



Comisión Interministerial de Ciencia y
Tecnología

Curriculum vitae

Nombre: Otilia Mó Romero

Fecha: 10/02/2014

Research ID : A-7035-2012

Plan Nacional de I+D+I (2000-2003)

DNI: 35.227.920

Fecha de nacimiento : 24/12/1947

Sexo: M

Situación profesional actual

Organismo: Universidad Autónoma de Madrid

Facultad, Escuela o Instituto: Ciencias

Depto./Secc./Unidad estr.: Química

Dirección postal: Departamento de Química, C-9. Universidad Autónoma de Madrid. Cantoblanco. 28049-Madrid

Teléfono (indicar prefijo, número y extensión): 91-397-4511

Fax: 91-396-5238

Correo electrónico: otillia.mo@uam.es

Especialización (Códigos UNESCO): 2307-2210

Catedrática de Universidad

Fecha de inicio: Mayo de 2000

Situación administrativa

Plantilla

Contratado

Interino

Becario

Otras situaciones especificar:

Dedicación

A tiempo completo

A tiempo parcial

Líneas de investigación

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

Reactividad Intrínseca . Procesos de Interés en Química de la Atmósfera. Enlaces de Hidrógeno. Nuevos Materiales Moleculares.

Formación Académica

Titulación Superior	Centro	Fecha
Licenciada en Ciencias Químicas	Univ. Santiago de Compostela	1970
Grado de Licenciatura en C. Químicas	Univ. Santiago de Compostela	1971

Doctorado	Centro	Fecha
Ciencias Químicas	Universidad Autónoma de Madrid	1974

Actividades anteriores de carácter científico profesional

Puesto

Institución

Fechas

Becaria de FPI	Universidad Autónoma de Madrid	1971-73
Postdoctoral Res. Asociated	Carnegie-Mellon University	1974-76
Prof. Adjunto Interino	Universidad Autónoma de Madrid	1976-77
Prof. Adjunto Numerario	Universidad Autónoma de Madrid	1978-83
Prof. Titular de Universidad	Universidad Autónoma de Madrid	1983-00

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

Idioma	Habla	Lee	Escribe
Inglés	C	C	C
Francés	C	C	B
Gallego	C	C	B
Portugués	B	B	R

PARTICIPACION EN PROYECTOS DE INVESTIGACION FINANCIADOS EN LOS ULTIMOS 10 AÑOS

TITULO DEL PROYECTO: Profesores Visitantes Iberdrola.

ENTIDAD FINANCIADORA: Fundación Iberdrola.

DURACION DESDE: 1999 HASTA: 2002

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

TITULO DEL PROYECTO: Determinación experimental de la acidez y basicidad en fase gaseosa de sistemas insaturados heteroatómicos por espectrometría de masas de resonancia ciclotrónica de iones (ICR) y modelización mediante cálculos ab initio.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGES Acción Integrada Hispano-Francesa HF2000-0040

DURACION DESDE: 2000 HASTA: 2002

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad de Acidos hidroxycarboxilicos con cationes metálicos. Estudio Teórico y experimental de la formación, solvatación y reactividad de las especies organometálicas formadas.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGES Acción Integrada Hispano-Frances HF 1999-0015.

DURACION DESDE: 2000 HASTA: 2002

INVESTIGADOR PRINCIPAL: O. Mó.

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad iónica y clusters. Aplicaciones bioquímicas y medioambientales.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MCYT BQU2000-0245

DURACION DESDE: 2000 HASTA: 2003

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

TITULO DEL PROYECTO: Complejación en fase gaseosa de ácidos ribonucleicos y desoxirribonucleicos con cationes Pb^{2+} en presencia de Mg^{2+} . Estudio teórico y experimental

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI-MCyT Acción Integrada Hispano-Frances HF 2001-0042.

DURACION DESDE: 2002 HASTA: 2004

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

TITULO DEL PROYECTO: Red de excelencia en Química Teórica y Computacional.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MCYT BQU2001-5037-E

DURACION DESDE: 2003 HASTA: 2004

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

TITULO DEL PROYECTO: Intrinsic Reactivity of New Molecular Materials.

ENTIDAD FINANCIADORA: Cost Action D26 /0014/03

DURACION DESDE: 2003 HASTA: 2007

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad intrínseca de Nuevos Materiales Moleculares.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MCYT BQU2003-00894

DURACION DESDE: 2003 HASTA: 2006

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

TITULO DEL PROYECTO: Estructura y Dinámica en Procesos de Reactividad Química.

ENTIDAD FINANCIADORA: Proyectos de Investigación UAM-Grupo Santander Para la Cooperación con América Latina.

DURACION DESDE: 1-1-2006 HASTA: 31-12-2007

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Florentino Borondo Rodríguez

TITULO DEL PROYECTO: Materiales Foto- y Electroactivos para Celulas Solares Orgánicas e Híbridas. (MADRISOLAR)

ENTIDAD FINANCIADORA: Dirección General de Universidades e Investigación. Consejería de Educación. CAM. P-PPQ-000225-0505.

DURACION DESDE: 2006 HASTA: 2010

INVESTIGADOR PRINCIPAL: N. Martín.

TITULO DEL PROYECTO: Modelización de Materiales Moleculares y Nanoestructuras.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MEC CTQ2006-08558

DURACION DESDE: 2006 HASTA: 2009

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

TITULO DEL PROYECTO: International Seminar in Theoretical Chemistry and Computational Modelling.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MEC CTQ2006-28324-E

DURACION DESDE: 2007 HASTA:

INVESTIGADOR PRINCIPAL: O. Mó.

