Initio study of some β -lactam derivatives",
Tipo de presentación póster
Congreso Quantum Chemistry and Molecular Properties Summer School,
Lugar: Sostrup Slot, Dinamarca, Agosto-1990.

Titulo "Study of the Geometric Trends and Rotational Constants of 1,3,-Fluoropropanol by "ab initio" Calculations",
Tipo de presentación póster
Congreso XIX Congresso Internazionale dei Chimici Teorici dei Paesi di Espressione Latina,
Lugar Roma, Septiembre-1990.

Titulo "An ab initio 6-31G* Study of Some Nitriles",
Tipo de presentación póster
Congreso XIX Congresso Internazionale dei Chimici Teorici dei Paesi di Espressione Latina,
Lugar Roma, Septiembre-1990.

Titulo "A Structural Study of the N,N-Dimethyl-1-aminoethanol",
Tipo de presentación póster
Congreso XIX Congresso Internazionale dei Chimici Teorici dei Paesi di Espressione Latina,
Lugar Roma, Septiembre-1990.

Titulo "Molecular Structure of Lumiflavin using the DSCF method",
Tipo de presentación: póster
Congreso 23rd Quantum Theory Conference,
Lugar Oxford, Inglaterra, Septiembre 1990.

Tesis Doctorales dirigidas

Título: GAFit: a computational tool kit for parameterizations of potential energy surfaces

Doctorando: Roberto Rodríguez Fernández

Universidad: Santiago de Compostela

Facultad / Escuela: Instituto Singular de Investigación en Química Biológica y Materiales Moleculares

Fecha: 24/10/2014

Calificación: Sobresaliente cum laude

Codirigida por Emilio Martínez Núñez

Título: Classical trajectory simulations of collisions between polyatomic molecules and a self-assembled monolayer surface

Doctorando: Juan José Nogueira Pérez

Universidad: Santiago de Compostela

Facultad / Escuela: Facultad de Química

Fecha: 21/10/2011

Calificación: Sobresaliente cum laude

Codirigida por Emilio Martínez Núñez

Título: Superficies de energía potencial y dinámica de reacciones unimoleculares

Doctorando: Ángeles Peña Gallego

Universidad: Santiago de Compostela

Facultad / Escuela: Facultad de Química

Fecha: 24/05/2002

Calificación: Sobresaliente cum laude y Premio Extraordinario

Codirigida por Emilio Martínez Núñez

Título: Estudio teórico de reacciones unimoleculares en fase gas

Doctorando: Emilio Martínez Núñez

Universidad: Santiago de Compostela

Facultad / Escuela: Facultad de Química

Fecha: 15/04/1999

Calificación: Sobresaliente cum laude y Premio Extraordinario

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

Participación en comités y representaciones internacionales

Título del Comité:

Entidad de la que depende:

Tema:

Fecha:

Título del Comité:

Entidad de la que depende:

Tema:

Fecha:

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

Experiencia en organización de actividades de I+D

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

Título: Theoretical and Computational Studies of Non-Equilibrium and Non-Statistical Dynamics in Gas-Phase, Condensed-Phase, and Interfacial Reactions

Tipo de actividad: Congreso CECAM (Miembro del Comité Organizador)

Ambito: Internacional

Fecha: 11-13 Abril, 2016

Título: Ninth Triennial Congress of the World Association of the Theoretical and Computational Chemists (WATOC2011)

Tipo de actividad: Congreso (Miembro del Comité Ejecutivo y Responsable del Comité Organizador Local)

Ambito: Internacional

Fecha: 17-21 Julio, 2011

Título: 10th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER 2009)

Tipo de actividad: Congreso (Presidente del Comité Organizador Local)

Ambito: España y Portugal

Fecha: 12-15 Julio, 2009

Título: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA)

Tipo de actividad: Congreso (Presidente del Comité Organizador)

Ambito: Organizado en España con carácter internacional

Fecha: 18-21 Julio, 2006

Título: XIII International workshop on Quantum Atomic & Molecular Tunneling in Solids and other Condensed Phases (Santiago de Compostela, 27-31 Julio, 2005)

Tipo de actividad: Congreso (Miembro del Comité Organizador Local)

Ambito: Internacional

Fecha: 27-31 Julio, 2005

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

Experiencia de gestión de I+D
Gestión de programas, planes y acciones de I+D

Título:

Tipo de actividad:
Fecha:

Título:

Tipo de actividad:
Fecha:

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
(utilice únicamente el espacio equivalente a una página).

Coordinador de la Universidad de Santiago de Compostela del Programa de Doctorado Interuniversitario "Química Teórica y Computacional desde el curso académico 2002-2003 hasta el 2009-2010, ambos incluidos.

Coordinador de la Universidad de Santiago de Compostela del Master Interuniversitario "Química Teórica y Modelización Computacional desde el 21 de abril 2010

Editor invitado del número especial 2092 de la revista "Philosophical Transactions of the Royal Society A" (volumen 375, año 2017), titulado "Theoretical and computational studies of non-equilibrium and non-statistical dynamics in the gas phase, in the condensed phase and at interfaces".