



CLAUDIA MERCEDES
PEREYRA HUELMO
Doctora en Química



cpereyra@fq.edu.uy
Gral. Flores 2124 11800
098354071

SNI

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas
Categorización actual: Iniciación (Activo)

Fecha de publicación: 18/07/2025
Última actualización: 18/07/2025

Datos Generales

INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Universidad de la República/ Facultad de Química / Cátedra de Matemática - DETEMA/ Uruguay

DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Universidad de la República / Facultad de Química / Sector Educación Superior/Público

Dirección: Isidoro de María 1614 / 11800

País: Uruguay / Montevideo / Montevideo

Teléfono: (+598) 29241925

Correo electrónico/Sitio Web: cpereyra@fq.edu.uy <https://www.fq.edu.uy/>

Formación

Formación académica

CONCLUIDA

DOCTORADO

Doctorado en Química (2018 - 2021)

Universidad de la República - Facultad de Química, Matemática, Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa: Caracterización teórica de nanomateriales bidimensionales sobre sustratos

Tutor/es: Pablo A. Denis

Obtención del título: 2021

Sitio web de la disertación/tesis/defensa: [Facultad de Química](#)

Financiación:

Universidad de la República / Comisión Académica de Posgrado, Uruguay

Palabras Clave: Grafeno Nanomateriales DFT

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Nanotecnología Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Química física teórica

ESPECIALIZACIÓN/PERFECCIONAMIENTO

Postdoctoral fellowships, Fogarty, NIH (2021 - 2023)

University of Pennsylvania, Department of Chemistry, Estados Unidos

Título de la disertación/tesis/defensa: Electronic, structural, optical, and magnetic properties of materials.

Tutor/es: Andrew M. Rappe

Descripción del título obtenido: Postdoctorado en Química

Obtención del título: 2023

Financiación:

University of Pennsylvania, Estados Unidos

Palabras Clave: multi-scale modeling first- principles quantum mechanical methods physical chemistry

GRADO

Licenciatura en Química (2016 - 2017)

Universidad de la República - Facultad de Química, Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa: Estudio teórico de la estabilidad, actividad catalítica y

propiedades electrónicas de grafeno doblemente dopado con elementos 2p y 3p
Tutor/es: Pablo Denis
Obtención del título: 2017
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnología Computacional

PREGRADO

Bachiller en Química (2010 - 2017)

Universidad de la República - Facultad de Química, Uruguay
Título de la disertación/tesis/defensa:
Obtención del título: 2017
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica /

Formación complementaria

CONCLUIDA

POSDOCTORADOS

Electronic, structural, optical, and magnetic properties of materials. (2021 - 2023)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / University of Pennsylvania / Departamento de Química, Estados Unidos
Financiación:
Universidad de Pennsylvania, Estados Unidos

CURSOS DE CORTA DURACIÓN

The SIESTA (Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms) method for ab initio order-N materials simulation. (01/2013 - 01/2013)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /
Nanotecnología Computacional

Microsoft Excel 2007 (01/2012 - 01/2012)

Sector Educación Superior/Privado / Instituto Universitario BIOS / Instituto BIOS, Uruguay

PARTICIPACIÓN EN EVENTOS

33 Annual Workshop on Fundamental Physics of Ferroelectrics (2022)

Tipo: Taller
Alcance geográfico: Internacional

2nd International MXene Conference (2022)

Tipo: Congreso
Institución organizadora: Drexel University, Estados Unidos
Alcance geográfico: Internacional

IMOD Annual Meeting (2022)

Tipo: Encuentro
Institución organizadora: IMOD Center, Estados Unidos
Alcance geográfico: Internacional

IMOD Onboarding Course (2022)

Tipo: Seminario
Institución organizadora: IMOD Center, Estados Unidos
Alcance geográfico: Internacional

Séptimo Encuentro Nacional de Química (ENAQUI) (2021)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Pedeciba-Química, Uruguay

Alcance geográfico: Nacional

Electronic Structure of Materials (2019)

Tipo: Taller

Institución organizadora: Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

New Trends in Plasmonics: PA- SPR spectroscopy and hybrid LDM/metal interfaces (2019)

Tipo: Seminario

Institución organizadora: Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Spin-orbitronics properties of two-dimensional materials made of group V elements (2019)

Tipo: Seminario

Institución organizadora: Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

New materials by proximity (2019)

Tipo: Seminario

Institución organizadora: Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Hands-on DFT and beyond: Frontiers of advanced electronic structure and molecular dynamics methods (2018)

Tipo: Otro

Institución organizadora: Peking University, China

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Química Teórica

Primer Taller Latinoamericano de Materiales de carbono para Medio Ambiente y Energía (2014)

Tipo: Taller

Institución organizadora: Facultad de Química y Asociación Uruguaya de Carbono, Uruguay

Palabras Clave: Energía carbono

5th Workshop on Novel Methods for Electronic Structure Calculations (2013)

Tipo: Taller

Institución organizadora: Facultad de Química, Uruguay

OTRAS INSTANCIAS

Auxiliar contable (2012)