TITULO DEL PROYECTO: CONSOLIDER on Molecular Nanoscience.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MEC CSD 2007-00010

DURACION DESDE: 2007 HASTA: 2011

COORDINADOR: E. Coronado.

TITULO DEL PROYECTO: Clusters as building blocks in nanotechnology.

ENTIDAD FINANCIADORA: Acción Integrada Hispano-Francesa HF2007-0067

DURACION DESDE: 2007 HASTA: 2009

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Alcamí

--TITULO DEL PROYECTO: Chemistry with Ultrashort Pulses and Free-Electron Lasers: Looking for Control Strategies Through ³Exact² Computations. COST action CM0702.

ENTIDAD FINANCIADORA: European Science Foundation

DURACION DESDE: 2008 HASTA: 2012

INVESTIGADOR PRINCIPAL: F. Martín

TITULO DEL PROYECTO: Dinámica de moléculas y clusters en fase gas y superficies.

ENTIDAD FINANCIADORA: Centro Estudios de America Latina de la UAM (CEAL-UAM) y Banco de Santander

DURACION DESDE: 2009 HASTA: 2010

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Alcamí

TITULO DEL PROYECTO: Reactividad en fase gas. Nuevos materiales moleculares y discriminación quiral.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGPTC- MICINN CTQ2009-13129-C02-01

DURACION DESDE: 2009 HASTA: 2012

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

TITULO DEL PROYECTO: Estudio de la Interacción de Iones de Metales Pesados con Biomoléculas.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MICINN CTQ2009-07197-E

DURACION DESDE: 2010 HASTA: 2012

INVESTIGADOR PRINCIPAL: O. Mó.

TITULO DEL PROYECTO: Materiales Foto- y Electroactivos para Celulas Solares Orgánicas e Híbridas. (MADRISOLAR2)

ENTIDAD FINANCIADORA: Dirección General de Universidades e Investigación. Consejería de Educación. CAM. S2009PPQ-1533.

DURACION DESDE: 2010 HASTA: 2014

INVESTIGADOR PRINCIPAL: N. Martín.

TITULO DEL PROYECTO: Gestión del Programa Consolider- Ingenio 2011-2012

ENTIDAD FINANCIADORA: DGI- MICINN CTQ2011-13605-E

DURACION DESDE: 2012 HASTA: 2013

INVESTIGADOR PRINCIPAL: O. Mó.

TITULO DEL PROYECTO: Interacciones no-covalentes y Quiralidad en Nuevos Materiales

ENTIDAD FINANCIADORA: DGICT CTQ2012-35513-C02-01

DURACION DESDE: 2013 HASTA: 2016

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

TITULO DEL PROYECTO: ERASMUS MUNDUS “European Joint Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling (TCCM)”

ENTIDAD FINANCIADORA: European Commission. EACEA. Ref. EMMC FPA 2010-0147

DURACION DESDE: 2010 HASTA: 2019

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez

TITULO DEL PROYECTO: XUV/X-ray Light and Fast ions for ultrafast chemistry. XLIC

ENTIDAD FINANCIADORA: European Science Foundation. COST Action CM 1204

DURACION DESDE: 2012 HASTA: 2016

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Alcamí

TITULO DEL PROYECTO: Theoretical Chemistry and Computational Modelling. TCCM

ENTIDAD FINANCIADORA: European Commission. Research Executive Agency. **MSCA-ITN-EJD**. SEP-210137947

DURACION DESDE: 2015 HASTA: 2019

INVESTIGADOR PRINCIPAL: M. Yáñez.

TITULO DEL PROYECTO: Materiales Avanzados de Carbono para Fotovoltaica Molecular (FOTOCARBON)

ENTIDAD FINANCIADORA: Dirección General de Universidades e Investigación. Consejería de Educación. CAM. S2013/MIT-2841.

DURACION DESDE: 2014 HASTA: 2018

INVESTIGADOR PRINCIPAL: N. Martín

PUBLICACIONES

1. AUTORES: O. Mó y M.A. Rios.
TITULO: *Estudio Teórico de la Reactividad de Cresoles.*
REF. REVISTA: *Afinidad* **38**, 1135 (1971). CLAVE=A
2. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J.I. Fernández Alonso.
TITULO: *Theoretical study of charge-transfer complexes.*
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem.*, **79**, 137 (1975). CLAVE=A
3. AUTORES: M. Yáñez, O. Mó and J.I. Fernández Alonso.
TITULO: *A theoretical study of the electrophilic substitution on aminophenols and aminobenzenethiols.*
REF. REVISTA: *Tetrahedron*, **31**, 245 (1977). CLAVE=A
4. AUTORES: J. Catalán, A. Macías, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Calculations on the inversion of anhydrous and hydrated aziridine.*
REF. REVISTA: *Mol. Phys.*, **34**, 1429 (1977). CLAVE=A
5. AUTORES: O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Influence of polarization functions on molecular electrostatic potentials.*
REF. REVISTA: *Theoret. Chim. Acta*, **47**, 263 (1978). CLAVE=A
6. AUTORES: J. Catalán, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Theoretical study of the structure of azetidine.*
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.* **43**, 251 (1978). CLAVE=A
7. AUTORES: O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Structure and charge distribution of some alkynoyl cations. A theoretical study.*
REF. REVISTA: *Theoret. Chim. Acta*, **53**, 337, (1979). CLAVE=A
8. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.
TITULO: *Proton affinities and preferred protonation sites in 3- and 4- substituted pyridines. Prediction from 1s orbital energies.*
REF. REVISTA: *J. Am. Chem. Soc.* **101**, 6520 (1979). CLAVE=A
9. AUTORES: M. Dorado, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *A theoretical study of the structure and charge distribution of some alkynylcarbenium ions.*
REF. REVISTA: *J. Am. Chem. Soc.*, **102**, 947 (1980) CLAVE=A
10. AUTORES: J. Catalán, F. Escudero, J. Laso, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *The effect of substituents on the structure of dioxirane.*
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.*, **69**, 217 (1980). CLAVE=A
11. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.
TITULO: *Prediction of proton affinities and protonation sites using a multivariate linear correlation.*
REF. REVISTA: *J. Chem. Soc. Perkin Trans. II*, 1409 (1982). CLAVE=A
12. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.
TITULO: *A theoretical study of the structure, charge distribution and gas-phase basicity of 1H-indazole and its N-methyl derivatives.*
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.*, **94**, 143 (1983). CLAVE=A

13. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.
TITULO: *A theoretical study of the structure, charge distribution and gas-phase basicity of azaindoles.*
REF. REVISTA: Tetrahedron, **39**, 2851 (1983). CLAVE=A
14. AUTORES: F. Escudero, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *A theoretical study of the charge distribution of aminopyridines, aminopyrimidines and some diazine N-oxides.*
REF. REVISTA: J. Chem. Soc. Perkin Trans. II, 1735 (1983). CLAVE=A
15. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.
TITULO: *Theoretical study on the stable conformers of 1,3-diazetidone.*
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM, **106**, 251 (1984). CLAVE=A
16. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.
TITULO: *Conformation of four-membered rings. Comparison between azetidone and 1,3-diazetidone.*
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM, **107**, 269 (1984). CLAVE=A
17. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez and M. Yáñez.
TITULO: *Influence of the tautomeric forms of azaindoles on their basicity in solution.*
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM, **107**, 263 (1984). CLAVE=A
18. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, P. Pérez, M. Yáñez and F. Amat-Guerri.
TITULO: *Comparative study of the structure and properties of 1-methyl-7-azaindole and 7-methyl-7H-pyrrolo(2,3-b)pyridine, in their ground states.*
REF. REVISTA: Nouv. J. Chim., **8**, 87 (1984). CLAVE=A
19. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, J.L.G. de Paz, P. Pérez and M. Yáñez.
TITULO: *Protonation of azanaphthalenes, azaindoles and purine bases. The "lone-pair charge" approach.*
REF. REVISTA: Nucleic Acid Symposium Series, **14**, 105 (1984). CLAVE=A
20. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, J.L.G. de Paz, P. Pérez and M. Yáñez.
TITULO: *A theoretical study on the tautomer preference for 4(5)-substituted imidazoles.*
REF. REVISTA: Nucleic Acid Symposium Series, **14**, 161 (1984). CLAVE=A
21. AUTORES: J. Catalán, O. Mó, J.L.G. de Paz, P. Pérez, M. Yáñez and J. Elguero.
TITULO: *Basicity of azoles. Part 6. Calculated intrinsic basicities for methyl-substituted pyrazoles and imidazoles. Comparison to aqueous solution data: N-methylation effect.*
REF. REVISTA: J. Org. Chem., **49**, 4379 (1984). CLAVE=A
22. AUTORES: F. Escudero, O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.
TITULO: *Structure and charge distribution of 4-substituted benzenediazonium ions.*
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **120**, 377 (1985). CLAVE=A
23. AUTORES: O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.
TITULO: *Calculation of radial couplings in the model potential and pseudopotential approaches. The NaH quasimolecule.*
REF. REVISTA: Phys. Rev., **A31**, 3977 (1985). CLAVE=A
24. AUTORES: L.F. Errea, L. Méndez, O. Mó and A. Riera.
TITULO: *Nonadiabatic ionic-covalent transitions. Exponential model for the charge exchange and*

- neutralization reaction $Na + H^- \rightarrow Na^+ + H$.*
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **84**, 147 (1985). CLAVE=A
25. AUTORES: O. M6, J.L.G. de Paz, and M. Y6ñez.
TITULO: *Protonation energies and tautomerism of azoles. Basis set effects.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **90**, 5597 (1986). CLAVE=A
26. AUTORES: O. M6, J.L.G. de Paz, and M. Y6ñez.
TITULO: *Protonation of azines. An ab initio molecular orbital study.*
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **150**, 135 (1987). CLAVE=A
27. AUTORES: R. Mendiz6bal, O. M6, A. Riera and M. Y6ñez.
TITULO: *Energies and radial couplings for the $^1\Sigma$ and $^3\Sigma$ states of $NaHe^+$ quasimolecule.*
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **150**, 345 (1987). CLAVE=A
28. AUTORES: O. M6, M. Y6ñez and J. Elguero.
TITULO: *Binding of NH_4^+ to azoles in the gas phase. A theoretical study of the $N...H^+...N$ Ionic hydrogen bond.*
REF. REVISTA: J. Org. Chem., **52**, 1713 (1987). CLAVE=A
29. AUTORES: F. Mart6n, O. M6, A. Riera and M. Y6ñez.
TITULO: *Feshbach resonant energies and widths in a pseudopotential approach.*
REF. REVISTA: Europhys. Lett. **4**, 799 (1987). CLAVE=A
30. AUTORES: F. Mart6n, O. M6, A. Riera and M. Y6ñez.
TITULO: *Feshbach and pseudopotential theories. A useful analogy.*
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **87**, 6635 (1987). CLAVE=A
31. AUTORES: O. M6, J.L.G. de Paz and M. Y6ñez.
TITULO: *Protonation of three membered ring heterocycles. An ab initio molecular orbital study.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **91**, 6484 (1987). CLAVE=A
32. AUTORES: O. M6 and A. Riera.
TITULO: *Excitation and charge exchange in $He^+ + Na$ collisions.*
REF. REVISTA: J. Phys. B **21**, 119 (1988). CLAVE=A
33. AUTORES: O. M6, J.L.G. de Paz and M. Y6ñez.
TITULO: *Counterpoise estimates of the BSSE in the evaluation of protonation energies.*
REF. REVISTA: Theoret. Chim. Acta **73**, 307 (1988). CLAVE=A
34. AUTORES: F. Mart6n, O. M6, A. Riera and M. Y6ñez.
TITULO: *Energies and widths of ($1s^23131'$) resonant states of C^{2+} , N^{5+} , O^{4+} and N^{6+} .*
REF. REVISTA: Phys. Rev. A **38**, 1094 (1988). CLAVE=A
35. AUTORES: O. M6, and A. Riera.
TITULO: *Energies and Radial couplings of $^{1,3}\Sigma$ and $^{1,3}\Pi$ states of $NaHe^+$, modified with a common translation factor.*
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **164**, 135 (1988). CLAVE=A
36. AUTORES: A. Mac6as, F. Mart6n, O. M6, A. Riera and M. Y6ñez.
TITULO: *Atomic and molecular autoionizing states. A theoretical approach.*

- REF. REVISTA: J. Physique **50**, C1-37 (1989). CLAVE=A
37. AUTORES: A. Macías, O. Mó, A. Riera, M. Yáñez, H. Bachau, P. Galán and F. Martín.
TITULO: *Extension of the conventional and pseudopotential Feshbach methods to the study of "two active electrons + core" resonance states. Application to C^{2+} ($1s^2 3131'$) and Ne^{6+} ($1s^2 3131'$) systems.*
REF. REVISTA: J. Physique **50**, C1-99 (1989). CLAVE=A
38. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *A molecular orbital study of azole- Li^+ complexes.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **93**, 3929 (1989). CLAVE=A
39. AUTORES: F. Fernández-Lázaro, J. Mendoza, O. Mó, S. Rodríguez-Morgade, T. Torres, M. Yáñez, and J. Elguero.
TITULO: *Phtalocyanine analogues. Part I. Synthesis, spectroscopy and theoretical study of 9,20-Dihydro-5,24:12,17-Diimino-7,10:19,22-dinitrilobenz (f,p)[1,2,4,9,11,12,14,19] octaazacycloicosine and MNDO calculations on its related Hückel heteroannulene.*
REF. REVISTA: J. Chem. Soc. Perkin 2, 797 (1989). CLAVE=A
40. AUTORES: L.F. Errea, L. Méndez, O. Mó and A. Riera.
TITULO: *Molecular treatment of charge exchange in slow $C^{+3} + H$ collisions.*
REF. REVISTA: Phys. Scripta **T28**, 67 (1989). CLAVE=A
41. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.
TITULO: *A MO analysis of the aromaticity of some nitrogen heterocyclic compounds.*
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **201**, 17 (1989). CLAVE=A
42. AUTORES: A. Macías, F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.
TITULO: *A new method to calculate lifetimes of atomic and molecular autoionizing states.*
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **202**, 235 (1989). CLAVE=A
43. AUTORES: S. Osimitsch, W. Jitschin, H. Reihl, K. Kleinpoppen, H.O. Lutz, O. Mó and A. Riera.
TITULO: *Alignment and spin exchange in the $Na(3p)$ excitation by He^+ ion impact.*
REF. REVISTA: Phys. Rev. A **40**, 2958 (1989). CLAVE=A
44. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz, M. Yáñez, I. Alkorta, J. Elguero, P. Goya and I. Rozas.
TITULO: *A molecular orbital study of the conformation (inversion and rotational barriers) and electronic properties of sulfamide.*
REF. REVISTA: Can. J. Chem. **67**, 2227 (1989). CLAVE=A
45. AUTORES: F. Martín, O. Mó, A. Riera and M. Yáñez.
TITULO: *A study of core effects in quasimolecular structure.*
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **205**, 43 (1990). CLAVE=A
46. AUTORES: O. Mó.
TITULO: *Etats autoionisats. Une analogie utile entre les methodes de Feshbach et du Pseudo-potentiel.*
Capitulo del libro: "12ème Colloque sur la Physique des Collisions Atomiques et Electroniques", Vol. 2. Université de Caen et C.I.R.I.L. (1989). CLAVE:CL
47. AUTORES: O. Mó.

- TITULO: *Interacciones en estados excitados. Uso de Potenciales efectivos.*
Capítulo del Libro: "Modelos teóricos e informáticos en la Química actual".
Ed. A. Riera. Editorial Centro de Estudios Ramón Areces, Madrid (1989).CLAVE=L
48. AUTORES: F. Borondo, O. Mó and A. Riera.
TITULO: *El continuo vibracional de moléculas diatómicas. Colisiones atómicas.*
Capítulo del libro: "Nuevas Tendencias de la Química Teórica". Vol. 2. Ed. S. Fraga.
C.S.I.C. (Madrid) 1989. CLAVE=CL
49. AUTORES: O. Mó and A. Riera.
TITULO: *Charge exchange in He⁺ + Na(3p) collisions.*
REF. REVISTA: J. Phys. B **23**, L373 (1990). CLAVE=A
50. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.
TITULO: *Enhanced Li⁺ binding energies of some azines: a molecular orbital study.*
REF. REVISTA: Theoret. Chim. Acta **77**, 1,(1990). CLAVE=A
51. AUTORES: J. Elguero, P. Goya, A. Martínez, I. Rozas, O. Mó, J.L.G. de Paz and M. Yáñez.
TITULO: *On the problem of the aromaticity of 1,2,6-Thiadiazine 1,1-Dioxides.*
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **3**, 470 (1990). CLAVE=A
52. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, F. Anvia and R.W. Taft.
TITULO: *An experimental and theoretical study of Li⁺ affinities of methyl diazoles.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **94**, 4796, (1990). CLAVE=A
53. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, J.L.M. Abboud and J. Elguero.
TITULO: *Bond Activation by protonation in the gas phase.*
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **172**, 471 (1990). CLAVE=A
54. AUTORES: O. Mó
TITULO: *Polarización e Intercambio de Spín en Colisiones Ión-Atomo.*
REF. REVISTA: Anal. de Física A **86**, 111 (1990). CLAVE=A
55. AUTORES: L. Méndez, I.L. Cooper, A.S. Dickinson, O. Mó and A. Riera.
TITULO: *Molecular treatment of mutual neutralization in slow Li⁺ + H collisions.*
REF. REVISTA: J. Phys. B **23**, 2797 (1990). CLAVE=A
56. AUTORES: M. Alcamí, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *A topological analysis of the bond activation in N₂H₄X⁺ and H₂O₂X⁺ (X=H, Li, Na, Al) complexes.*
REF. REVISTA: Chem. Phys. Res. **1**, 119, (1990). CLAVE=A
57. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez and J.L.M. Abboud.
TITULO: *Ab initio MO study of the halogen cation basicities of some organic bases.*
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **4**, 177, (1991). CLAVE=A
58. AUTORES: L.F. Errea, B. Herrero, L. Méndez, O. Mó and A. Riera.
TITULO: *Charge exchange and excitation in C⁺³ + H collisions. I Molecular calculations.*
REF. REVISTA: J. Phys. B **24**, 4049 (1991) CLAVE=A

59. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Ab initio molecular orbital treatment of hydroxylamine- X^+ -water and hydroxylamine- X^+ -ammonia ($X=H, Li$) clusters.*
REF. REVISTA: Chem. Phys. **151**, 21, (1991). CLAVE=A
60. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *An ab initio molecular orbital study of the structure, energetics and bond activations of Al^+ complexes.*
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM., **234**, 357 (1991). CLAVE=A
61. AUTORES: O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *A theoretical approach to ion-molecule interactions in the gas-phase.*
Capítulo del Libro: "Trends in Physical Chemistry". Vol. 3, 81 (1992) CLAVE=CL
62. AUTORES: L. F. Errea, L. Méndez, O. Mó and A. Riera.
TITULO: *Frontiers in Atomic Collisions.*
Capítulo del Libro: "Computational Chemistry: Structure, Interactions and Reactivity.
Editor: S. Fraga, Ed. Elsevier, Amsterdam, 1992. CLAVE=CL
63. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Enhanced Al^+ binding energies of some azoles. A theoretical study of azole- X^+ ($X=Na, K, Al$) complexes.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **96**, 3022 (1992). CLAVE=A
64. AUTORES: O. Mó and A. Riera.
TITULO: *On Na atom excitation in low energy $H + Na$ collisions.*
REF. REVISTA: J. Phys. B **25**, L101 (1992). CLAVE=A
65. AUTORES: J.L.M. Abboud, T. Cañada, H. Homán, R. Notario, C. Cativiela, M.D. Díaz de Villegas, M.C. Bordejé, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Gas phase basicities of β -Lactams and azetidines. Cyclation effects. An experimental and theoretical study.*
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc., **114**, 4728, (1992). CLAVE=A
66. AUTORES: A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *A G1 ab initio MO study of the distonic ions $H_2C-O-Si^+$ and their isomers.*
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett., **197**, 581, (1992). CLAVE=A
67. AUTORES: J. Tortajada, A. Total, J.P. Morizur, M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Experimental and theoretical study of $C_2H_4OAl^+$ complexes in the gas phase.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem., **96**, 8309, (1992). CLAVE=A
68. AUTORES: A.L. Llamas-Saiz, C. Foces-Foces, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.
TITULO: *Nature of the hydrogen bond: crystallographic vs. theoretical description of the $O-H\dots N(sp^2)$ hydrogen bond.*
REF. REVISTA: Acta Cryst. **B48**, 700, (1992). CLAVE=A
69. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.
TITULO: *Cooperative (nonpairwise) effects in water trimers: an ab initio molecular orbital study.*
REF. REVISTA: J. Chem. Phys., **97**, 6628 (1992). CLAVE=A

70. AUTORES: J.C. Madroñal, O. Mó, I.L. Cooper and A.S. Dickinson.
TITULO: *Bonding in MgH^+ Quasimolecule.*
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **260**, 63 (1992). CLAVE=A
71. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, A. Total, J. Tortajada and J.P. Morizur.
TITULO: *Structures and stabilities of $[C_2H_5NAI]^+$ molecular ions. An ab initio molecular orbital study.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **97**, 5553 (1993) CLAVE=A
72. AUTORES: M.C. Bordejé, O. Mó, M. Yáñez, M. Herreros and J.L.M. Abboud.
TITULO: *Cyclization effects on the gas-phase basicities of esters and ethers. An experimental and MO study.*
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **115**, 7389 (1993). CLAVE=A
73. AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *G2 ab initio Calculations on the Thermochemistry of $[P,N,H_n]$ ($n=0,2$) and $[P,N,H_n]^+$ ($n=0,3$) species and on the potential energy surfaces of $[P,N,H_3]^+$ singlet and triplet state cations.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **97**, 6607 (1993). CLAVE=A
74. AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *High level ab initio calculations on the structures and relative stabilities of $[O,P,H]$ systems and their cations.*
REF. REVISTA: Chem. Phys. Let. **209**, 557 (1993). CLAVE=A
75. AUTORES: O. Mó, J.L.G. de Paz, M. Yáñez, M. Esseffar, W. Bouab, E. Ballesteros, M. Herreros, H. Homan, C. Lopez-Mardomingo, R. Notario and J.L.M. Abboud.
TITULO: *Thiocarbonyl vs. Carbonyl Compounds: A Comparison of Intrinsic Reactivities.*
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **115**, 12468 (1993) CLAVE=A
76. AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Stabilization of nitrogen containing three-membered rings by H^+ and Li^+ association in the gas-phase.*
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **115**, 11074 (1993) CLAVE=A
77. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, I. Rozas and J. Elguero
TITULO: *Structure, Vibrational Frequencies and Thermodynamic Properties of Hydrogen Peroxide Dimers. An Ab Initio Molecular Orbital Study.*
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **100**, 2871 (1994) CLAVE=A
78. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, I. Rozas and J. Elguero
TITULO: *Structure, Vibrational Frequencies and Thermodynamic Properties of Hydrogen Peroxide-Water Dimers. An Ab Initio Molecular Orbital Study.*
REF. REVISTA: Chem. Phys. Let. **219**, 45 (1994) CLAVE=A
79. AUTORES: J.-L.G. Abboud, R. Notario, E. Ballesteros, M. Herreros, O. Mó, M. Yáñez, J. Elguero, G. Boyer and R. Claramunt.
TITULO: *Dissociative Attachment of Protons to 1-Fluoro- and 1-Chloro-Adamantane in the Gas-phase.*
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **116**, 2486 (1994) CLAVE=A
80. AUTORES: A. Martínez, J. Elguero, O.Mó and M. Yáñez
TITULO: *An ab initio study of the azoniaspiro[2.2]pentane cation (azirineaziridinium ion).*
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **115**, 45 (1994) CLAVE=A

81. AUTORES: A. Luna, M. Manuel, O.Mó and M. Yáñez
 TITULO: *G2 ab initio Calculations on the $F^+ + OH_2$ singlet and triplet potential energy surfaces.*
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **98**, 6980 (1994) CLAVE=A
82. AUTORES: M. Esseffar, O.Mó and M. Yáñez
 TITULO: *Is the Depletion of Ozone by HSO an Exothermic Process?.*
 REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **101**, 2175 (1994) CLAVE=A
83. AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.
 TITULO: *Thermochemistry of the Reactions of $PH^+_{2(3B_1)}$ with CO. A G2 Molecular Orbital Study.*
 REF. REVISTA: Chem. Phys. Let. **223**, 240 (1994). CLAVE=A
84. AUTORES: A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.
 TITULO: *A topological description of Si^+ and C^+ adducts of formaldehyde.*
 REF. REVISTA: Anales de Física, **90**, 205 (1994). CLAVE=A
85. AUTORES: M.C. Bordejé, O. Mó and M. Yáñez.
 TITULO: *Bond activation of four membered cycles by protonation in the gas phase.*
 REF. REVISTA: Anales de Física, **90**, 209 (1994). CLAVE=A
86. AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.
 TITULO: *Thermochemistry of the Reactions of $P^+(^3P)$ and $P^+(^1D)$ with Formaldehyde. A G2 Molecular Orbital Study.*
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **98**, 8679 (1994). CLAVE=A
87. AUTORES: A. Luna, O.Mó and M. Yáñez
 TITULO: *Gas-Phase reactions of $C^+(^2P)$ and $Si^+(^2P)$ with oxygen bases. A G2 ab initio molecular orbital study.*
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **310**, 135 (1994) CLAVE=A
88. AUTORES: O.Mó, M. Yáñez and J. Elguero
 TITULO: *Cooperative Effects in the Cyclic Trimer of Methanol. An ab initio Molecular Orbital Study.*
 REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **314**, 73 (1994) CLAVE=A
89. AUTORES: O.Mó, M. Yáñez, M. Esseffar and J.L.M. Abboud
 TITULO: *The Topological Analysis of the Electronic Charge Densities as a Tool to Study Protonation Effects on Thiocarbonyl Compounds.*
 REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **7**, 685 (1994) CLAVE=A
90. AUTORES: J. Tortajada, E. León, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.
 TITULO: *Ab initio calculations on Formamidine- X^+ ($X = H, Li, Na, Mg, \text{ and } Al$) complexes.*
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **98**, 12919 (1994). CLAVE=A
91. AUTORES: A.L. Llamas, C. Foces-Foces, O.Mó, M. Yáñez E. Elguero and J. Elguero
 TITULO: *The Geometry of Pyrazole: a test for ab initio calculations.*
 REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **16**, 263 (1995) CLAVE=A
92. AUTORES: S. Blanco, J.C. López, J.L. Alonso, O.Mó, M. Yáñez, N. Jagerovic and J.Elguero.
 TITULO: *Microwave Spectra and ab initio calculations of 1-Nitropyrazole.*

- REF. REVISTA: J. Mol. Struct. **344**, 241 (1995) CLAVE=A
93. AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M. Eckert-Maksic and Z.B. Maksic.
TITULO: *Bent Bonds in Bezocyclopropenes and their fluorinated derivatives.*
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **60**, 1638 (1995). CLAVE=A
94. AUTORES: O.Mó, M. Yáñez, A.L. Llamas-Saiz, C. Foces-Foces and J. Elguero
TITULO: *Ab initio study of the effect of N-substituents on properties of pyrazoles.*
REF. REVISTA: Tetrahedron **51**, 7045 (1995) CLAVE=A
95. AUTORES: M. Alcamí, I.L. Cooper, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Potential energy surfaces of the C_{2v} and D_{3h} ozone complexes with Li^+ .*
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **103**, 253 (1995) CLAVE=A
- 96.- AUTORES: J. Tortajada, E. León, J.P. Morizur, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Potential energy surface of protonated formamide and of formamide- X^+ ($X = Li, Na, Mg, and Al$) complexes.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **99**, 13890 (1995). CLAVE=A
- 97.- AUTORES: F. Ijjaali, O. Mó, M. Yáñez and J.-L.G. Abboud.
TITULO: *Hybridization effects on the intrinsic basicities of phosphorus and nitrogen containing bases.*
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **338**, 225 (1995). CLAVE=A
98. AUTORES: G. Boucoux, D. Drancourt, D. Leblanc, M. Yáñez and O. Mó.
TITULO: *Gas-phase basicities of lactones.*
REF. REVISTA: New J. Chem. **19**, 1243 (1995). CLAVE=A
- 99.- AUTORES: J.-L.G. Abboud, M. Herreros, R. Notario, M. Esseffar, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *A New Bond from an Old Molecule: Formation, Stability, and Structure of P_4H^+ .*
REF. REVISTA: J. American Chem. Soc. **118**, 1126 (1996). CLAVE=A
- 100 AUTORES: M. Esseffar, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *High-level ab initio calculations on $CH_2^+(^2A_1)$ with $PO(^2I)$ reactions.*
REF. REVISTA: Int. J. Quant. Chem. **57**, 559 (1996). CLAVE=A
- 101.- AUTORES: A.I. González, O. Mó, M. Yáñez, E. León, J. Tortajada, J.P. Morizur, I. Leito, P.C. Maria and J.F. Gal.
TITULO: *Basicity of Acetamidine. Experimental and Theoretical Study.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **100**, 10490 (1996) CLAVE=A
- 102.- AUTORES: O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *The Theory of Atoms in Molecules as a Tool to Investigate the Reactivity of Tetraphosphacubane*
REF. REVISTA: Canadian Journal of Chem. **74**, 901 (1996) CLAVE=A
103. AUTORES: M. T. Molina, W. Bouab, M. Esseffar, M. Herreros, R. Notario, J.-L.G. Abboud, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *The Intrinsic Acidity and Basicity of 2,2,2-Trifluoroethanethiol. The First Experimental and Theoretical Study.*
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **61**, 5485 (1996) CLAVE=A
104. AUTORES: J.-L.G. Abboud, M. Herreros, R. Notario, O. Mó, M. Yáñez, M. Regitz and J. Elguero.

- TITULO: *Tetraphosphacubane: An unexpectedly strong base in the gas-phase.*
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **61**, 7813 (1996) CLAVE=A
- 105.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Modeling Intrinsic Basicities: The Use of the Electrostatic Potentials and the Atoms-in-Molecules Theory.*
REF. REVISTA: Theoretical and Computational Chemistry Series. Vol 3. Molecular Electrostatic Potentials: Concepts and Applications. Ed. J.S. Murray and K. Sen. Elsevier Amsterdam 1996. CLAVE=CL
- 106.- AUTORES: B. Amekraz, J. Tortajada, J.P. Morizur, A.I. González, O. Mó, M. Yáñez, I. Leito, P.C. Maria and J.F. Gal.
TITULO: *Experimental and Theoretical Study of the Basicity of Guanidine. The Performance of DFT calculations vs. high level ab initio approaches.*
REF. REVISTA: New. J. of Chem. **20**, 1011 (1996) CLAVE=A
- 107.- AUTORES: L. González, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.
TITULO: *Cooperative Effects in Water Trimers. The Performance of Density Functional Approaches.*
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **371**, 1 (1996). CLAVE=A
- 108.- AUTORES: B. Amekraz, J. Tortajada, J.P. Morizur, A.I. González, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Acetamidine-Mg⁺(²S) complexes. The performance of different exchange and correlation density functionals approaches.*
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **371**, 313 (1996) CLAVE=A
- 109.- AUTORES: M.C. Bordejé, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Binding Energies of Metal Monocations to β -lactones and β -lactams. A theoretical Study of cyclization effects.*
REF. REVISTA: Structural Chem. **7**, 309 (1996). CLAVE=A
- 110.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *High level ab initio calculations on the 1,2-dithioglyoxal/1,2-dithiete isomerism.*
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **263**, 407 (1996). CLAVE=A
- 111.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M. Esseffar, A. El-Hammadi, M. Herreros, R. Notario and J.L.G. Abboud.
TITULO: *Role of chelation and resonance an the intrinsic acidity and basicity of tropolone.*
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **62**, 3200 (1997) CLAVE=A
- 112.- AUTORES: M. Manuel, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *G2 molecular orbital study of the reactions of water with Cl⁺(³P) and Cl⁺(¹D).*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **101**, 1722 (1997). CLAVE=A
- 113.- AUTORES: E. Leon, B. Amekraz, J. Tortajada, J.P. Morizur, A.I. González, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Acetamidine-X⁺ and Guanidine-X⁺ (X = Li, Na, Mg, Al) Complexes in the Gas-Phase. A Theoretical Study.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **101**, 2489 (1997) CLAVE=A
114. AUTORES: M.T. Molina, M. Yáñez, O. Mó, R. Notario and J.-L.G. Abboud.

- TITULO: *The Thiocarbonyl Group*.
REF. REVISTA: The chemistry of double-bonded functional groups. Supp. A3. Chapter 25
Ed. S. Patai. J. Wiley & Sons Ltd. New York (1997) CLAVE=CL
- 115.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *High-level ab initio vs. DFT calculations on (H₂O₂)₂ and H₂O₂-H₂O complexes as prototypes of multiple hydrogen bond systems*.
REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **18**, 1124 (1997). CLAVE=A
- 116.- AUTORES: M. Manuel, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Thermochemistry of the reactions F⁺(³P) and F⁺(¹D) with hydrogen sulfide. A Molecular orbital study*.
REF. REVISTA: Mol. Phys. **91**, 503 (1997). CLAVE=A
- 117.- AUTORES: A. Luna, B. Amekraz, J. P. Morizur, J. Tortajada, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Reaction between Guanidine and Cu⁺ in the gas phase. An Experimental and Theoretical Study*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **101**, 5931 (1997) CLAVE=A
- 118.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.
TITULO: *Study of the methanol trimer potential energy surface*.
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **107**, 3592 (1997). CLAVE=A
- 119.- AUTORES: M. Manuel, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Structure and Stability of [H₂,Cl,O]⁺ triplet state cations. A G2 ab initio molecular orbital study*.
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. **398/399**, 417 (1997). CLAVE=A
- 120.- AUTORES: J.M. Orza, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.
TITULO: *Vibrational Spectra of N-Methylpyrazole: An experimental and theoretical study*.
REF. REVISTA: Spectrochimica Acta A **53**, 1383 (1997). CLAVE=A
- 121.- AUTORES: A.I. González, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Structure and stability of [H₂O₂]⁺ Doublet and Quartet State Cations. An ab initio Molecular Orbital Study*.
REF. REVISTA: Anales de Química (International Edition) **93**, 310 (1997). CLAVE=A
- 122.- AUTORES: H. Homan, M. Herreros, R. Notario, J.-L.G. Abboud, M. Esseffar, O. Mó, M. Yáñez, C. Foces-Foces, A. Ramos-Gallardo, M. Martinez-Ripoll, A. Vegas, M.T. Molina, J. Casanovas, C. Turrión, P. Jimenez, M.V. Roux,.
TITULO: *Strain effects in protonated carbonyl compounds. An experimental and ab initio, treatment of acyclic carboxamides and ketones*.
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **62**, 8503 (1997) CLAVE=A
- 123.- AUTORES: G. Bouchoux, D. Leblanc, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Structural effects on the intrinsic basicities of α,β -unsaturated lactones and ketones*.
REF. REVISTA: J. Org. Chem. **62**, 8439 (1997). CLAVE=A
- 124.- AUTORES: J.C. Guillemin, M. Decouzon, PC Maria, JF Gal, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Gas-Phase basicities and acidities of ethyl-, vinyl- and ethynylarsines. An Experimental and Theoretical Study*.
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **101**, 9525 (1997). CLAVE=A

- 125.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *High-level ab initio calculations on the intramolecular hydrogen bond in thiomalonaldehyde.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **101**, 9710 (1997). CLAVE=A
- 126.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Ionic Intrinsic Reactivities of Strained Systems*
REF. REVISTA: **Recent Research Developments in Physical Chemistry (1997)**
CLAVE=CL
- 127.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Proton Transfer in Dissociative Protonation Processes.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 1356 (1998). CLAVE=A
- 128.- AUTORES: A. Luna, B. Amekraz, J. Tortajada, J.P. Morizur, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Modeling the interactions between peptide functions and Cu(I): Formamide Cu⁺ reaction in the gas-phase.*
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **120**, 5411 (1998) CLAVE=A
- 129.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *G2 ab initio Calculations on three-membered rings. The role of Hydrogen Atoms*
REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **19**, 1072 (1998) CLAVE=A
- 130.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Ab initio and density functional theory calculations on the protonated species of As₄ clusters.*
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **108**, 8957 (1998) CLAVE=A
- 131.- AUTORES: A. Luna, J.P. Morizur, J. Tortajada, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *The role of Cu⁺ association on the formamide → formamidic acid → (aminohydroxy) carbene isomerization in the gas-phase.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 4652 (1998) CLAVE=A
- 132.- AUTORES: O. Mó.
TITULO: *Modelización de Clusters por enlaces de Hidrógeno.*
REF. REVISTA: **Temas Actuales de la Química Cuántica. Cap.8 (1998).**
CLAVE=CL
- 133.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *High level ab initio and density functional theory studies on methanol-water dimers and cyclic methanol(water)₂ trimer.*
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **109**, 139 (1998) CLAVE=A
- 134.- AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Stabilization of zwitterionic forms of three-membered rings by cationization in the gas phase*
REF. REVISTA: J. Mol Struct. (THEOCHEM) **433**, 217 (1998) CLAVE=A
- 135.- AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Very strong Hydrogen Bonds in Neutral Molecules: The Phosphinic Acid Dimers*
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **109**, 2685 (1998) CLAVE=A
- 136.- AUTORES: J.-L.G. Abboud, M. Esseffar, M. Herreros, O. Mó, M.T. Molina, R. Notario, and M. Yáñez.
TITULO: *Protonation of S₄, S₆ and S₈ sulfur cycles. A Quantitative study.*

- REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 7996 (1998) CLAVE=A
- 137.-** AUTORES: O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Density Functional Theory Calculations on Hydrogen-Bonded Tropolone-(H₂O)₂ Clusters.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **102**, 8174 (1998) CLAVE=A
- 138.-** AUTORES: G. