



PABLO ANDRÉS DENIS
MARINONI

Dr

pabod@fq.edu.uy

Facultad de Química, Gral Flores 2124, CC1157, 11600, Montevideo, Uruguay
099714280

SNI

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

Fecha de publicación: 01/06/2020

Última actualización: 15/04/2020

Datos Generales

INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Universidad de la República/ Facultad de Química - UDeLaR/ DETEMA / Uruguay

DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

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

Dirección: Gral. Flores 2124, Facultad de Química, DEQUIFIM / 11600 / Montevideo , Montevideo , Uruguay

Teléfono: (11600) 099714280

Correo electrónico/Sitio Web: pablod@fq.edu.uy

Formación

Formación académica

CONCLUIDA

DOCTORADO

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (2001 - 2004)

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

Título de la disertación/tesis/defensa: Estudio cinético y termodinámico de reacciones químicas de interés atmosférico

Tutor/es: Minh Tho Nguyen Oscar N. Ventura

Obtención del título: 2004

Áreas de conocimiento:

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

MAESTRÍA

Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA) (1998 - 2000)

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

Título de la disertación/tesis/defensa: Estudio teórico computacional de reacciones químicas de interés atmosférico

Tutor/es: Oscar N. Ventura

Obtención del título: 2000

Áreas de conocimiento:

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

GRADO

Bachiller en Química (1994 - 1997)

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

Título de la disertación/tesis/defensa:

Obtención del título: 1998

Áreas de conocimiento:

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

Formación complementaria

CONCLUIDA

POSDOCTORADOS

Theoretical Characterization of Transition metal Carbides, Prof. Dr. Krishnan Balasubramanian (2004 - 2005)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / University Of California At Davis , Estados Unidos

Areas de conocimiento:

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

CURSOS DE CORTA DURACIÓN

estudio estructural de moléculas bioactivas, espectroscopia (EPR) (01/2001 - 01/2001)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay

20 horas

Areas de conocimiento:

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

Espectroscopía molecular (01/2000 - 01/2000)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay

400 horas

Areas de conocimiento:

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

Termodinámica Estadística (01/2000 - 01/2000)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay

400 horas

Areas de conocimiento:

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

Modelado Molecular y Espectros Electrónicos (01/1999 - 01/1999)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay

400 horas

Areas de conocimiento:

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

Química Cuántica Aplicada (01/1998 - 01/1998)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay

400 horas

Areas de conocimiento:

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

Mecánica Cuántica (01/1998 - 01/1998)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay

400 horas

Areas de conocimiento:

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

Modelado Biomolecular (01/1997 - 01/1997)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR,

Uruguay

400 horas

Areas de conocimiento:

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

Cristalografía (01/1996 - 01/1996)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR,

Uruguay

400 horas

Areas de conocimiento:

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

Espectroscopía molecular III (01/1996 - 01/1996)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR,

Uruguay

20 horas

Areas de conocimiento:

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

PARTICIPACIÓN EN EVENTOS

Curso de Nanotecnología dictado por Tatiana Makarova (2005)

Tipo: Otro

Institución organizadora: Facultad de Ingeniería, Uruguay

Areas de conocimiento:

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

Modelos de Evolución de Proteínas (2001)

Tipo: Otro

Institución organizadora: Facultad de Química, Uruguay

Areas de conocimiento:

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

Química del Estado sólido (1996)

Tipo: Otro

Institución organizadora: Facultad de Química, Uruguay

Areas de conocimiento:

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

Primer y segundo año de la Licenciatura en Matemáticas, Facultad de Ciencias (1994)

Tipo: Otro

Institución organizadora: Facultad de Ciencias, Uruguay

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura /

Idiomas

Inglés

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

Areas de actuación

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Nanotecnología, Química Inorgánica, Atmosférica, Orgánica,

Actuación profesional

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

Facultad de Química - UDeLaR

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (07/2008 - a la fecha)

Prof. Adjunto ,40 horas semanales / Dedicación total
Escalafón: Docente
Grado: Grado 3
Cargo: Efectivo

Funcionario/Empleado (06/2007 - 07/2008)

Grado 2 ,40 horas semanales / Dedicación total
Escalafón: Docente
Grado: Grado 2
Cargo: Efectivo

Funcionario/Empleado (02/2006 - 06/2007)

Grado 2 ,35 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 2
Cargo: Efectivo

Funcionario/Empleado (06/2005 - 02/2006)

Grado 2 ,30 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 2
Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (02/2002 - 06/2005)

Grado 2 ,20 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 2
Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (05/2001 - 02/2002)

Grado 1 ,25 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 1
Cargo: Interino

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Nanotecnología Computacional (07/2005 - a la fecha)

La nanotecnología es una de las nuevas disciplinas emergentes en el mundo científico. Sus orígenes se remontan a la década de los 80 cuando Kroto, Smalley y Curl descubrieron una nueva forma alotrópica de carbono, el C60. En 1991 la nanotecnología dio un segundo gran paso con el descubrimiento de los nanotubos de carbono. El mismo fue realizado por Iijima en los laboratorios de la empresa NEC, cuando logró plegar láminas de grafito para formar multiwall carbon nanotubes (MWCNT).El avanza mas reciente ha sido la síntesis de laminas de grafeno. Luego de más de 20 años de investigaciones sobre la química de fullerenos y nanotubos podemos decir que las áreas más importantes de trabajo son las que se detallan a continuación. 1) Estudio de la reactividad química propiedades electrónicas y magnéticas de laminas de grafeno 2) estudio de la reactividad, propiedades electrónicas y magnéticas de nanotubos de carbono 3) Uso de nanoestructuras para almacenar hidrógeno 4) propiedades mecánicas de nanotubos
40 horas semanales
Facultad de Química, Grupo de Nanotecnología Computacional y Química Teórica , Coordinador o

Responsable

Equipo: IRIBARNE, F , PEREYRA, C.M.

Palabras clave: Nanotecnología, Química Teórica

Areas de conocimiento:

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

Caracterización de radicales de importancia en química atmosférica, procesos combustión y astroquímica (07/2008 - a la fecha)

La caracterización moléculas cuyo tiempo de vida es muy corto, debido a su alta reactividad, es de trascendental importancia en el modelado de los procesos que transcurren en la química atmosférica, la química de combustión y el estudio de la química en el espacio. Como consecuencia de sus propiedades químicas, la caracterización experimental de estas especies es extremadamente dificultosa. Actualmente, la química teórica ha llegado a un nivel en el que permite obtener información sobre moléculas que contienen hasta 8-10 átomos pesados, con una calidad similar o mejor a la que se obtendría en las investigaciones experimentales. Prueba de ello, es que en la próxima edición del CRC Handbook of Physics and Chemistry la información obtenida por el presente investigador para los radicales HSO, SOH y HOOO serán considerados como los valores de referencia ya que no existe confianza en los resultados experimentales. Empleando metodologías multirreferencia, coupled clusters o DFT caracterizamos moléculas e investigamos reacciones químicas en las áreas antes mencionadas. Para obtener una buena caracterización es necesario emplear además de las metodologías antes mencionadas, bases que permitan extrapolar al infinito, incluir correcciones para los efectos core valence, relativistas escalares, spin orbit splitting y efectos anarmónicos. Actualmente estamos enfocados en la evaluación de estas dos últimas contribuciones.

40 horas semanales

Facultad de Química, Grupo de Nanotecnología y Química Teórica , Coordinador o Responsable

Equipo:

Areas de conocimiento:

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

Química Supramolecular (06/2008 - a la fecha)

En esta línea de investigación buscamos junto al Dr. Jorge Gancheff la síntesis de macroestructuras empleando como bloques complejos metálicos que contienen diferentes spacers.

20 horas semanales

Facultad de Química , Coordinador o Responsable

Equipo:

Palabras clave: Química Supramolecular

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Complejos de Renio

Celdas Solares (10/2013 - a la fecha)

En esta línea de investigación buscamos diseñar con el Dr. Gancheff nuevos pigmentos para celdas solares

10 horas semanales , Integrante del equipo

Equipo: GANCHEFF, J.S.

Palabras clave: Química Inorgánica

Areas de conocimiento:

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

Diseño de Fármacos (06/2004 - a la fecha)

En esta línea de investigación colaboramos con la Dra Margot Paulino y el Dr. Federico Iribarne para sintetizar nuevos medicamentos capaces de tratar enfermedades como el mal de chagas. Asimismo, estamos buscando la manera de emplear nanoestructuras para realizar en forma más efectiva el "delivery" de las drogas a las zonas enfermas. Para ello pensamos unir las drogas a los nanotubos de carbono mediante interacciones no covalentes.

20 horas semanales

Facultad de Química , Integrante del equipo

Equipo:

Palabras clave: Farmacología

Areas de conocimiento:

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

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Desarrollo de nuevas celdas solares sensibilizadas por colorante a partir de modificaciones del pigmento N3 (07/2016 - a la fecha)

El acceso a energía de bajo costo representa una variable sumamente importante en un desarrollo socio-económico sostenido en países con economías emergentes como lo es Uruguay. En ese sentido, un fuerte impulso a la diversificación de la matriz energética aparece como una buena estrategia. Las energías renovables que se presentan como una fuente de energía limpia y sustentable han representado en los últimos años una alternativa importante al abastecimiento energético a partir de recursos fósiles. Entre ellas, las denominadas tecnologías fotovoltaicas (que generan electricidad a partir de la radiación solar) han despertado un creciente interés en los últimos tiempos. A la hora de ser tenida en cuenta como una solución real a la diversificación de la matriz energética nacional, la fuente de energía solar se ha topado con la dificultad (no menor) de los altos costos asociados a los paneles solares. Esta tecnología, que está basada en uniones al estado sólido (usualmente de silicio), ha sido desafiada recientemente por la tecnología de las denominadas celdas solares sensibilizadas por colorante (Dye Sensitised Solar Cells, DSSC). Estas celdas ofrecen la enorme ventaja de presentar bajos costos de producción y muestran al mismo tiempo, una serie de características interesantes que dan lugar a un potencial muy importante para un ingreso exitoso y consolidado en el mercado de las energías renovables. El objetivo de la presente propuesta es el desarrollo de nuevas celdas DSSC. Si bien estas se conocen desde hace algunos años, el reto es obtener un producto nacional a un costo razonable operando con una buena eficiencia. A nivel nacional y regional, existe una escasa capacidad de ensamblado de celdas DSSC operativas. Es por ese motivo que esta propuesta representaría también una inmejorable oportunidad para consolidar la experiencia de los grupos de investigación involucrados en la temática energética incluida en este proyecto. El desarrollo del mismo generaría a su vez recursos humanos sumamente valiosos en un área de investigación interdisciplinaria muy importante y actual.

15 horas semanales

Facultad de Química

Investigación

Integrante del Equipo

En Marcha

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: GANCHEFF, J.S. (Responsable) , SEOANE

Palabras clave: Energía

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica /

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Celdas Solares

Desarrollo y evaluación de nuevos compuestos cromóforos capaces de actuar como antena en celdas solares de pigmentos fotosensibles. (10/2012 - 10/2014)

Disponer de energía a bajo costo es un variable esencial para lograr un desarrollo socio-económico sostenido en países de economías emergentes como Uruguay. Una buena estrategia a tales efectos implica impulsar más agresivamente la diversificación de la matriz energética. Las energías renovables, que se presentan como una fuente de energía limpia y sustentable, han emergido en los últimos años como una solución importante a los problemas que implica el abastecimiento energético a partir de recursos fósiles. Entre ellas, los sistemas de generación de energía a partir de radiación solar, han despertado un enorme y creciente interés en los últimos años. Las mayores dificultades que ha encontrado esta fuente de energía para ser tenida en cuenta como una alternativa real a la diversificación energética nacional están asociadas a los altos costos de los paneles de celdas fotovoltaicas. Los mismos, que están basados en uniones al estado sólido, usualmente de silicio, están siendo desafiados por celdas denominadas de tercera generación, basadas en óxidos nanocristalinos y filmes de polímeros conductores. Éstas, conocidas como celdas solares sensibilizadas por colorante (Dye Sensitized Solar Cells, DSSC), ofrecen la enorme ventaja de bajos costos de producción y muestran características atractivas para su ingreso y consolidación en el mercado. El objetivo de la presente propuesta es el desarrollo de nuevas celdas DSSC. Si bien éstas se conocen desde hace algunos años, el gran reto es ofrecer una alternativa de bajo costo. Si se tiene en cuenta que estas celdas están pensadas para ser usadas en grandes superficies (como los ventanales de un edificio), la variable costos se torna de suma importancia en países como Uruguay. De esta manera, las celdas DSSC podrían ingresar exitosamente en el mercado uruguayo

de las energías renovables, lo cual representaría un enorme logro en la oferta energética local a mediano y largo plazo.

10 horas semanales

UDELAR

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:2

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: GANCHEFF, J.S., CERDA, M.F., ENCISO, P., CABRERIZO, F.

Palabras clave: Energía

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica /

Diseño de materiales derivados del grafeno para almacenar hidrogeno (10/2012 - 10/2012)

El gran desarrollo industrial que la humanidad experimentó durante el siglo XX incrementó significativamente su dependencia de los combustibles fósiles. La misma resulta nociva por dos aspectos: a) los combustibles fósiles son no renovables b) son contaminantes. Desde hace algunos años se ha propuesto al hidrógeno como combustible sustituto de los combustibles fósiles. Entre sus ventajas podemos destacar que su combustión genera agua y por lo tanto no contamina; además, es un recurso fácilmente obtenible. Si bien las industrias automotrices han creado varios prototipos capaces de funcionar a hidrógeno, estamos muy lejos de que su uso se vea masificado debido a un problema difícil de resolver: no se ha conseguido encontrar un material que sea capaz de almacenar reversiblemente hidrógeno en condiciones normales. 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.

40 horas semanales

UDELAR

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: IRIBARNE, F., PEREYRA, C.M.

Palabras clave: Energía

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / nanotecnología

Caracterización teórico experimental de fulerenos, nanotubos y láminas de grafito, sustituidas total o parcialmente con elementos de los grupos IIIA y IVA (05/2006 - 05/2008)

estudio de fulerenos y nanotubos sustituidos total o parcialmente con elementos de los grupos IIIA e IVA. En una primera instancia se realizarán investigaciones teóricas en estas estructuras que intentaran sumarse el trabajo experimental en materiales que se realiza en la Cátedra de Física. Esperamos encontrar nuevos materiales con propiedades químicas, eléctricas, ópticas y mecánicas mejoradas

40 horas semanales

Facultad de Química, Grupo de Nanotecnología Computacional y Química Teórica

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Equipo: R. FACCIO, H. PARDO, SUESCUN, L., MOMBROU, A.W., DENIS, PA (Responsable)

Areas de conocimiento:

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

DOCENCIA

Ingeniería Química (06/2005 - a la fecha)

Grado

Responsable

Asignaturas:

Matemáticas 03, Algebra Lineal, 4 horas, Teórico

Matemáticas 03, Algebra Lineal, 4 horas, Práctico

Matemáticas 08, Ecuaciones Diferenciales en Derivadas Parciales, 4 horas, Teórico

Matemáticas 08, Ecuaciones Diferenciales en Derivadas Parciales, 4 horas, Práctico

Matemáticas 08, Optimización, 4 horas, Práctico

Areas de conocimiento:

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

Doctorado en Química (02/1999 - 07/2004)

Doctorado

Asignaturas:

Mecánica Cuántica, 4 horas, Teórico

Mecánica Cuántica, 4 horas, Práctico

Química Teórica, 4 horas, Teórico

Modelado Molecular I, 4 horas, Práctico

Fisicoquímica Molecular Basica, 4 horas, Teórico

Fisicoquímica Molecular Basica, 4 horas, Práctico

Areas de conocimiento:

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

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ESTADOS UNIDOS

University of California at Davis, CA

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (07/2004 - 07/2005)

Postdoc ,40 horas semanales / Dedicación total

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Transition metal carbides (07/2004 - 07/2005)

Se investigaron las propiedades de varios transition metal carbides empleando metodologías multirreferencia.

40 horas semanales

Institute for Data Analysis and Visualization , Integrante del equipo

Equipo:

Areas de conocimiento:

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

CARGA HORARIA

Carga horaria de docencia: 10 horas

Carga horaria de investigación: 45 horas

Carga horaria de formación RRHH: Sin horas

Carga horaria de extensión: Sin horas

Carga horaria de gestión: 5 horas

Producción científica/tecnológica

Mi trabajo científico ha creado la infraestructura necesaria para llevar a cabo investigación en el área de la Nanotecnología computacional, habiendo construido una de las supercomputadoras más potentes de la UDELAR. En el laboratorio se desarrollan tres líneas de investigación. En total he publicado 138 artículos en revistas arbitradas, de los cuales soy único autor en 54, primer autor en 105 y corresponding author en 110. Las investigaciones realizadas han tenido alto impacto a nivel internacional, lo que se refleja en un H-index de 34 y en el hecho de que sea referee para 67 revistas de alto nivel como Nature Chemistry, Journal of the American Chemical Society, ACSNANO, Journal of Chemical Physics, Journal of Physical Chemistry A,B,C, and Chemistry, a European Journal. Desde 2015 ocupó el cargo de Editor Asociado de la revista RSC-Advances, publicada por la Royal Society of Chemistry. He evaluado proyectos para NSF (USA) y varios países más. Dentro del ámbito nacional, en el año 2009 fui único ganador del premio Caldeyro-Barcia en Química otorgado por el PEDECIBA, no existiendo menciones especiales. En la primera línea de investigación como responsable, empleamos la Química-Teórica para caracterizar pequeñas moléculas. Las investigaciones realizadas motivaron que se me invitara para escribir un review para el Journal of Sulfur Chemistry, sobre termoquímica del azufre. También es importante destacar que los datos obtenidos en el año 2005 para los radicales HSO y SOH son los valores de referencia adoptados por dos publicaciones: Bond Dissociation energies del CRC Handbook of Physics and Chemistry y las Third-Millennium Thermochemical tables compiladas por el Dr. Burcat. En otro trabajo realizado en el año 2002, obtuvimos valores para el radical HOOO, que también fueron incluidos como referencia en el Handbook CRC. En una segunda línea de investigación, empleamos la Química Teórica para diseñar receptores de distintas moléculas. Finalmente, la Nanotecnología es la tercera línea de investigación donde actué como responsable. Esta línea de investigación es pionera en la UDELAR. En efecto, soy el autor responsable del primer trabajo que ha publicado la UDELAR sobre nanotubos de carbono (2008), en una revista arbitrada; también es el caso del fullereno C60 habiéndose realizado esta publicación en el año 2008. Mis contribuciones incluyen el estudio de la química covalente y no covalente de fullerenos, grafeno y nanotubos de carbono, propiedades electrónicas de nanotubos de múltiples paredes, propiedades mecánicas de nanoestructuras y uso de nanoestructuras para almacenar hidrógeno y otros gases combustibles como metano. Recientemente, he escrito un capítulo de libro por invitación, sobre la química covalente del grafeno, para la editorial CRC Press. En 2016, por las contribuciones realizadas he sido designado como Fellow of the Royal Society of Chemistry. Finalmente, en año 2018 la Editorial Elsevier junto con la Agencia Nacional de Investigación e innovación me otorgaron el premio excelencia Elsevier 2018 en el área Química al Químico más destacado de Uruguay.

Producción bibliográfica

ARTÍCULOS PUBLICADOS

ARBITRADOS

Reduction Chemistry of Hexagonal Boron Nitride Sheets and Graphene: a Comparative Study on the Effect of Alkali Atom Doping on their Chemical Reactivity. (Completo, 2020)

DENIS, P.A. , Ullah, S., Iribarne, F

New Journal of Chemistry, v.: 44 p.:5725 - 5730, 2020

Palabras clave: Nanotecnología Computacional Química Teórica Reactividad Química 2D Materials

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 11440546

DOI: <https://doi.org/10.1039/D0NJ00414F>

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2020/nj/d0nj00414f/unauth#!divAbstract>

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus®

Theoretical characterization of hexagonal 2D Be₃N₂ monolayer (Completo, 2019)

Ullah, S., DENIS, P.A., Sato, F.

New Journal of Chemistry, v.: 43 p.:2933 - 2941, 2019

Palabras clave: Nanotecnología Computacional 2D materials

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Nanotecnología Computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 11440546

DOI: [10.1039/C8NJ05600E](https://doi.org/10.1039/C8NJ05600E)

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2019/nj/c8nj05600e#!divAbstract>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Cycloaddition reactions on epitaxial graphene (Completo, 2019)

DENIS, P.A., Pereyra Huelmo, C., Iribarne, F.

New Journal of Chemistry, v.: 43 p.:11251 - 11257, 2019

Palabras clave: Nanotecnología 2D materials Reactividad Química Química Teórica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 11440546

DOI: [10.1039/C9NJ02528F](https://doi.org/10.1039/C9NJ02528F)

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2019/nj/c9nj02528f#!divAbstract>

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Coupled Cluster Investigation of the interaction of Beryllium, Magnesium, and Calcium with Pyridine: Implications for the Adsorption on Nitrogen-Doped Graphene. (Completo, 2019)

DENIS, P.A., Ullah, Sato, F.

Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1150 p.:57 - 62, 2019

Palabras clave: Nanotecnología Computacional 2D materials

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Nanotecnología Computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 2210271X

DOI: [10.1016/j.comptc.2019.01.015](https://doi.org/10.1016/j.comptc.2019.01.015)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210271X19300180>

The corresponding author is Pablo A. Denis.

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Tunable optoelectronic properties in h-BP/h-BAs bilayers: The effect of an external electrical field (Completo, 2019)

Ullah, S., DENIS, P.A., Menezes, M.G., Sato, F.

Applied Surface Science, v.: 493 p.:308 - 319, 2019

Palabras clave: Nanotecnología Computacional 2D Materials Theoretical Chemistry

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Nanotecnología Computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01694332

DOI: [10.1016/j.apsusc.2019.07.030](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.07.030)

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433219320665>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Adsorption and diffusion of alkali-atoms (Li, Na, and K) on BeN dual doped graphene (Completo, 2019)

Ullah, S., DENIS, P.A., Sato, F.

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 119 e2590, 2019

Palabras clave: Nanotecnología Computacional Graphene

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnología Computacional
Medio de divulgación: Papel
Escrito por invitación
ISSN: 00207608
DOI: [10.1002/qua.25900](https://doi.org/10.1002/qua.25900)
<https://doi.org/10.1002/qua.25900>
Scopus® WEB OF SCIENCE™

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

Pereyra Huelmo, C., DENIS, P.A.
Journal of Physics Condensed Matter, v.: 43 435001, 2019
Palabras clave: Graphene Nanotechnology Theoretical Chemistry
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnología Computacional
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 09538984
DOI: [10.1088/1361-648X/ab2ee2](https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-648X/ab2ee2)
<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-648X/ab2ee2/meta>
The corresponding author is Pablo A. Denis.
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Monolayer boron-arsenide as a perfect anode for alkali-based batteries with large storage capacities and fast mobilities (Completo, 2019)

Ullah, S., DENIS, P.A., Sato, F
International Journal of Quantum Chemistry, v.: 119 e2597, 2019
Palabras clave: Nanotecnología computacional Energías Renovables Química Teórica
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnología Computacional
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00207608
DOI: [10.1002/qua.25975](https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/qua.25975)
<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/qua.25975>
Scopus® WEB OF SCIENCE™

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

Pereyra Huelmo, C., DENIS, P.A.
Journal of Physical Chemistry C, v.: 123 p.:23341 - 23350, 2019
Palabras clave: Nanotecnología computacional Graphene
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnología Computacional
Medio de divulgación: Papel
Escrito por invitación
ISSN: 19327447
<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcc.9b07978>
The corresponding author is Pablo A. Denis.
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Non-trivial band gaps and charge transfer in Janus-like functionalized bilayer boron arsenide (Completo, 2019)

Ullah, S., DENIS, P.A., Sato, F
Computational Materials Science, v.: 170 109186, 2019
Palabras clave: Nanotecnología Computacional 2D Materials
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Nanotecnología
Computacional
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 09270256
The corresponding author is Pablo A. Denis

On the estimation of the strength of supramolecular complexes of fullerenes (Completo, 2019)

DENIS, P.A.

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 119 2 e2567, 2019

Palabras clave: Química Teórica Química Supramolecular Fullerenos

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Escrito por invitación

ISSN: 00207608

DOI: [10.1002/qua.25670](https://doi.org/10.1002/qua.25670)

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/qua.25670>

Artículo escrito por invitación para el Special Issue: Computational and Theoretical Chemistry in Latin America. Unico químico teórico uruguayo invitado para el Issue

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Comparative Study of the Chemical Reactivity of Graphene and Boron Nitride (Completo, 2019)

DENIS, P.A., Iribarne, F

Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1164 112538, 2019

Palabras clave: Nanotecnología computacional 2D materials Funcionalización de Nanoestructuras

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 2210271X

DOI: [10.1016/j.comptc.2019.112538](https://doi.org/10.1016/j.comptc.2019.112538)

<https://doi.org/10.1016/j.comptc.2019.112538>

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Theoretical Investigation of various aspects of Two Dimensional holey Boroxine, B3O3 (Completo, 2019)

Ullah, S., DENIS, P.A., Sato, F

RSC Advances, v.: 9 InPress, 2019

Palabras clave: Nanotecnología Computacional

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 20462069

The corresponding author is Pablo A. Denis.

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Hexagonal boron phosphide as a potential anode nominee for alkali-based batteries: A multi-flavor DFT study (Completo, 2019)

Ullah, S., DENIS, P.A., Sato, F.

Applied Surface Science, v.: 471 p.:134 - 141, 2019

Palabras clave: Nanotecnología 2D materials Baterías

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01694332

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2018.12.020>

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433218333488>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

First-principles study of the dual doped graphene: Towards the promising anode materials for Li/Na-ion batteries (Completo, 2018)

Ullah, S., DENIS, P.A., Sato, F

New Journal of Chemistry, v.: 42 - 10842, 2018

Palabras clave: Nanotecnología Anode Materials Energía Baterías
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnología Computacional
Medio de divulgación: Papel
Lugar de publicación: 10851
ISSN: 11440546
<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2018/nj/c8nj01098f/unauth#!divAbstract>
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Adsorption of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons and Inversion Barriers of Curved Conjugated Systems inside the Molecular Cage ExCage6+. (Completo, 2018)

DENIS, P.A. , IRIBARNE
International Journal of Quantum Chemistry, v.: 118 p.:25539 2018
Palabras clave: Química Supramolecular
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Supramolecular
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00207608
DOI: <https://doi.org/10.1002/qua.25539>
<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/qua.25539>
The corresponding author is Pablo A. Denis.
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Adsorption of Sodium on Doped Graphene: A vdW-DFT study (Completo, 2018)

Ullah, S, DENIS, P.A. , Sato, F
Current Graphene Science, v.: 2 p.:35 - 44, 2018
Palabras clave: Nanotecnología Energía Baterías Anode materials
Areas 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 / Nanotecnología Computacional
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 2452-2732
DOI: [10.2174/2452273202666180517101215](https://doi.org/10.2174/2452273202666180517101215)
<http://www.eurekaselect.com/162241/article>

A New Approach to Accomplish the Covalent Functionalization of Boron Nitride Nanosheets: Cycloaddition Reactions (Completo, 2018)

DENIS, P.A. , Iribarne, F
The Journal of Physical Chemistry C, v.: 122 p.:18583 - 18587, 2018
Palabras clave: Nanotecnología
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnología Computacional
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 1932-7447
DOI: [10.1021/acs.jpcc.8b05907](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b05907)
<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.8b05907>
The correspondign author is Pablo A. Denis

Coupled Cluster and Density Functional Investigation of the Neutral Sodium-Benzene and Potassium-Benzene Complexes (Completo, 2018)

Ullah, S. , DENIS, P.A. , Sato, F.
Chemical Physics Letters, v.: 706 p.:343 - 347, 2018
Palabras clave: Benchmark calculations Nanotechnology Coupled Cluster Theory Supramolecular Chemistry
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Nanotecnología Computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2018.06.0>

<https://doi.org/10.1016/j.cplett.2018.06.028>

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus® WEB OF SCIENCE™

An effective tridental molecular clip for fullerenes (Completo, 2018)

DENIS, P.A., KRAMER, M., LEE, C., YANNEY, M

Journal of Physical Organic Chemistry, v.: 31 1 e3727, 2018

Palabras clave: Química Supramolecular

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Supramolecular

ISSN: 08943230

DOI: <https://doi.org/10.1002/poc.3727>

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/poc.3727/full>

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Theoretical Characterization of Supramolecular Complexes Formed by Fullerenes and Dimeric Porphyrins. (Completo, 2018)

DENIS, P.A.

New Journal of Chemistry, v.: 9 InPre, 2018

Palabras clave: Química Supramolecular Fullerenos Density Functional Theory Química

Computacional

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Nanotecnología

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 11440546

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Hydrogenation and fluorination of 2D boron phosphide and boron arsenide: A DFT investigation (Completo, 2018)

Ullah, S., DENIS, P.A., Sato, F.

ACS Omega, v.: 3 p.:16416 - 16423, 2018

Palabras clave: Nanotecnología computacional 2D materials

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Nanotecnología Computacional

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Estados Unidos

Escrito por invitación

ISSN: 24701343

<http://doi.org/10.1021/acsomega.8b02605>

The corresponding author is Pablo A. Denis. Article written by invitation, publishing charges were not paid.

Scopus®

Unusual Enhancement of the Adsorption Energies of Sodium and Potassium in Sulfur/Nitrogen and Silicon/Boron doped of graphene (Completo, 2018)

Ullah, S., DENIS, P.A., Sato, F.

ACS Omega, v.: 3 p.:15821 - 15828, 2018

Palabras clave: Nanotecnología Graphene Energías renovables baterías Química Teórica

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Nanotecnología Computacional

Medio de divulgación: Internet

Escrito por invitación

ISSN: 24701343

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsomega.8b02500>

Lithium adsorption on heteroatom mono and dual doped graphene (Completo, 2017)

DENIS, P.A.
Chemical Physics Letters, 672 , p.:70 - 79, 2017
Palabras clave: graphene
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / nanotecnología
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00092614
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261417300581>
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Diels-Alder Reactions onto Fluorinated and Hydrogenated Graphene (Completo, 2017)

DENIS, P.A.
Chemical Physics Letters, v.: 684 p.:79 - 85, 2017
Palabras clave: nanotecnología
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnología
ISSN: 00092614
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2017.06.034>
<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0009261417305699>
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Are [6+4] Cycloadditions onto Graphene Possible? (Completo, 2017)

DENIS, P.A.
Chemistry Select, 2 , p.:9620 - 9623, 2017
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnología
ISSN: 23656549

Triple Doped Monolayer Graphene with Boron, Nitrogen, Aluminum, Silicon, Phosphorus and Sulfur (Completo, 2017)

ULLAH, S., DENIS, P.A., SATO, F
ChemPhysChem, v.: 18 18 14, p.:1864 - 1873, 2017
Palabras clave: nanotecnología
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / nanotecnología
ISSN: 14394235
<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cphc.201700278/full>
The corresponding author is Pablo A. Denis
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Cycloaddition Reactions Between Graphene and Fluorinated Maleimide (Completo, 2017)

DENIS, P.A., IRIBARNE, F
Journal of Physical Chemistry C, 121 , p.:13218 - 132222, 2017
Palabras clave: nanotecnología
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnología
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 19327447
The corresponding author is Pablo A. Denis
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Beryllium doped graphene as an efficient anode material for Lithium-Ion batteries with significantly huge capacity: A DFT study (Completo, 2017)

ULLAH, S., DENIS, P.A., SATO, F
Applied Materials Today, 9, p.:333 - 340, 2017
Palabras clave: nanotecnologia
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnologia
ISSN: 23529407
<http://dx.doi.org/10.1016/j.apmt.2017.08.013>

On the Band Gaps and Effective Masses of Mono and Dual Doped Monolayer Graphene (Completo, 2017)

DENIS, P.A., PEREYRA, C.M., IRIBARNE, F
Computational Materials Science, 137, p.:20 - 29, 2017
Palabras clave: nanotecnologia
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / nanotecnologia
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 09270256
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025617302367>
The corresponding author is Pablo A. Denis
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Band Gap Opening in Bilayer Graphene by the Simultaneous Adsorption of Electron Donating and Electron Acceptor Molecules. (Completo, 2017)

DENIS, P.A.
Computational and Theoretical Chemistry, 1120, p.:96 - 101, 2017
Palabras clave: nanotecnologia
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnologia
ISSN: 2210271X
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210271X17304437>
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Structure and Chemical Reactivity of Lithium Doped Graphene on Hydrogen Saturated Silicon Carbide (Completo, 2017)

DENIS, P.A.
Journal of Materials Science, v.: 52 p.:1348 - 1356, 2017
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / nanotecnologia
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00222461
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Dual Doped Monolayer and Bilayer Graphene: The Case of 4p and 2p elements (Completo, 2016)

DENIS, P.A., IRIBARNE, F
Chemical Physics Letters, 658, p.:152 - 157, 2016
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / nanotecnologia
ISSN: 00092614
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261416304274>
The corresponding author is Pablo A. Denis
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Heteroatom Promoted Cycloadditions for Graphene (Completo, 2016)

DENIS, P.A.
Chemistry Select, 1, p.:5497 - 5500, 2016
Palabras clave: nanotecnologia
Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / nanotecnología
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 23656549

Porphyrins Bearing Corannulene Pincers: Outstanding Fullerene Receptors (Completo, 2016)

DENIS, P.A. , YANNEY, M
RSC Advances, v.: 6 p.:50978 - 50984, 2016
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / nanotecnología
Medio de divulgación: Internet
ISSN: 20462069
<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2016/ra/c6ra11482b#!divAbstract>
The corresponding author is Pablo A. Denis.
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Effect of Dopant Nature in the Reactivity, Interlayer Bonding and Electronic Properties of Dual Doped Bilayer Graphene (Completo, 2016)

DENIS, P.A.
Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 18 18 , p.:24693 - 24703, 2016
Palabras clave: nanotecnología
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / graphene
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 14639076
The corresponding author is Pablo A. Denis.
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Mono and Dual Doped Monolayer Graphene with Aluminum, Silicon, Phosphorus and Sulfur (Completo, 2016)

DENIS, P.A.
Computational and Theoretical Chemistry, 1097 , p.:40 - 47, 2016
Palabras clave: nanotecnología
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / nanotecnología
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 2210271X
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210271X16304078>
Scopus® WEB OF SCIENCE™

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

DENIS, P.A. , MARTINS A.S. , PEREYRA, C.M.
Journal of Physical Chemistry C, v.: 120 p.:7103 - 7112, 2016
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / nanotecnología
ISSN: 19327447
<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.5b11709>
The correspondign author is Pablo A. Denis
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Bond dissociation energies and enthalpies of formation of flavonoids: a G4 and M06-2X investigation (Completo, 2016)

ALVAREDA, E. , DENIS, P.A. , IRIBARNE, F , PAULINO, M.
Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1091 p.:18 - 23, 2016
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / QUuimica Computacional
ISSN: 2210271X

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210271X16302274>

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Organic Nanotubes and Belt Shaped Molecules Based on Norbornadiene Tethers (Completo, 2016)

DENIS, P.A., YANNEY, M

New Journal of Chemistry, 40, p.:202 - 208, 2016

Palabras clave: nanotecnologia

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / nanotecnologia

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 11440546

<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2016/nj/c5nj02255j/#!divAbstract>

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Strong N-doped Graphene: The Case of 4-(1,3-dimethyl-2,3-dihydro-1 H-benzimidazol-2-yl)phenyl)dimethylamine (N-DMBI) (Completo, 2015)

DENIS, P.A., IRIBARNE, F

Journal of Physical Chemistry C, v.: 119 p.:15103 - 15111, 2015

Palabras clave: graphene

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / nanotecnologia

ISSN: 19327447

<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.5b01683>

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Fluorinated silicene: a powerful system to adjust the electronic structure of silicene (Completo, 2015)

DENIS, P.A.

Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 17 p.:5393 - 5402, 2015

Palabras clave: nanotecnologia

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / nanotecnologia

ISSN: 14639076

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Structural Characterization and Chemical Reactivity of Dual Doped Graphene (Completo, 2015)

DENIS, P.A., PEREYRA, C.M.

Carbon, v.: 87 p.:106 - 115, 2015

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / nanotecnologia

ISSN: 00086223

Structural Characterization and Chemical Reactivity of Dual Doped Graphene

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Bonding and singlet-triplet gap of silicon trimer: Effects of protonation and attachment of alkali metal cations (Completo, 2015)

TAM, N.M., HANG, T.D., PHAM, H.T., NGUYEN, H.T., PHAM-HO, M.P., DENIS, P.A., NGUYEN, M.T.

Journal of Computational Chemistry, v.: 36 p.:805 - 815, 2015

Palabras clave: nanotecnologia

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / nanotecnologia

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01928651

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jcc.23856/full>

Hydrogen Storage in Doped Biphenylene Based Sheets (Completo, 2015)

DENIS, P.A.

Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1062 p.:30 - 35, 2015

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 2210271X

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210271X15001188>

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Subphthalocyanines hydrogen bonded capsules featuring norbornadiene tethers: promising fullerene receptors (Completo, 2015)

DENIS, P.A., YANNEY, M

Chemical Physics Letters, 640, p.:140 - 146, 2015

Palabras clave: Química Supramolecular

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261415007757>

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Buckycatcher polymer vs. fullerene-buckycatcher complex: which is stronger? (Completo, 2015)

DENIS, P.A., IRIBARNE, F

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 115 p.:1668 - 1672, 2015

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00207608

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Theoretical investigation of the 9,10-bis(1,3-dithiol-2-ylidene)-9,10-dihydroanthracene (exTTF) dimer (Completo, 2015)

DENIS, P.A., IRIBARNE, F

Structural Chemistry, v.: 26 p.:171 - 176, 2015

Palabras clave: Química Supramolecular

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Supramolecular

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10400400

DOI: [10.1007/s11224-014-0480-9](https://doi.org/10.1007/s11224-014-0480-9)

<http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs11224-014-0480-9>

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Relative Affinity of Bambus[6]uril Towards Halide Ions: a DFT/GIAO Approach in the Gas Phase, and in the Presence of the Solvent Employing Discrete and Discrete-Continuum Models (Completo, 2015)

DENIS, P.A.

Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1064 p.:35 - 44, 2015

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Supramolecular

ISSN: 2210271X

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Pristine Graphene Based Catalysis: Significant Reduction of the Inversion Barriers of Adsorbed and Confined Corannulene, Cumanene and Dibenzo[a,g]corannulene (Completo, 2015)

DENIS, P.A.

Journal of Physical Chemistry A, v.: 119 p.:5770 - 5777, 2015

Palabras clave: graphene

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / nanotecnología

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10895639

Scopus® WEB OF SCIENCE®

Theoretical investigation on the interaction between beryllium, magnesium and calcium with benzene, coronene, circumcoronene and graphene (Completo, 2014)

DENIS, P.A. , IRIBARNE, F

Chemical Physics, v.: 430 p.:1 - 6, 2014

Palabras clave: Nanotecnología Computacional

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / nanotecnología

ISSN: 03010104

DOI: [10.1016/j.chemphys.2013.11.013](https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2013.11.013)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301010413004369>

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus® WEB OF SCIENCE®

Stability and Electronic Properties of Biphenylene Based Functionalized Nanoribbons and Sheets (Completo, 2014)

DENIS, P.A.

Journal of Physical Chemistry C, v.: 118 p.:24796 - 24982, 2014

Palabras clave: nanotecnología

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / nanotecnología

ISSN: 19327447

DOI: [10.1021/jp5069895](https://doi.org/10.1021/jp5069895)

pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp5069895

Scopus® WEB OF SCIENCE®

Design and characterization of two strong fullerene receptors based on ball-socket interactions (Completo, 2014)

DENIS, P.A.

Chemical Physics Letters, v.: 591 p.:323 - 327, 2014

Palabras clave: Nanotecnología Computacional

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / nanotecnología

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

Scopus® WEB OF SCIENCE®

Coupled cluster investigation on the thermochemistry of dimethyl sulfide, dimethyl disulfide and their dissociation products: the problem of the enthalpy of formation of atomic sulfur. (Completo, 2014)

DENIS, P.A.

Molecular Physics, 112 , p.:1167 - 1173, 2014

Palabras clave: termoquímica, benchmark calculations

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica /

ISSN: 00268976

<http://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/00268976.2013.837536#.UydAeYU5oV4>

Scopus® WEB OF SCIENCE®

Coupled Cluster and Density Functional Investigation of the hydrogen Bond Between Halides, Paraffines, Olefins and Alkynes (Completo, 2014)

DENIS, P.A. , GANCHEFF, J.S.

Structural Chemistry, v.: 25 3 , p.:903 - 908, 2014

Palabras clave: química supramolecular, receptores

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Supramolecular

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10400400

<http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs11224-013-0361-7>

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Theoretical Characterization of Sulfur and Nitrogen Dual-doped Graphene (Completo, 2014)

DENIS, P.A. , PEREYRA, C.M., IRIBARNE, F

Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1049 p.:13 - 19, 2014

Palabras clave: Nanotecnología Computacional

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 2210271X

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210271X14003788>

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus® WEB OF SCIENCE™

A theoretical study on the interaction between well curved conjugated systems and fullerenes smaller than C60 or larger than C70 (Completo, 2014)

DENIS, P.A.

Journal of Physical Organic Chemistry, v.: 27 p.:918 - 925, 2014

Palabras clave: Química supramolecular, receptores, nanotecnología

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Supramolecular

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 08943230

Scopus® WEB OF SCIENCE™

New Trends Along Hydrogen Polyoxides: Unusually Long Oxygen-Oxygen Bonds in H2O6 and H2O7. (Completo, 2014)

DENIS, P.A. , C. PEREYRA HUELMO

Molecular Physics, v.: 112 p.:3047 - 3056, 2014

Palabras clave: Química Inorgánica

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Polyoxidos

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00268976

[http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00268976.2014.928385?](http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00268976.2014.928385?journalCode=tmph20#preview)

[journalCode=tmph20#preview](http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00268976.2014.928385?journalCode=tmph20#preview)

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus® WEB OF SCIENCE™

A comparative study on the performance of suphthalocyanines and corannulene derivatives as receptors for fullerenes (Completo, 2014)

DENIS, P.A.

New Journal of Chemistry, v.: 2014 38 , p.:5608 - 5616, 2014

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Supramolecular

ISSN: 11440546

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Chemical Reactivity and Band Gap Opening of Graphene Doped with Gallium, Germanium, Arsenic and Selenium (Completo, 2014)

DENIS, P.A.

ChemPhysChem, v.: 15 p.:3994 - 4000, 2014

Palabras clave: graphene

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / nanotecnología

ISSN: 14394235

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cphc.201402608/abstract>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Concentration dependence of the band gaps of Phosphorus and Sulfur Doped Graphene. (Completo, 2013)

DENIS, P.A.

Computational Materials Science, v.: 67 p.:203 - 206, 2013

Palabras clave: Nanotecnología Computacional

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Nanotecnología computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 09270256

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Theoretical characterization of existent and new fullerene receptors (Completo, 2013)

DENIS, P.A.

RSC Advances, v.: 3 47 , p.:25296 - 25305, 2013

Palabras clave: Nanotecnología Computacional

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / nanotecnología, química supramolecular

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 20462069

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Comparative Study of Defect Reactivity in Graphene (Completo, 2013)

DENIS, P.A. , IRIBARNE, F

Journal of Physical Chemistry C, v.: 117 19048 19055, 2013

Palabras clave: Nanotecnología Computacional

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Nanotecnología computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 19327447

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp4061945>

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

C2V or C6V: Which is the Most Stable Structure of the Benzene-Lithium Complex? (Completo, 2013)

DENIS, P.A. , IRIBARNE, F

Chemical Physics Letters, v.: 573 p.:15 - 18, 2013

Palabras clave: Nanotecnología Computacional

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Nanotecnología computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

<http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2013.04.009>

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Coupled Cluster investigation of the axial and equatorial isomers of pyrrolidine (Completo, 2013)

DENIS, P.A.
Molecular Physics, v.: 111 p.:9 - 17, 2013
Palabras clave: química computacional
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / química computacional
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00268976
Scopus WEB OF SCIENCE™

Heat of Formation and Thermochemical Parameters of Silole (Completo, 2013)

DENIS, P.A. , NGUYEN, M.T. , NGUYEN, M.T.
Chemical Physics Letters, v.: 588 p.:17 - 21, 2013
Palabras clave: termoquímica, benchmark calculations
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Termoquímica, Benchmark Calculations
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00092614
The corresponding authors are Pablo A. Denis and Minh Tho Nguyen
Scopus WEB OF SCIENCE™

On the encapsulation of halide anions by bambus[6]juril (Completo, 2013)

DENIS, P.A. , GANCHEFF, J.S.
Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1023 p.:5 - 9, 2013
Palabras clave: química supramolecular, receptores
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química
Supramolecular
ISSN: 2210271X
<http://dx.doi.org/10.1016/j.comptc.2013.08.023>
The corresponding author is Pablo A. Denis
Scopus WEB OF SCIENCE™

Phycocyanin as Potential Natural Dye for Its Use in Photovoltaic Cells (Completo, 2013)

ENCISO, P. , CABRERIZO, F. , GANCHEFF, J.S. , DENIS, P.A. , CERDA, M.F.
Journal of Applied Solution Chemistry and Modeling, v.: 2 p.:225 - 233, 2013
Palabras clave: Energia Solar
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / química
inorganica
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 19295030
https://www.researchgate.net/profile/Jorge_Gancheff/publication/258991386_Phycocyanin_as_Potenti

Chemical Reactivity of Electron Doped and Hole Doped Graphene (Completo, 2013)

DENIS, P.A.
Journal of Physical Chemistry C, v.: 117 p.:3895 - 3902, 2013
Palabras clave: Nanotecnología Computacional
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnología computacional
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 19327447
<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp306544m>
Scopus WEB OF SCIENCE™

On the Addition of Aryl Radicals to Graphene (Completo, 2013)

DENIS, P.A.
ChemPhysChem, v.: 14 p.:3271 - 3277, 2013
Palabras clave: Nanotecnología Computacional
Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 14394235

Scopus[®] WEB OF SCIENCE™

Theoretical characterization of hydrogen pentoxide, H₂O₅ (Completo, 2013)

DENIS, P.A.

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 113 19 , p.:2206 - 2212, 2013

Palabras clave: Química Atmosferica, Química Inorganica

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00207608

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/qua.24432/abstract>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE™

Organic Chemistry of Graphene: the Diels-Alder Reaction (Completo, 2013)

DENIS, P.A.

Chemistry - A European Journal (E), v.: 19 p.:15719 - 15725, 2013

Palabras clave: Nanotecnologia Computacional

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 15213765

Scopus[®]

Cooperative behavior in functionalized graphene: explaining the occurrence of 1,3 cycloaddition of azomethine ylides onto graphene (Completo, 2012)

DENIS, P.A. , IRIBARNE, F

Chemical Physics Letters, v.: 550 p.:111 - 117, 2012

Palabras clave: Nanotecnologia Computacional

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

<http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2012.08.062>

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus[®] WEB OF SCIENCE™

On the Interaction Between Alkyl Radicals and Single Wall Carbon Nanotubes (Completo, 2012)

DENIS, P.A.

Journal of Computational Chemistry, v.: 33 p.:1511 - 1516, 2012

Palabras clave: Nanotecnologia Computacional

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01928651

The corresponding author is Pablo A .Denis

Scopus[®] WEB OF SCIENCE™

A First Principles Study on the Interaction between Alkyl Radicals and Graphene (Completo, 2012)

DENIS, P.A. , IRIBARNE, F

Chemistry-A European Journal, v.: 18 p.:7568 - 7574, 2012

Palabras clave: Nanotecnologia Computacional

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 09476539

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Chemical Reactivity of Lithium Doped Fullerenes (Completo, 2012)

DENIS, P.A.

Journal of Physical Organic Chemistry, v.: 25 p.:322 - 326, 2012

Palabras clave: Nanotecnología Computacional

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / nanotecnología

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 08943230

Scopus® WEB OF SCIENCE™

[2+2] Cycloadditions onto Graphene (Completo, 2012)

DENIS, P.A. , IRIBARNE, F

Journal of Materials Chemistry, v.: 22 12 , p.:5470 - 5477, 2012

Palabras clave: Nanotecnología Computacional

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / nanotecnología

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 09599428

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus® WEB OF SCIENCE™

How is the stacking interaction of bilayer graphene affected by the presence of defects? (Completo, 2012)

DENIS, P.A. , R. FACCIO , IRIBARNE, F

Computational and Theoretical Chemistry, v.: 995 p.:1 - 7, 2012

Palabras clave: Nanotecnología Computacional

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Nanotecnología computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 2210271X

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Solution Phase Photolysis of 1,2-Dithiane Alone and with Single-Walled Carbon Nanotubes (Completo, 2012)

ENGEL, P.S. , GUDIMETLA , GANCHEFF, J.S. , DENIS, P.A.

Journal of Physical Chemistry A, v.: 116 p.:8345 - 8351, 2012

Palabras clave: Nanotecnología Computacional

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Nanotecnología computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10895639

The correspondign authors are Pablo A. Denis and Paul S. Engel

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Monolayer and Bilayer Graphene Functionalized with Nitrene Radicals (Completo, 2011)

DENIS, P.A. , IRIBARNE, F

Journal of Physical Chemistry C, v.: 115 p.:195 - 203, 2011

Palabras clave: nanotecnología, dft, nanotubos, graphene

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Nanotecnología computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 19327447

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Theoretical Investigation of the Stacking Interactions between Curved Conjugated Systems and their Interaction with Fullerenes (Completo, 2011)

DENIS, P.A.

Chemical Physics Letters, v.: 516 p.:82 - 87, 2011

Palabras clave: graphene nanotecnologia computacional

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / nanotecnologia

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

<http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2011.09.058>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Addition of Sulfur Radicals to Fullerenes (Completo, 2011)

DENIS, P.A. , IRIBARNE, F

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 111 15 , p.:4266 - 4275, 2011

Palabras clave: nanotecnologia, dft, nanotubos, graphene

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Nanotecnología computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00207608

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Tuning the Electronic Properties of Doped Bilayer Graphene with Small Structural Changes (Completo, 2011)

DENIS, P.A.

Computational and Theoretical Chemistry, v.: 974 p.:21 - 25, 2011

Palabras clave: graphene nanotecnologia computacional

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / nanotecnologia

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 2210271X

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Coupled Cluster, B2PLYP and M06-2X Investigation of the Thermochemistry of Five Membered Nitrogen Containing Heterocycles, Furan and Thiophene (Completo, 2011)

DENIS, P.A.

Theoretical Chemistry accounts (Print), v.: 129 p.:219 - 227, 2011

Palabras clave: Benchmark calculations

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Coupled Cluster

Theory

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 1432881X

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Theoretical Investigation of Carbon Sulfur Triple bonds (Completo, 2011)

DENIS, P.A. , IRIBARNE, F

Chemistry-A European Journal, v.: 17 p.:1979 - 1987, 2011

Palabras clave: quimica general, carbono, azufre, dft

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química General, Bond dissociation energies

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 09476539

The corresponding author is Pablo A. Denis. The impact factor of the Journal is 5.4

Scopus® WEB OF SCIENCE™

On the Applicability of Cluster Models to Study the Chemical Reactivity of Carbon Nanotubes (Completo, 2011)

DENIS, P.A. , IRIBARNE, F

Journal of Computational Chemistry, v.: 32 11 , p.:2397 - 2403, 2011

Palabras clave: Nanotecnología, nanotubos de carbono, dft

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / nanotecnología

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01928651

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Time-Dependent Density Functional Theory Investigation of the Electronic Spectra of Hexanuclear Chalcogenide Re(III) Clusters (Completo, 2011)

GANCHEFF, J.S. , DENIS, P.A.

Journal of Physical Chemistry A, v.: 115 p.:211 - 218, 2011

Palabras clave: Electronic Spectra

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Espectroscopia

UV de complejos metálicos

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10895639

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Improving the Chemical Reactivity of Single Wall Carbon Nanotubes with Lithium Doping (Completo, 2011)

DENIS, P.A.

Journal of Physical Chemistry C, v.: 115 41 , p.:20282 - 20288, 2011

Palabras clave: Nanotecnología computacional

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / nanotecnología

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 19327447

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Chemical Reactivity of Lithium Doped Monolayer and Bilayer Graphene (Completo, 2011)

DENIS, P.A.

Journal of Physical Chemistry C, v.: 115 27 , p.:13392 - 13398, 2011

Palabras clave: Nanotecnología Computacional

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / nanotecnología

ISSN: 19327447

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

When non Covalent Interactions are Stronger Than Covalent Bonds: Bilayer Graphene Doped with Second-Row atoms, Aluminum, Silicon, Phosphorus and Sulfur (Completo, 2011)

DENIS, P.A.

Chemical Physics Letters, v.: 508 p.:95 - 101, 2011

Palabras clave: nanotecnología, graphene, DFT

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / nanotecnología

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

<http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2011.04.018>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Structural and theoretical studies of (E,E)-benzaldehyde azine and its rhenium(IV) complex (Completo, 2010)

PINTOS, V , CUEVAS, A , ONETO, S , SEOANE, G , DENIS, P.A. , GANCHEFF, J.S. , R. FACCIO ,

MOMBRU, A.W. , KREMER, C

Journal of Molecular Structure, v.: 963 1 , p.:9 - 15, 2010

Palabras clave: Complejos de Renio

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Complejos Metálicos

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00222860

Scopus® WEB OF SCIENCE™

On the Enthalpy of Formation of Thiophene (Completo, 2010)

DENIS, P.A.

Theoretical Chemistry accounts (Print), v.: 127 p.:621 - 626, 2010

Palabras clave: termoquímica benchmark calculations

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Benchmark Calculations, Coupled Clusters

ISSN: 1432881X

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Thiophene Adsorption on Single Wall Carbon Nanotubes and Graphene (Completo, 2010)

DENIS, P.A. , IRIBARNE, F

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 957 p.:114 - 119, 2010

Palabras clave: nanotecnología, dft, nanotubos, graphene

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

doi:10.1016/j.theochem.2010.07.020

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Band Gap Opening of Monolayer and Bilayer Graphene Doped with Aluminium, Silicon, Phosphorus, and Sulfur. (Completo, 2010) Trabajo relevante

DENIS, P.A.

Chemical Physics Letters, v.: 492 p.:251 - 257, 2010

Palabras clave: nanotecnología, grafeno

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

<http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2010.04.038>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Theoretical Characterization of the SSO, cyclic SOS and SOS isomers (Completo, 2010)

DENIS, P.A.

Molecular Physics, v.: 108 2 , p.:171 - 179, 2010

Palabras clave: Química Computacional, benchmark calculations

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Coupled Clusters, Benchmark Calculations

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00268976

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Electronic Spectra of Oxocomplexes of Re(V) with Thiolato Ligands (Completo, 2010)

GANCHEFF, J.S. , DENIS, P.A. , HAHN, F.E.

Spectrochimica Acta A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, v.: 76 p.:348 - 355, 2010

Palabras clave: Química Inorgánica, Complejos de Renio

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Complejos de

Renio
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 05848539

The 1,3 dipolar cycloaddition of Azomethine Ylides to graphene, single wall carbon nanotubes and C60 (Completo, 2010)

DENIS, P.A. , IRIBARNE, F
International Journal of Quantum Chemistry, v.: 110 p.:1764 - 1771, 2010
Palabras clave: nanotecnología, DFT, grafeno
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnología Computacional
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00207608
The corresponding author is Pablo A. Denis
[Scopus](#) [WEB OF SCIENCE](#)

Assessment of Density Functional Methods for the Study of Vanadium and Rhenium Complexes with Thiolato Ligands (Completo, 2010)

GANCHEFF, J.S. , DENIS, P.A. , HAHN, F.E.
Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 940 p.:1 - 9, 2010
Palabras clave: Complejos de Renio
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Complejos
Metálicos
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 01661280
[Scopus](#) [WEB OF SCIENCE](#)

Theoretical investigation of ionized HSO and SOH (Completo, 2010)

DENIS, P.A.
Molecular Physics, v.: 108 p.:1739 - 1747, 2010
Palabras clave: Química Teórica, Química Atmosférica,
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Coupled Clusters, Benchmark Calculations
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00268976
[Scopus](#) [WEB OF SCIENCE](#)

Labeling the Defects of Carbon Nanotubes with Thiol Groups (Completo, 2010)

DENIS, P.A. , GANCHEFF, J.S.
Journal of Materials Science, v.: 45 4 , p.:1039 - 1045, 2010
Palabras clave: nanotecnología
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Nanotecnología
Computacional
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00222461
The corresponding author is Pablo A. Denis
[Scopus](#) [WEB OF SCIENCE](#)

Is it possible to dope single wall carbon nanotubes and graphene with Sulfur (Completo, 2009) [Trabajo relevante](#)

DENIS, P.A. , R. FACCIO , MOMBRU, A.W.
ChemPhysChem, v.: 10 p.:715 - 722, 2009
Palabras clave: Nanotecnología graphene nanotubos
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnología Computacional
Medio de divulgación: Papel
Lugar de publicación: Alemania

ISSN: 14394235
www3.interscience.wiley.com/journal/72514732/home
The corresponding author is Pablo A. Denis
Scopus® WEB OF SCIENCE™

On the vibrational spectra of HSO and SOH (Completo, 2009)

DENIS, P.A.
Spectrochimica Acta A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, v.: 72 p.:720 - 725, 2009
Palabras clave: química atmosférica, espectroscopia
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica Química Atmosférica
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 05848539

Theoretical investigation of the stability, electronic and magnetic properties of thiolated single wall carbon nanotubes (Completo, 2009)

DENIS, P.A.
International Journal of Quantum Chemistry, v.: 109 p.:772 - 781, 2009
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / nanotecnología
Lugar de publicación: USA
ISSN: 00207608
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Mechanical properties of Graphene Nanoribbons (Completo, 2009)

R. FACCIO, DENIS, P.A., H. PARDO, GOYENOLA, C., MOMBRU, A.W.
Journal of Physics Condensed Matter, v.: 21 p.:285304 2009
Palabras clave: nanotecnología
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnología Computacional
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 09538984
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Hydrogenated Double Wall Carbon Nanotubes (Completo, 2009)

DENIS, P.A., IRIBARNE, F., R. FACCIO
Journal of Chemical Physics, v.: 130 194704, 2009
Palabras clave: nanotecnología
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Nanotecnología Computacional
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00219606
The corresponding author is Pablo A. Denis
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Thermodynamic study of proton transfer reactions of Re(V) trans-dioxocomplexes in aqueous solution (Completo, 2009)

GANCHEFF, J.S., KREMER, C., DENIS, P.A., GIORGI, C., BIANCHI, CACHAU, R
Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions, v.: 39 p.:8257 - 8268, 2009
Palabras clave: Química Inorgánica Complejos DFT
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Complejos de
Renio, Métodos de solvatación, DFT, PCM
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 03009246

Density functional investigation of thioepoxidated and thiolated graphene (Completo, 2009)

DENIS, P.A.

Journal of Physical Chemistry C, v.: 113 p.:5612 - 5619, 2009

Palabras clave: nanotecnología graphene DFT

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 19327447

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Theoretical characterization of hydrogen polyoxides: HOOH, HOOOH, HOOOOH and HOOO (Completo, 2009) Trabajo relevante

DENIS, P.A. , ORNELLAS, F.R.

Journal of Physical Chemistry A, v.: 113 p.:499 - 506, 2009

Palabras clave: Química Atmosférica, termoquímica

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: USA

ISSN: 10895639

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

On the hydrogen addition to graphene (Completo, 2009)

DENIS, P.A. , IRIBARNE, F

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 907 p.:93 - 103, 2009

Palabras clave: nanotecnología, DFT, grafeno

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

The corresponding author is Pablo A. Denis

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Spin contamination in XOO radicals X = F, Cl, Br, HO: how is the investigation of the HOOO radical affected (Completo, 2008)

DENIS, P.A. , F.R. ORNELLAS

Chemical Physics Letters, v.: 464 p.:150 - 154, 2008

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Coupled Cluster Theory, Química Atmosférica

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: In Press

ISSN: 00092614

<http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2008.09.025>

The corresponding author is Pablo A. Denis.

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Induced magnetism by single carbon vacancies in a 3-D graphitic network (Completo, 2008)

R. FACCIO , H. PARDO , DENIS, P.A. , R. YOSHIKAWA OEIRAS, F. M. ARAÚJO-MOREIRA , M. VERÍSSIMO-ALVES , A. W. MOMBRÚ

Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics, v.: 77 p.:35416 2008

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: USA

ISSN: 01631829

prb.aps.org

Theoretical characterization of Thioepoxidated Single Wall Carbon Nanotubes (Completo, 2008)

DENIS, P.A., R. FACCIO

Chemical Physics Letters, v.: 460 p.:486 - 491, 2008

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

<http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2008.06.031>

Es el primer artículo sobre nanotubos de carbono que publica la UDELAR en su historia. The corresponding author is Dr. Pablo A. Denis

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Methane adsorption inside and outside pristine and N-doped Single Wall Carbon Nanotubes (Completo, 2008)

DENIS, P.A.

Chemical Physics, v.: 353 p.:79 - 86, 2008

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 03010104

DOI information: 10.1016/j.chemphys.2008.07.024

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Theoretical Investigation of Nitrogen Disubstituted Corannulenes (Completo, 2008)

DENIS, P.A.

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 865 p.:8 - 13, 2008

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Theoretical Characterization of the HSOH, H₂SO and H₂OS isomers (Completo, 2008)

DENIS, P.A.

Molecular Physics, v.: 106 p.:2557 - 2567, 2008

Palabras clave: correlation consistent basis thermochemistry

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Inglaterra

ISSN: 00268976

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Studies of Tripanocidal (Inhibitory) Power of Naphthoquinones: Evaluation of Quantum Chemical Molecular Descriptors for Structure-activity Relationships (Completo, 2008)

PAULINO, M., ALVAREDA, E., DENIS, P.A., BARREIRO, E.J., SPERANDIO DA SILVA, G.M., DUBIN, M., GASTELLU, C., AGUILERA, S., TAPIA, O.

European Journal of Medicinal Chemistry (electrónico), v.: 43 p.:2238 - 2246, 2008

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Diseño de Fármacos, Mal de Chagas

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 17683254

Investigation of H₂ Physisorption on Corannulene (C₂₀H₁₀), Tetraindenocorannulene (C₄₄H₁₈), Pentaindenocorannulene (C₅₀H₂₀), C₆₀, and their Nitrogen derivatives (Completo, 2008)

DENIS, P.A.

Journal of Physical Chemistry C, v.: 112 p.:2791 - 2796, 2008

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 19327447

Es el primer artículo que publica la UDELAR en su historia, en una revista con referato sobre C60.

Scopus' WEB OF SCIENCE"

Thermochemistry of 35 selected sulfur compounds, a comparison between experiment and theory (Completo, 2008)

DENIS, P.A.

Journal of Sulfur Chemistry, v.: 29 3-4 , p.:327 - 354, 2008

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 17415993

Artículo review escrito por invitación para la edición especial del Journal of Sulfur Chemistry: Extreme Sulfur Chemistry

Scopus' WEB OF SCIENCE"

Electronic states and potential energy curves of molybdenum carbide, MoC and its ions. (Completo, 2006)

DENIS, P.A. , BALASUBRAMANIAN K.

Journal of Chemical Physics, v.: 125 p.:303626 2006

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00219606

jcp.aip.org

Scopus' WEB OF SCIENCE"

Multireference configuration interaction study of the electronic states of ZrC. (Completo, 2006)

DENIS, P.A. , BALASUBRAMANIAN K.

Journal of Chemical Physics, v.: 124 p.:174312 2006

Areas de conocimiento:

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

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Estados Unidos

ISSN: 00219606

jcp.aip.org

Scopus' WEB OF SCIENCE"

Theoretical characterization of the thiosulfene radical, HS₂. (Completo, 2006)

DENIS, P.A.

Chemical Physics Letters, v.: 422 p.:434 - 438, 2006

Areas de conocimiento:

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

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Holanda

ISSN: 00092614

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>

Scopus' WEB OF SCIENCE"

Thermochemistry of the hypobromous and hypochlorous acids, HOBr and HOCl. (Completo, 2006)

DENIS, P.A.

Journal of Physical Chemistry A, v.: 110 p.:5887 - 5892, 2006

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Estados Unidos

ISSN: 10895639

<http://pubs.acs.org/journals/jpcafh/index.html>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Spectroscopic Constants and Potential Energy Curves of Gallium Nitride (GaN) and ions: GaN⁺ and GaN⁻ (Completo, 2006)

DENIS, P.A. , BALASUBRAMANIAN K.

Chemical Physics Letters, v.: 423 p.:247 - 253, 2006

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Main Group Chemistry

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

<http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2006.03.075>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

The enthalpy of formation of the HSO radical, revisited. (Completo, 2005) Trabajo relevante

DENIS, P.A.

Chemical Physics Letters, v.: 402 p.:289 - 293, 2005

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Basis sets requirements for sulfur compounds in density functional theory: a comparison between correlations consistent basis sets, polarized consistent basis sets and Pople type basis sets. (Completo, 2005)

DENIS, P.A.

Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 1 p.:900 - 907, 2005

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Density Functional Theory, Benchmark Calculations

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 15499618

<http://pubs.acs.org/journals/jctcce/index.html>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Theoretical characterization of the low-lying excited states of NbC. (Completo, 2005)

DENIS, P.A. , BALASUBRAMANIAN K.

Journal of Chemical Physics, v.: 123 p.:54318 2005

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: USA

ISSN: 00219606

jcp.aip.org

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Systematic Coupled cluster, Brueckner coupled cluster, G3, CBS-QB3 and DFT Investigation of SX diatomics X= First or Second Row Atom. (Completo, 2004)

DENIS, P.A.

Journal of Physical Chemistry A, v.: 108 p.:11092 - 11100, 2004

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Coupled Clusters, Benchmark Calculations

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10895639

<http://pubs.acs.org/journals/jpcafh/index.html>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

On the Performance of CCSD(T) and CCSDT in the study of molecules with multiconfigurational character: halogen oxides, HSO, BN and O₃. (Completo, 2004)

DENIS, P.A.

Chemical Physics Letters, v.: 395 p.:12 - 20, 2004

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Coupled Clusters, Benchmark Calculations

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Ab initio and Density functional study of thionitroso XNS, and thiazyl isomers XSN, X=H, F, Cl, Br, OH, SH, NH₂, CH₃, CF₃, and SiF₃ (Completo, 2004)

DENIS, P.A., VENTURA, O.N., MAI, H.T., NGUYEN, M.T.

Journal of Physical Chemistry A, v.: 108 p.:5073 - 5080, 2004

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Coupled Clusters, Química del Azufre

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10895639

<http://pubs.acs.org/journals/jpcafh/index.html>

The corresponding author is Dr. Pablo A. Denis

Scopus® WEB OF SCIENCE™

CCSDT study of the FOO radical (Completo, 2004)

DENIS, P.A., VENTURA, O.N.

Chemical Physics Letters, v.: 385 p.:292 - 297, 2004

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Coupled Clusters, Química Atmosférica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>

The corresponding author is Dr. Pablo A. Denis

Scopus® WEB OF SCIENCE™

High order correlation effects in the calculation of enthalpies of formation of sulfur compounds, CCSD(T) vs CCSDT (Completo, 2003)

DENIS, P.A.

Chemical Physics Letters, v.: 382 p.:65 - 70, 2003

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica, Coupled Clusters

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Density functional study of the decomposition pathways of nitroethane and 2-nitropropane (Completo, 2003)

DENIS, P.A., VENTURA, O.N., LE, H.T., NGUYEN, M.T.

Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 5 p.:1730 - 1738, 2003

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet
ISSN: 14639076
<http://www.rsc.org/Publishing/Journals/CP/index.asp>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE™

Density functional computational thermochemistry: Determination of the enthalpy of formation of the methanethial-S,S-dioxide, (sulfene). (Completo, 2003)

VENTURA, O.N., KIENINGER, M., DENIS, P.A.
Journal of Physical Chemistry A, v.: 107 p.:518 - 521, 2003

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10895639

<http://pubs.acs.org/journals/jpcafh/index.html>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE™

Complete basis set and density functional determination of the enthalpy of formation of the controversial HO₃ radical: a discrepancy between experiment and theory (Completo, 2002)

DENIS, P.A., KIENINGER, M., VENTURA, O.N., CACHAU, R.E., DIERCKSEN, G. H.
Chemical Physics Letters, v.: 365 p.:440 - 449, 2002

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE™

Density functional computational thermochemistry: solving the discrepancy between MO and DFT calculations on the enthalpy of formation of sulfine, CH₂SO. (Completo, 2002)

VENTURA, O.N., KIENINGER, M., DENIS, P.A., CACHAU, R.E.
Chemical Physics Letters, v.: 355 p.:207 - 213, 2002

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE™

Density functional computational thermochemistry. Isomerization of sulfine and its enthalpy of formation (Completo, 2001)

DENIS, P.A., VENTURA, O.N., CACHAU, R.E., KIENINGER, M.
Journal of Physical Chemistry A, v.: 105 p.:9912 - 9916, 2001

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10895639

<http://pubs.acs.org/journals/jpcafh/index.html>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE™

Density functional investigation of atmospheric sulfur Chemistry II. The heat of formation of the XSO₂ radicals, X=H, CH₃. (Completo, 2001)

DENIS, P.A., VENTURA, O.N.
Chemical Physics Letters, v.: 344 p.:221 - 228, 2001

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>

Hydroxamic Chelates of Boric acid: a density functional study. (Completo, 2001)

DENIS, P.A. , VENTURA, O.N.

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 537 p.:173 - 180, 2001

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Density Functional Investigation of atmospheric sulfur Chemistry I. The heat of formation of the HSO radical and its isomer SOH. (Completo, 2000)

DENIS, P.A. , VENTURA, O.N.

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 80 p.:439 - 453, 2000

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00207608

<http://www3.interscience.wiley.com/journal/73501020/abstract>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

LIBROS

Carbon nanomaterials sourcebook (Participación , 2016)

DENIS, P.A.

Edición: ,

Editorial: CRC Press, Miami

Tipo de publicación: Investigación

Escrito por invitación

Palabras clave: nanotecnología

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN/ISBN: 1482252686

<https://www.crcpress.com/Carbon-Nanomaterials-Sourcebook-Graphene-Fullerenes-Nanotubes-and-Nanodiamo>

Capítulos:

Covalently functionalized Graphene

Organizadores: CRC Press

Página inicial 89, Página final 106

Mechanical and Electronic Properties of Graphene Nanostructures (Participación , 2011)

R. FACCIO , FERNANDEZ-WERNER, L. , H. PARDO , GOYENOLA, C , DENIS, P.A. , MOMBRU, A.W.

Número de volúmenes: 17

Edición: ,

Editorial: Intech,

Palabras clave: nanotecnología, graphene, DFT

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN/ISBN: 9789533071527

<http://www.intechopen.com/articles/show/title/mechanical-and-electronic-properties-of-graphene-nanos>

Capítulos:

Evaluaciones

EVALUACIÓN DE PROYECTOS

EVALUACIÓN INDEPENDIENTE DE PROYECTOS

ACS Petroleum Research Fund (2013 / 2018)

Estados Unidos
ACS Petroleum Research Fund
Cantidad: Menos de 5

Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica - ANPCyT (2013 / 2013)

Argentina
Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica - ANPCyT
Cantidad: Menos de 5

CONICYT-CHILE (2011 / 2011)

Chile
CONICYT-CHILE
Cantidad: Menos de 5
Evaluacion de proyecto sobre nanotecnología

National Science Foundation (United States) (2011 / 2011)

Estados Unidos
National Science Foundation (United States)
Cantidad: Menos de 5

Universidad Nacional de Colombia, Sistema Hermes (2007 / 2008)

Colombia
Universidad Nacional de Colombia, Sistema Hermes
Cantidad: Menos de 5

EVALUACIÓN DE PUBLICACIONES

REVISIONES

European Physical Journal B (2020 / 2020)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitación.

Inorganica Chimica Acta (2020 / 2020)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitación.

Strucural Chemistry (2019 / 2019)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por Invitación.

Nature Chemistry (2019 / 2019)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer by invitation

Journal of Physics and Chemistry of Solids (2019 / 2019)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer by invitation.

Science of the Total Environment (2019 / 2019)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitación.

Dalton Transactions (2018 / 2018)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitación

Pramana: Journal of Physics (2018 / 2018)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitacion

ChemPhysChem (2018 / 2018)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitación

International Journal of Chemical Kinetics (2018 / 2018)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitacion

Applied Physics A (2018 / 2018)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitacion.

Macromolecular Chemistry and Physics (2017)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitacion

ACS Catalysis (2016 / 2017)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

Advances in Materials Science and Engineering (2015)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitacion

Chemical Communications (2015)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitacion

Polycyclic Aromatic Compounds (2015 / 2016)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitacion

Materials Chemistry and Physics (2015 / 2016)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

Reviewer por invitacion

Journal of Nanostructure in Chemistry (2015 / 2016)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Carbon (2014)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Reviewer por invitacion

New Journal of Chemistry (2014)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

reviewer por invitacion

Chemistry of Materials (2014)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Reviewer por invitacion

Applied Surface Science (2014 / 2015)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Reviewer por invitacion

Scientific Reports (2014 / 2015)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Reviewer por Invitacion

RSA Advances (2013 / 2015)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Royal Society of Chemistry Editor Asociado y Reviewer

Advanced Materials (2013 / 2014)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Reviewer por invitacion

Physica E (2013 / 2014)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Reviewer por invitacion

Materials Science in Semiconductor Processing (2013 / 2014)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Reviewer por invitacion

Journal of Physical Chemistry Letters (2013 / 2014)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Reviewer por invitación

Nanoscale (2013 / 2014)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Reviewer por invitacion

Advanced Functional Materials (2013 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitacion

ADVANCED ENERGY MATERIALS (2012 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitacion

International Journal of Quantum Chemistry (2012 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitacion

Computational Materials Science (2012 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitación

Dataset Papers in Physical Chemistry (2012 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Miembro de la Editorial Board desde 2012

ACS Macro Letters (2012 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviwer por invitacion

Nanoscience and Nanotechnology Letters (2012 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Referee por invitacion

Journal of Molecular Structure (2012 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitacion

INNOTECH (2012 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Evaluador del open journal publicado por el LATU

physica status solidi (b) (2012 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitacion

Chemistry: A European Journal (2012 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitacion

Molecular Physics (2012 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitacion

Surface Science (2012 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitacion

Small (2012 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitación

Physical Chemistry Chemical Physics (2012 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: De 5 a 20

Journal of Physical Organic Chemistry (2011 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

Computational and Theoretical Chemistry (2011 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitación

Chemical Physics (2011 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Elegido como outstanding reviewer

Journal of Cluster Science (2011 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Reviewer por invitacion

Current Physical Chemistry (2010 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

Journal of Computational Chemistry (2010 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

ACS Applied Materials & Interfaces (2010 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements (2010 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

International Journal of Hydrogen Energy (2010 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

Theoretical Chemistry Accounts (2010 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

European Journal of Lipid Science and Technology (2009 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy (2009 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

Journal of Materials Science (2009 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

Journal of Chemical Physics (2009 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: De 5 a 20

ACSNANO (2009 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

Journal of the American Chemical Society (2009 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: De 5 a 20

Journal of Physical Chemistry B (2008 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

Journal of Physical Chemistry C (2007 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: De 5 a 20
El Journal se creo en el año 2007

Journal of Sulfur Chemistry (2007 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

Chemical Physics Letters (2006 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Elegido como outstanding reviewer

Journal of Physical Chemistry A (2005 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: De 5 a 20

Journal of Organic Chemistry (2005 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

Organic Letters (2005 / 2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

JURADO DE TESIS

Defensa intermedia de posgrado (2015 / 2019)

Jurado de mesa de evaluación de tesis
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR,
Uruguay
Nivel de formación: Maestría
Se participo en cinco tribunales en 2015, 2016, 2018, 2019 y 2020.

Formación de RRHH

TUTORÍAS CONCLUIDAS

POSGRADO

RELACIÓN ESTRUCTURA-ACTIVIDAD DE POLIFENOLES: DESARROLLO Y APLICACIÓN DE TÉCNICAS DE FARMACOLOGÍA MOLECULAR Y ESTUDIOS DE UNIÓN A BLANCOS INVOLUCRADOS EN LOS MECANISMOS DE ACCIÓN (2016)

Tesis de doctorado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay

Programa: Doctorado en Química

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad

Nombre del orientado: Elena Alvareda

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Química Teórica

Áreas de conocimiento:

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

GRADO

Estudio teórico de la estabilidad, actividad catalítica y propiedades electrónicas de grafeno doblemente dopado con elementos 2p y 3p (2017)

Tesis/Monografía de grado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay

Programa: Licenciatura en Química

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Claudia Pereyra

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: graphene

Áreas de conocimiento:

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

TUTORÍAS EN MARCHA

POSGRADO

Caracterización teórica de nanomateriales bidimensionales sobre sustratos (2019)

Tesis de doctorado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR / DETEMA, Uruguay

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Claudia Pereyra

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Nanotecnología computacional

Áreas de conocimiento:

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

El 4 de Noviembre de 2019 se realizó la defensa oral intermedia de pasaje a doctorado en forma satisfactoria.

Otros datos relevantes

PREMIOS, HONORES Y TÍTULOS

Invitado para una entrevista sobre el trabajo realizado como Editor Asociado de RSC Advances (2020)

(Internacional)

RSC

Se seleccionó a los editores más destacados de RSC Advances para una entrevista.

Ganador del Premio Excelencia Elsevier 2018 en ciencias Químicas (2018)

(Internacional)

Elsevier y Anii

Premio entregado por la Editorial Elsevier para reconocer al químico más destacado de Uruguay.

Invitación para escribir un artículo del Volumen: "Computational and Theoretical Chemistry in Latin America" del International Journal of Quantum Chemistry (2018)

(Internacional)

Wiley International

Invitación para escribir un artículo en la revista mencionada

Editor para la Editors Web collections for RSC Advances sobre graphene y nanotubos de carbono (2018)

(Internacional)

Royal Society of Chemistry de Londres

Mi tarea consistió en seleccionar los 50 mejores artículos publicados por RSC Advances en el período 2016-2018 y comentarlos.

Tapa de la revista Journal of Physical Organic Chemistry (2018)

(Internacional)

Wiley

El artículo An effective tridentate molecular clip for fullerenes fue elegido para ser tapa de la revista en el primer volumen de 2018. Soy corresponding author y primer autor del mismo.

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/poc.3760>

Tapa del Journal ChemPhymChem (2017)

(Internacional)

Wiley

El artículo Triple-Doped Monolayer Graphene with Boron, Nitrogen, Aluminum, Silicon, Phosphorus, and Sulfur fue seleccionado como el mejor del volumen y se presentó en la tapa de la revista así como también se incluyó el autor profile.

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cphc.201700699/full>

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cphc.201700698/full>

Fellow of the Royal Society of Chemistry (2016)

(Internacional)

Royal Society of Chemistry

Invitado a ser FRSC por mis contribuciones científicas. Merito compartido solo con 2 químicos uruguayos.

Editor Asociado para la revista RSC Advances (2015)

(Internacional)

Royal Society of Chemistry

Distinguido como outstanding reviewer para el journal Chemical Physics (2014)

(Internacional)

Elsevier

Reconocimiento otorgado por la calidad y cantidad de reviews realizadas

Distinguido como outstanding reviewer para el journal Chemical Physics Letters (2014)

(Internacional)

Elsevier

Reconocimiento otorgado por la calidad y cantidad de reviews realizadas

El artículo Density functional investigation of thiolated graphene es seleccionado para el volumen virtual del Journal of Physical Chemistry C sobre funcionalización de grafeno. (2011)

(Internacional)

American Chemical Society/Journal of Physical Chemistry

Los Journals: Journal of Physical Chemistry A,B,C Letters seleccionaron los mejores artículos sobre funcionalización de grafeno y crearon un volumen virtual. El nuestro fue seleccionado entre los mejores.

Artículo On the hydrogen addition to graphene entre los 3 más bajados del Journal of Molecular Structure:THEOCHEM (2010)

(Internacional)

Journal of Molecular Structure: THEOCHEM

El sitio web de la revista lista los artículos con mas downloads durante 2010. El nuestro figuro en tercer puesto

Investigador Grado 3 del PEDECIBA-QUIMICA (2010)

(Nacional)

PEDECIBA

Ingresa al programa en el año 2005 como investigador grado 3

Seleccionado para la Edición 2011 del libro Who is Who in Science and Engineering (2010)

(Internacional)

Who is Who

se seleccionan los mejores científicos del mundo.

Seleccionado para la Edición 2010 del libro Who is Who (2009)

(Internacional)

Marquis Who is Who

Artículo Hydrogenated Double Wall Carbon Nanotubes seleccionado para destacarse en Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology (2009)

American Physical Society and American Institute of Physics

Miembro elegido para Innovation Explorers del consorcio Editorial Elsevier, Total de miembros en el mundo: 300 científicos (2009)

Elsevier

Artículo: Mechanical Properties of graphene nanoribbons entre los más bajados durante el 2009 en el Journal of Physics Condensed Matter. (2009)

(Internacional)

Institute of Physics (iop)

Durante el año 2009 se seleccionaron los artículos más bajados del sitio web de la revista.

Nivel I en el Sistema Nacional de Investigadores (2009)

ANII

Premio Caldeyro-Barcia en Química 2009, único ganador (2009)

(Nacional)

Pedeciba

Este premio es otorgado cada 5 años por el Pedeciba. Fui el unico ganador, es decir no fue compartido y tampoco hubieron menciones especiales para otros postulantes

Seleccionado para la Edición 2009 del Libro Who is Who in the World (2008)

Marquis Who is Who

Invitación para escribir un artículo Review in el Journal of Sulfur Chemistry. Special Issue, Extreme Sulfur Chemistry (2008)

Taylor and Francis publisher group

Científico Invitado en Lawrence Livermore National Laboratory (2005)

University of California, Lawrence Livermore National Laboratory

Artículo Hydrogenated Double Wall Carbon Nanotubes (2009)

Post-Doc University of California, Davis (2005)

University of California, Davis

Datos obtenidos por el investigador son seleccionados para ser incluidos en el CRC Handbook of Physics and Chemistry (2005)

CRC Press

Científico invitado en la Universidad de Leuven (2002)

Universidad de Leuven

Beca Pedeciba de Doctorado 2001-2004 (2001)

Pedeciba

Beca Pedeciba de Maestria 1999-2000 (1999)

Pedeciba

Científico Invitado Advanced Biomedical Supercomputer Center, Frederick, Maryland, USA. (1999)

National Institute of Health

PRESENTACIONES EN EVENTOS

X Brazilian Meeting on Simulational Physics: (2019)

Congreso

Monolayer boron-arsenide as a perfect anode for alkali-based batteries with large storage capacities and fast mobilities

Brasil

Tipo de participación: Otros

Nombre de la institución promotora: Universidad Federal de Minas Gerais

Palabras Clave: Nanotecnología

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Nanotecnología Computacional

American Chemical Society 255th national meeting (2018)

Congreso

Design and synthesis of an effective tridentate molecular receptor for fullerenes

Estados Unidos

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: American Chemical Society

Palabras Clave: Química supramolecular Química Orgánica

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Nanotecnología

American Chemical Society 255th national meeting (2018)

Congreso

Design and synthesis of triphenylene based molecular receptors for fullerenes

Estados Unidos

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: ACS

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Nanotecnología

American Chemical Society 255th national meeting (2018)

Congreso

Exploring the use of both planar and curved Surface polycyclic aromatic hydrocarbons in the design and synthesis of molecular receptors for fullerenes

Estados Unidos

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: ACS

Areas de conocimiento:

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

Adsorption of alkali metals on hexagonal boron phosphide: A comparative DFT study (2018)

Congreso

Encuentro Mineiro de Física Estadística y Computacional

Brasil

Tipo de participación: Expositor oral

Palabras Clave: Nanotecnología

Areas de conocimiento:

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

Congreso iberoamericano de sensores (2006)

Congreso

A theoretical model for bulk crystalline magnetic carbon

Uruguay

Tipo de participación: Otros

Palabras Clave: Química Teórica

Areas de conocimiento:

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

MGMS, Annual international Meeting 2005, Membranes and Membranes Proteins (2005)

Congreso

Structure-activity relationships of trypanocide o-naphthoquinones

Irlanda

Tipo de participación: Otros

Palabras Clave: Química Teórica

Areas de conocimiento:

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

Advances in Synthetic Combinatorial and Medicinal Chemistry Symposium 2004 (2004)

Congreso

Anty-TRypanosoma cruzi activity of green tea (Camellia sinensis catechins. Structure Activity Relationships

Rusia

Tipo de participación: Otros

Palabras Clave: Química Teórica

Areas de conocimiento:

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

XXVIII Congreso de Químicos teóricos de Experiencia Latina 2002 (2002)

Congreso

Theoretical Investigation of the HOOO radical

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Palabras Clave: Química Teórica

Areas de conocimiento:

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

International Congress of Quantum Chemistry (2000)

Congreso

Density functional sulfur thermochemistry

Francia

Tipo de participación: Expositor oral

Palabras Clave: Química Teórica

Areas de conocimiento:

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

Density Functional Theory 2000 (2000)

Congreso

Analysis of two reaction paths for the production of FO

Francia

Tipo de participación: Expositor oral

Palabras Clave: Química Teórica

Areas de conocimiento:

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

I Congreso de Físicoquímica del Mercosur, 1999, Santa Fe, Argentina 1999. (1999)

Congreso

Theoretical Investigation of Asymmetrical Sulfides

Argentina

Tipo de participación: Expositor oral

Nombre de la institución promotora: Universidad de Santa Fe

Palabras Clave: Química Teórica

Areas de conocimiento:

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

IIIth Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (1999)

Congreso

Density functional Investigation of the HSO radical and its isomer SOH

México

Tipo de participación: Expositor oral

Palabras Clave: Química Teórica

Areas de conocimiento:

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

5th Electronic Computational Chemistry Conference Internet (1998)

Congreso

Theoretical Investigation of the chlorination of dimethyl sulfide

Estados Unidos

Tipo de participación: Expositor oral

Palabras Clave: Química Teórica

CONSTRUCCIÓN INSTITUCIONAL

Centro de Computados: se ha creado un centro de computos en el cual se desarrollan las tareas de investigación. Desde su creación el mismo ha brindado 20 millones de horas de computo a diferentes usuarios.

Información adicional

Administrador de todo el sistema computacional que posee el laboratorio, UNIX, LINUX.

Entrevistas para los medios de divulgación: Búsqueda (2 oportunidades), El Observador (2 oportunidades), Revista Uruguay Con Ciencia. Entrevista para Canal 5 Programa Edición Documental. H-index=31. Organización del Congreso a llevarse a cabo en el 2010: Congreso de

Odontología-Nanotecnología cargo de Secretario (23/07/2009) (10/09/2011)

(13/04/2012)

(13/04/2012)

Indicadores de producción

PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA	141
Artículos publicados en revistas científicas	139
Completo	139
Libros y Capítulos	2
Capítulos de libro publicado	2
EVALUACIONES	73
Evaluación de proyectos	5
Evaluación de publicaciones	67
Jurado de tesis	1
FORMACIÓN RRHH	3
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas	2
Tesis/Monografía de grado	1
Tesis de doctorado	1
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha	1
Tesis de doctorado	1