Uruguay

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemáticas /

Idiomas

Inglés

Entiende muy bien / Habla muy bien / Lee muy bien / Escribe muy bien

Español

Entiende muy bien / Habla muy bien / Lee muy bien / Escribe muy bien

Áreas de actuación

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Químicas /Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /Nanotecnología Computacional

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Matemáticas /Matemática Pura

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Químicas /Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /Química física teórica

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Físicas /Física de los Materiales Condensados

Actuación profesional

SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PÚBLICO - PROGRAMA DE DESARROLLO DE LAS CIENCIAS BÁSICAS - URUGUAY

Área Química (PEDECIBA) / Facultad de Química

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Otro (04/2022 - a la fecha) Trabajo relevante

Investigador Grado 3 20 horas semanales

SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PÚBLICO - UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA - URUGUAY

Facultad de Química / Matemática - DETEMA

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (11/2021 - a la fecha) Trabajo relevante

Asistente 40 horas semanales / Dedicación total

Escalafón: Docente

Grado: Grado 2

Cargo: Efectivo

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

LEDs basados en Perovskitas (07/2023 - a la fecha)

La próxima generación de LEDs utilizan un semiconductor de haluros metálicos con componentes orgánicos e inorgánicos (híbrido), conocido como perovskita. Estos compuestos ofrecen una amplia flexibilidad en su composición y posibilidad de control en su tamaño, lo que resulta en un alto brillo de gran pureza y emisiones de banda ancha. Las simulaciones basadas en DFT contribuyen a explicar la alta eficiencia de estos dispositivos basados ??en perovskita, arrojando luz sobre un efecto de supresión del desorden dinámico. Maximizar la eficiencia de la electroluminiscencia de los dispositivos optoelectrónicos basados ??en perovskita requiere un enfoque múltiple. Los cálculos de la mecánica cuántica pueden impulsar los hallazgos experimentales hacia la redefinición de los límites de la física y la mejora en la estabilidad de los dispositivos; un paso crucial para las aplicaciones comerciales.

Aplicada

10 horas semanales , Coordinador o Responsable

Equipo: C. Pereyra Huelmo

Palabras clave: LED Optoelectronica perovskitas hibridas

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Nociones fundamentales de quiralidad y magnetismo y su influencia en las propiedades complejas de

los calcogenuros de metales de transición: un estudio teórico (03/2025 - a la fecha)

La quiralidad es una propiedad geométrica omnipresente en la naturaleza, que abarca desde el autoensamblaje biológico y el descubrimiento de fármacos hasta las interacciones quirales fonón-fotón y el diseño de metamateriales ópticos. Hoy en día, la quiralidad está experimentando un resurgimiento, impulsada en parte por el descubrimiento de los llamados fonones quirales en los dicalcogenuros de metales de transición (TMDs). Aunque pueda parecer poco intuitivo, desde una perspectiva fundamental, los movimientos fonónicos de materiales aquirales pueden presentar quiralidad. Los fonones quirales son combinaciones lineales especiales de los fonones E_g doblemente degenerados, cuyos vectores propios exhiben rotaciones con momento angular no nulo en la dirección fuera del plano, y pueden cambiar completamente la polarización de la luz circular incidente. Precisamente, la interrelación entre la quiralidad y las consecuentes respuestas físicas en los novedosos Janus TMDs (estructuras formadas por capas de calcógenos diferentes), componen un punto central de este proyecto. Proponemos un estudio computacional ab initio exhaustivo de las propiedades vibracionales de los Janus TMDs que pueda servir de base para clasificar detalles dispersivos en espectros de Raman. Además, debido a la pérdida de simetría fuera del plano, esperamos que estos derivados tengan características ópticas singulares, en comparación con los TMDs tradicionales. Para evaluar este punto, se estudiará el rol de los fonones en las características dispersivas del espectro de dicroísmo circular de estos materiales. A su vez, el acoplamiento del magnetismo con modos fonónicos distintivos, (por ejemplo, mediante la incorporación de metales de capa abierta en los espacios van der Waals entre monocapas) podría dar lugar a novedosas texturas de espín, ampliando las aplicaciones de los TMDs en dispositivos espintrónicos y nanomagnéticos. Esperamos que este proyecto pueda sentar las bases para la síntesis de nuevos materiales multifuncionales con aplicaciones tecnológicas e inspirar la formación de un/una estudiante en Física-Química Teórica.

20 horas semanales

Coordinador o Responsable

En Marcha

RRHH formados en el proyecto:

Pregrado:1

Especialización:1

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: C. Pereyra Huelmo (Responsable), F. IRIBARNE, FACCIO, R.

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química física teórica

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

DOCENCIA

Matemática (11/2021 - a la fecha)

Grado

Responsable

Asignaturas:

Matemática 01, 7 horas, Práctico

Matemática 07, 5 horas, Práctico

Nivelación en Matemática, 8 horas, Teórico-Práctico

EXTENSIÓN

Miembro Titular de la Comisión de Extensión de Facultad de Química (08/2024 - a la fecha)

Facultad de Química, Extensión

3 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura /

Preparación de actividades y atención del stand interactivo de Matemática de la Facultad de Química para las Jornadas del Día del Patrimonio (10/2024 - a la fecha)

DETEMA, Matemáticas

1 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Nanotecnología Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura /

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ESTADOS UNIDOS

University of Pennsylvania / SAS/ Departamento de Química

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (11/2021 - 05/2023)

Investigador Postdoctoral 40 horas semanales / Dedicación total

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - BRASIL

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Colaborador (11/2019 - 11/2021)

5 horas semanales

ACTIVIDADES

PASANTÍAS

Research on theoretical modeling of 2D materials as part of the work towards my doctoral thesis (11/2019 - 12/2019)

40 horas semanales

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PÚBLICO - UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA - URUGUAY

Facultad de Química / Matemática -DETEMA

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Becario (03/2020 - 10/2021) Trabajo relevante

Becario Doctorado 30 horas semanales

Escalafón: Docente

Grado: Grado 2

Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (04/2018 - 12/2020)

Asistente 30 horas semanales

Escalafón: Docente

Grado: Grado 2

Cargo: Interino

Becario (04/2018 - 02/2020)

Becario Maestría 30 horas semanales

Escalafón: Docente

Grado: Grado 2

Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (08/2017 - 03/2018)

Asistente 40 horas semanales

Escalafón: Docente

Grado: Grado 2

Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (07/2016 - 07/2017)

Ayudante 40 horas semanales

Escalafón: Docente

Grado: Grado 1

Cargo: Interino

Becario (07/2013 - 11/2014)

Ayudante 25 horas semanales

Escalafón: Docente

Grado: Grado 1

Cargo: Interino

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Nanomateriales basados en el carbono (07/2013 - a la fecha)

La Nanotecnología computacional está relacionada con el estudio de las propiedades químicas de nanomateriales, en particular el grafeno, asistido por cálculos computacionales. El grafeno posee propiedades inusuales que atraen gran atención. Sin embargo, el hecho de poseer propiedades extraordinarias no es suficiente y se busca incesantemente la forma de modificar sus características moleculares. En este sentido, la modificación del grafeno mediante la funcionalización covalente es un método poderoso. Nuestra investigación se centra en el estudio teórico de la estabilidad, actividad catalítica y propiedades electrónicas de grafeno así como el uso de nanoestructuras para almacenar hidrógeno.

Fundamental

20 horas semanales

Cátedra de Matemáticas - DETEMA, Nanotecnología Computacional , Integrante del equipo

Equipo: PABLO A. DENIS , F. IRIBARNE

Palabras clave: Grafeno Nanotecnología Computacional Dopado Cálculos Teóricos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Nanotecnología Computacional

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Desarrollo de nanoestructuras derivadas del grafeno para almacenar hidrógeno (07/2013 - 11/2014)

El objetivo de este proyecto consiste en desarrollar un compuesto derivado del grafeno que sea capaz de almacenar al menos 7.5% en peso de hidrógeno (densidad gravimétrica), 70 kg/m³ (densidad volumétrica) y una energía de adsorción de 15 kJ/mol por molécula de H₂. Con este fin planeamos introducir centros insaturados en el grafeno que permitan la unión de metales livianos como el calcio, aluminio. De esta manera se evitará el depósito de clusters metálicos y se distribuirán homogéneamente sobre el grafeno. El hecho de que se empleen metales livianos no afectaría significativamente la capacidad de almacenamiento de la nanoestructura y tampoco elevaría el costo del compuesto debido a que el grafeno, aluminio y calcio poseen un bajo costo, característica esencial para su producción a gran escala

25 horas semanales

Cátedra de Matemáticas - DETEMA , Nanotecnología Computacional

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

RRHH formados en el proyecto:

Pregrado:1

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: PABLO A. DENIS (Responsable) , F. IRIBARNE

Palabras clave: Energía

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Nanotecnología Computacional

DOCENCIA

Ingeniero Químico (03/2017 - a la fecha)

Grado

Responsable

Asignaturas:

Curso Nivelación Matemática, 8 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Química / Ingeniería Química / Matemática

Ingeniería Química (07/2018 - a la fecha)

Grado

Responsable

Asignaturas:

Curso Diferencial de Matemática 01, 6 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura /

Ingeniería Química (04/2017 - a la fecha)

Grado

Responsable

Asignaturas:

Matemática 01, 6 horas, Práctico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura /

Ingeniería Química (08/2017 - a la fecha)

Grado

Asistente

Asignaturas:

Matemática 04, 6 horas, Práctico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura /

Ingeniería Química (08/2017 - a la fecha)

Grado

Responsable

Asignaturas:

Curso de Apoyo de Matemática 01, 6 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura /

Ingeniería Química (08/2019 - a la fecha)

Grado

Responsable

Asignaturas:

Matemática 07, 4 horas, Práctico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura /

Ingeniería Química (07/2016 - a la fecha)

Grado

Asistente

Asignaturas:

Curso Diferencial de Matemática 01, 12 horas, Teórico-Práctico

Matemática 01, 12 horas, Práctico

Nivelación, 16 horas, Teórico-Práctico

Curso de Apoyo de Matemática 01, 12 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura / Análisis

Ingeniería Química (08/2016 - 12/2016)

Grado

Asistente

Asignaturas:

Curso Diferencial de Matemática 01, 6 horas, Teórico-Práctico
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Matemática

EXTENSIÓN

Participación en el Día del Patrimonio (10/2019 - a la fecha)

1 horas
Áreas de conocimiento:
Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación Especial /

GESTIÓN ACADÉMICA

Miembro de la Comisión de Licenciatura en Química de Facultad de Química (02/2019 - 09/2021)

Participación en consejos y comisiones 2 horas semanales
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

Miembro de la Comisión de Género de Facultad de Química (04/2018 - 10/2020)

Participación en consejos y comisiones 2 horas semanales
Áreas de conocimiento:
Ciencias Sociales / Psicología / Psicología /

SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PÚBLICO - PROGRAMA DE DESARROLLO DE LAS CIENCIAS BÁSICAS - URUGUAY

Área Química (PEDECIBA)

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Otro (02/2018 - 10/2021)

Estudiante Doctorado 30 horas semanales

SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PÚBLICO - UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA - URUGUAY

Facultad de Ingeniería

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Becario (08/2015 - 05/2016)

Profesor Ayudante 20 horas semanales
Escala: Docente
Grado: Grado 1
Cargo: Interino

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Celdas Solares Fotovoltaicas (08/2015 - 05/2016)

Aplicada
20 horas semanales
Instituto de Física, Integrante del equipo
Equipo: R. MAROTTI , E. DALCHIELE
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Celdas Solares Fotovoltaicas

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Caracterización de Materiales para Celdas Solares Fotovoltaicas (08/2015 - 05/2016)

20 horas semanales
Instituto de Física
Investigación
Integrante del Equipo
Concluido

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: R. MAROTTI (Responsable), E. DALCHIELE

Palabras clave: Energía Celdas Solares

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Celdas Solares Fotovoltaicas

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Caracterización Física de Materiales

CARGA HORARIA

Carga horaria de docencia: 25 horas

Carga horaria de investigación: 30 horas

Carga horaria de formación RRHH: Sin horas

Carga horaria de extensión: 1 hora

Carga horaria de gestión: 4 horas

Producción científica/tecnológica

Desde mi integración en el año 2013 al grupo de Nanotecnología Computacional del área Matemática del Departamento de Experimentación y Teoría de la Materia y sus Aplicaciones, de la Facultad de Química, he venido realizando tareas de investigación en el marco de la aplicación de metodologías de cálculo teórico (DFT y abinitio) al estudio de la estabilidad estructural, las propiedades catalíticas y las propiedades electrónicas del grafeno y nanomateriales afines. El grafeno, material de reciente aislamiento, es quizás el que cuenta con la mayor potencialidad en cuanto a aplicaciones tecnológicas. En los últimos años, fruto de innumerables investigaciones a nivel mundial, se ha logrado incrementar de manera importante el conocimiento sobre dicho nanomaterial y aplicar estrategias (dentro de estas la más común resulta ser el dopado) con el fin de mejorar las propiedades de la lámina prístina. A pesar de todos estos avances, la química del grafeno necesita ser considerablemente expandida empleando nuevas reacciones, sin olvidar que se deben comprender por qué las reacciones antes mencionadas ocurren, y aclarar eventuales discrepancias que pueden surgir entre los cálculos teóricos y los resultados experimentales reportados. Mis estudios de Licenciatura en Química se centraron en la investigación del doble dopado del grafeno, mientras que mi tesis de Doctorado en Química versó sobre la aplicación de metodologías de cálculo teórico (DFT) al estudio de la estabilidad estructural, las propiedades catalíticas y las propiedades electrónicas del grafeno sobre el carburo de silicio.

Mi investigación actual se centra en el desarrollo de fuentes de energía sostenibles y tecnologías cuánticas, mediante metodología computacional de Primeros Principios. Utilizo enfoques teóricos y computacionales para estudiar las propiedades electrónicas, vibracionales, magnéticas, ópticas y estructurales de superficies, interfaces y materiales bulk con aplicaciones en catálisis, propiedades optoelectrónicas y energéticas.

Producción bibliográfica

ARTÍCULOS PUBLICADOS

ARBITRADOS

Restoring the electronic properties of epitaxial graphene on SiC substrate by Ar intercalation (Completo, 2024)

C. Pereyra Huelmo, F. IRIBARNE

Computational Condensed Matter, 2024

ISSN: 23522143

DOI: [10.1016/j.cocom.2024.e00907](https://doi.org/10.1016/j.cocom.2024.e00907)

WEB OF SCIENCE® Scopus

Two Spacers, One Perovskite: Integrating Ruddlesden-Popper and Dion-Jacobson Halide Perovskites (Completo, 2024) Trabajo relevante

C. Pereyra Huelmo , Jared D. Fletcher , Aaron M. Schankler , Cheng Liu , Yi Yang , Craig C. Laing , Evan H. Oriel , Lin X. Chen , Richard D. Schaller , Edward H. Sargent , Andrew M. Rappe , Mercuri G. Kanatzidis

Chemistry of Materials, 2024

ISSN: 08974756

E-ISSN: 15205002

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.4c00907>

WEB OF SCIENCE™ Scopus 

Surface-binding molecular multipods strengthen the halide perovskite lattice and boost luminescence (Completo, 2024) Trabajo relevante

C. Pereyra Huelmo , Dong-Hyeok Kim , Seung-Je Woo , Min-Ho Park , Aaron M. Schankler , Zhenbang Dai , Jung-Min Heo , Sungjin Kim , Guy Reuveni , Sungsu Kang , Joo Sung Kim , Hyung Joong Yun , Jinwoo Park , Jungwon Park , Omer Yaffe , Andrew M. Rappe , Tae-Woo Lee

Nature Communications, 2024

E-ISSN: 20411723

DOI: <https://doi.org/10.1038/s41467-024-49751-7>

WEB OF SCIENCE™ Scopus 

Stabilizing Ti₃C₂T_x MXene flakes in air by removing confined water (Completo, 2024) Trabajo relevante

C. Pereyra Huelmo , Zahra Fakhraai , Hui Fang , Anupma Thakur , Amirhossein Zahmatkeshsaredorahi , Zhenyao Fang , Vahid Rad , Ahmad A Shamsabadi , Masoud Soroush , Andrew M Rappe , Xiaoji G Xu , Babak Anasori

Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2024

ISSN: 00278424

E-ISSN: 10916490

DOI: [10.1073/pnas.2400084121](https://doi.org/10.1073/pnas.2400084121)

WEB OF SCIENCE™ Scopus 

On the electronic properties of defective graphene buffer layer on 6H-SiC (0001) (Completo, 2021)

C. Pereyra Huelmo , Federico Iribarne , Pablo A. Denis

Computational Condensed Matter, v.: 26 e0053 , 2021

ISSN: 23522143

DOI: [10.1016/j.cocom.2021.e00538](https://doi.org/10.1016/j.cocom.2021.e00538)

Scopus

Elucidating the electronic and magnetic properties of epitaxial graphene grown on SiC with a defective buffer layer (Completo, 2021)

C. Pereyra Huelmo , Federico Iribarne , Pablo A. Denis

Journal of Materials Science, v.: 56 p.:11386 - 11401, 2021

ISSN: 00222461

E-ISSN: 15734803

WEB OF SCIENCE™ Scopus

Impact of oxygen adsorption on the electronic properties and contact type of a defective epitaxial graphene-SiC interface (Completo, 2021)

C. Pereyra Huelmo , Pablo A. Denis

Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1203 113361 , 2021

ISSN: 2210271X

E-ISSN: 22102728

WEB OF SCIENCE™ Scopus

Structural and magnetic properties of a defective graphene buffer layer grown on SiC(0001): a DFT study (Completo, 2020)

C. Pereyra Huelmo , Marcos G. Menezes , Rodrigo B. Capaz , DENIS, P.A.

Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 22 p.:16096 - 16106, 2020

ISSN: 14639076

E-ISSN: 14639084

DOI: [10.1039/D0CP02167A](https://doi.org/10.1039/D0CP02167A)

Scopus

Unraveling the electromagnetic structure of the epitaxial graphene buffer layer (Completo, 2019)

C. Pereyra Huelmo , Pablo A. Denis
Journal of Physics Condensed Matter, 2019
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Nanotecnología
ISSN: 09538984
E-ISSN: 1361648X
DOI: [10.1088/1361-648X/ab2ee2](https://doi.org/10.1088/1361-648X/ab2ee2)
WEB OF SCIENCE™ Scopus

Cycloaddition reactions on epitaxial graphene (Completo, 2019)

C. Pereyra Huelmo , Pablo A. Denis
New Journal of Chemistry, 2019
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Nanotecnología
ISSN: 11440546
E-ISSN: 13699261
DOI: [10.1039/C9NJ02528F](https://doi.org/10.1039/C9NJ02528F)
WEB OF SCIENCE™ Scopus

Silicon Carbide Induced Doping of Graphene: A new Potential Synthetic Route for SiC₃ Siligraphene (Completo, 2019) Trabajo relevante

C. Pereyra Huelmo , Pablo A. Denis
Journal of Physics Condensed Matter, 2019
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /
ISSN: 09538984
E-ISSN: 1361648X
DOI: [10.1021/acs.jpcc.9b07978](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b07978)
WEB OF SCIENCE™ Scopus

On the band gaps and effective masses of Mono and dual doped monolayer graphene (Completo, 2017)

PABLO A. DENIS, C. Pereyra Huelmo , F. IRIBARNE
Computational Materials Science, v.: 137 p.:20 - 29, 2017
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnología Computacional
ISSN: 09270256
DOI: [10.1016/j.commatsci.2017.05.006](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2017.05.006)
WEB OF SCIENCE™ Scopus

Band Gap Opening in Dual Doped Monolayer Graphene (Completo, 2016)

PABLO A. DENIS, C. Pereyra Huelmo , ADRIANO SOUZA MARTIN
Journal of Physical Chemistry. C, v.: 120 13 , p.:7103 - 7112, 2016
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnología Computacional
ISSN: 19327447
E-ISSN: 19327455
DOI: [10.1021/acs.jpcc.5b11709](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b11709)
WEB OF SCIENCE™ Scopus

Structural characterization and chemical reactivity of dual doped graphene (Completo, 2015)

PABLO A. DENIS, C. Pereyra Huelmo
Carbon, v.: 87 p.:106 - 115, 2015
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnología Computacional
ISSN: 00086223
DOI: [10.1016/j.carbon.2015.01.049](https://doi.org/10.1016/j.carbon.2015.01.049)
WEB OF SCIENCE™ Scopus

Theoretical characterization of sulfur and nitrogen dual-doped graphene. (Completo,

2014) Trabajo relevante

PABLO A. DENIS, C. Pereyra Huelmo, F. IRIBARNE
Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1049 p.:13 - 19, 2014

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnología Computacional

ISSN: 2210271X

E-ISSN: 22102728

DOI: [10.1016/j.comptc.2014.08.023](https://doi.org/10.1016/j.comptc.2014.08.023)

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

New trends along hydrogen polyoxides: unusually long oxygen-oxygen bonds in H₂O₆ and H₂O₇ (Completo, 2014)

PABLO A. DENIS, C. Pereyra Huelmo
Molecular Physics, v.: 112 23, p.:3047 - 3056, 2014

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnología Computacional

ISSN: 00268976

E-ISSN: 13623028

DOI: [10.1080/00268976.2014.928385](https://doi.org/10.1080/00268976.2014.928385)

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

PUBLICACIÓN DE TRABAJOS PRESENTADOS EN EVENTOS

Surface-Binding Molecular Multipods Strengthen the Halide Perovskite Lattice and Boost Luminescence (2024)

C. Pereyra Huelmo

Publicado

Resumen

Descripción: XXV Latin American Symposium on Solid State Physics (SLAFES)

Ciudad: Barranquilla

Año del evento: 2024

Publicación arbitrada

Estudio Teórico de la Interacción de Contaminantes Agrícolas Adsorbidos en Superficies Grafénicas Mediante Simulaciones Moleculares (2023)

R. Manassi, D. Carvalho, J. Cantero, C. Pereyra Huelmo, F. Iribarne

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: XXXIX Congreso Argentino de Mecánica Computacional y I Congreso Argentino Uruguayo de Mecánica Computacional

Ciudad: Concordia

Año del evento: 2023

Editorial: Federico

Medio de divulgación: Internet

<https://amcaonline.org.ar/ocs/index.php/mecom2023/mecom2023/paper/view/7509/0>

Estudio in Silico de la Proteína VP8 de Rotavirus y su Interacción con Superficies de Sílica Amorfa (2023)

E. Alvareda, D. Carvalho, J. Cantero, C. Pereyra Huelmo, F. Iribarne, P. Ramazzo

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: XXXIX Congreso Argentino de Mecánica Computacional y I Congreso Argentino Uruguayo de Mecánica Computacional

Ciudad: Concordia

Año del evento: 2023

<https://amcaonline.org.ar/ocs/index.php/mecom2023/mecom2023/paper/view/7510/0>

Estudio teórico de la interacción de contaminantes agrícolas adsorbidos en superficies grafénicas mediante simulaciones moleculares (2023)

R. Manassi , D. Carvalho , J. Cantero , C. Pereyra Huelmo , F. Iribarne , E. Alvareda
Publicado
Resumen
Evento: Nacional
Descripción: Octavo Encuentro Nacional de Química (ENAQUI)
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2023

Novel 1-3 cycloadditions of benzyne on epitaxial graphene: a DFT study (2018)

C. Pereyra Huelmo
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: Hands-on DFT and beyond: Frontiers of advanced electronic structure and molecular dynamics methods
Ciudad: Pekin
Año del evento: 2018
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Química Teórica

Investigation of the Stability, Electronic Properties and Catalytic activity of Dual-doped Graphene with First and Second Row Atoms (2014)

C. Pereyra Huelmo , PABLO A. DENIS
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: Primer Taller Latinoamericano de Materiales de carbono para Medio Ambiente y Energía
Ciudad: Punta del Este
Año del evento: 2014
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología Computacional

Producción técnica

OTRAS PRODUCCIONES

DESARROLLO DE MATERIAL DIDÁCTICO O DE INSTRUCCIÓN

Filmación y procesamiento de videos de clases prácticas del curso Matemática 07 (Ecuaciones Diferenciales Ordinarias) (2021)

C. Pereyra Huelmo

País: Uruguay

Idioma: Español

Medio divulgación: Internet

Web: <https://www.youtube.com/playlist?list=PLZxHD7SE5X3TcglQYlezSKgSFOa-aZjdm>

Filmación y procesamiento de videos de clases prácticas del curso Matemática 07 (Ecuaciones Diferenciales Ordinarias), en el marco del dictado virtual por la emergencia sanitaria del covid-19

Elaboración de material de repaso digital para el curso Matemática 01 (Análisis I) (2020)

C. Pereyra Huelmo

País: Uruguay

Idioma: Español

Medio divulgación: Internet

Web: <https://www.youtube.com/playlist?list=PLZxHD7SE5X3RLVnJoYLzyINk4Bfmthoww>

Elaboración de material de repaso digital para el curso Matemática 01 (Análisis I)

Filmación y procesamiento de videos de clases prácticas del curso Matemática 01 (Análisis I) (2020)

C. Pereyra Huelmo

País: Uruguay
Idioma: Español
Medio divulgación: Internet
Web: https://www.youtube.com/playlist?list=PLZxHD7SE5X3TNug5p3UrQrTB9m_51btdX
Filmación y procesamiento de videos de clases prácticas del curso Matemática 01 (Análisis I), en el marco del dictado virtual por la emergencia sanitaria del covid-19

Filmación y procesamiento de videos de clases prácticas del curso Nivelación Matemática (2020)

C. Pereyra Huelmo

País: Uruguay
Idioma: Español
Medio divulgación: Internet
Web: <https://www.youtube.com/playlist?list=PLZxHD7SE5X3RsVSWecCi7z5Axx8vuXzB0>
Filmación y procesamiento de videos de clases prácticas del curso Nivelación Matemática en el marco del dictado virtual por la emergencia sanitaria del covid-19

Elaboración de los prácticos del curso Matemática 07 (2019)

C. Pereyra Huelmo

País: Uruguay
Idioma: Español
Ecuaciones Diferenciales Ordinarias
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura /

Elaboración de las soluciones de ejercicios de práctico del curso Matemática 07 (2019)

C. Pereyra Huelmo

País: Uruguay
Idioma: Español
Ecuaciones Diferenciales Ordinarias
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura /

Elaboración de soluciones de ejercicios del curso Nivelación Matemática (2017)

C. Pereyra Huelmo

País: Uruguay
Idioma: Español
Nivelación Matemática 01
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura /

Elaboración de soluciones de ejercicios de práctico del curso Matemática 01 (2017)

C. Pereyra Huelmo

País: Uruguay
Idioma: Español
Matemática 01
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura /

Elaboración de soluciones de ejercicios de práctico del curso Matemática 04 (2017)

C. Pereyra Huelmo

País: Uruguay
Idioma: Español
Análisis II
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura /

Elaboración de apuntes de teórico del curso Matemática 07 (2016)

C. Pereyra Huelmo

País: Uruguay

Idioma: Español

Ecuaciones Diferenciales Ordinarias

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura /

ORGANIZACIÓN DE EVENTOS

Día Internacional de la mujer y la niña en la ciencia (2020)

C. Pereyra Huelmo

Exposición

Sub Tipo: Otra

Lugar: Uruguay ,Facultad de Química Montevideo

Idioma: Español

Institución Promotora/Financiadora: Facultad de Química - Comisión de Género

Día Internacional de la mujer y la niña en la ciencia (2019)

C. Pereyra Huelmo

Exposición

Sub Tipo: Otra

Lugar: Uruguay ,Facultad de Química Montevideo

Idioma: Español

Institución Promotora/Financiadora: Facultad de Química - Comisión de Género

Evaluaciones

EVALUACIÓN DE PUBLICACIONES

REVISIONES

Journal of Physical Chemistry C (2022)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

New Journal of Chemistry (2022)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

RSC Advances (2021)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: De 5 a 20

EVALUACIÓN DE CONVOCATORIAS CONCURSABLES

Llamados a aspirantes a Ayudantes (Docente G1) de la Cátedra de Matemática (2025)

Comité evaluador

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

Llamados a aspirantes a Asistentes (Docente G2) de la Cátedra de Matemática (2025)

Comité evaluador

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

Llamados a aspirantes a Ayudantes (Docente G1) de la Cátedra de Matemática (2024)

Comité evaluador

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

Llamados a aspirantes a Asistentes (Docente G2) de la Cátedra de Matemática (2024)

Comité evaluador
Cantidad: Menos de 5

Llamados a aspirantes a Ayudantes (Docente G1) de la Cátedra de Matemática (2021)

Comité evaluador
Uruguay
Cantidad: Menos de 5

Llamados a aspirantes a Asistentes (Docente G2) de la Cátedra de Matemática (2021)

Comité evaluador
Uruguay
Cantidad: Menos de 5

Llamados a aspirantes a Ayudantes (Docente G1) de la Cátedra de Matemática (2020)

Comité evaluador
Uruguay
Cantidad: Menos de 5

Llamados a aspirantes a Asistentes (Docente G2) de la Cátedra de Matemática (2020)

Comité evaluador
Uruguay
Cantidad: Menos de 5

Llamados a aspirantes a Ayudantes (Docente G1) de la Cátedra de Matemática (2019)

Comité evaluador
Uruguay
Cantidad: Menos de 5

Llamados a aspirantes a Asistentes (Docente G2) de la Cátedra de Matemática (2019)

Comité evaluador
Uruguay
Cantidad: Menos de 5

Llamados a aspirantes a Ayudantes Honorarios de la Cátedra de Matemática (2018)

Comité evaluador
Uruguay
Cantidad: Menos de 5

Formación de RRHH

TUTORÍAS CONCLUIDAS

OTRAS

Supervisión de investigación (2021 - 2021)

Iniciación a la investigación
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química /
Matemática - DETEMA , Uruguay
Programa: Colaborador Honorario Matemática
Tipo de orientación: Asesor
Nombre del orientado: Federico Mesa
País: Uruguay

Supervisión de investigación (2021 - 2021)

Iniciación a la investigación
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química /
Matemática - DETEMA , Uruguay
Programa: Colaborador Honorario Matemática
Tipo de orientación: Asesor
Nombre del orientado: Martin Aguilera
País: Uruguay

Supervisión de investigación (2019 - 2019)

Iniciación a la investigación
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química /
Matemática -DETEMA, Uruguay
Programa: Colaborador Honorario Matemática
Tipo de orientación: Asesor
Nombre del orientado: Rodrigo Manassi
País: Uruguay

Otros datos relevantes

PREMIOS, HONORES Y TÍTULOS

Beca Doctorado CAP (2020)

(Nacional)
Comisión Académica de Posgrado

Científica invitada a la Universidad Federal de Río de Janeiro (2019)

(Internacional)
UFRJ

Beca Maestría CAP (2018)

(Nacional)
Comisión Académica de Posgrado

PRESENTACIONES EN EVENTOS

Octavo Encuentro Nacional de Química (ENAQUI) (2023)

Congreso
Estudio teórico de la interacción de contaminantes agrícolas adsorbidos en superficies grafénicas mediante simulaciones moleculares
Uruguay
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: PEDECIBA (Química)
Alcance geográfico: Nacional

XXXIX Congreso Argentino de Mecánica Computacional y I Congreso Argentino Uruguayo de Mecánica Computacional (2023)

Congreso
Estudio in Silico de la Proteína VP8 de Rotavirus y su Interacción con Superficies de Sílica Amorfa Argentina
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: Asociación Argentina de Mecánica Computacional
Alcance geográfico: Regional

Asociación Argentina de Mecánica Computacional, XXXIX Congreso Argentino de Mecánica Computacional y I Congreso Argentino Uruguayo de Mecánica Computacional (2023)

Congreso
Estudio Teórico de la Interacción de Contaminantes Agrícolas Adsorbidos en Superficies Grafénicas Mediante Simulaciones Moleculares
Argentina
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: Asociación Argentina de Mecánica Computacional
Alcance geográfico: Regional

Hands-on DFT and beyond: Frontiers of advanced electronic structure and molecular dynamics methods (2018)

Taller
Novel 1-3 cycloadditions of benzyne on epitaxial graphene: a DFT study

China
 Tipo de participación: Expositor oral
 Nombre de la institución promotora: Universidad de Pekin
 Alcance geográfico: Internacional Areas de conocimiento:
 Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Química Teórica

Primer Taller Latinoamericano de Materiales de carbono para Medio Ambiente y Energía (2014)

Taller
 Presentación de póster "Investigation of the Stability, Electronic Properties and Catalytic activity of Dual-doped Graphene with First and Second Row Atoms"
 Uruguay
 Tipo de participación: Poster
 Carga horaria: 15
 Nombre de la institución promotora: Facultad de Química y Asociación Uruguaya de Carbono
 Palabras Clave: Grafeno Energía carbono
 Areas de conocimiento:
 Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Nanotecnología Computacional

CONSTRUCCIÓN INSTITUCIONAL

Adquisición, instalación (hardware y software) y configuración, junto al Dr. Federico Iribarne, de un cluster de estaciones de trabajo de gran porte del área Matemática, constituido por 12 equipos con 288 núcleos, 768 GB de RAM y 15 TB de almacenamiento, dedicado al cálculo de estructuras y propiedades de sistemas químicos complejos relevantes al campo de los nanomateriales.

Información adicional

Organización de reuniones científicas
 -MRS IMOD Symposium, Materials Research Society, Seattle-USA, abril 2024
 Inglés
 -First Certificate in English, Cambridge University, UK.

Indicadores de producción

ACTIVIDADES	21
Líneas de investigación	3
Proyectos Investigación Desarrollo	3
Docencia	9
Extensión	3
Gestión Académica	2
Pasantía	1
PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA	22
Artículos publicados en revistas científicas	16
Completo	16
Trabajos en eventos	6
Otros tipos	12
PRODUCCIÓN TÉCNICA	12
EVALUACIONES	14

Evaluación de publicaciones	3
Evaluación de convocatorias concursables	11
FORMACIÓN RRHH	3
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas	3
Iniciación a la investigación	3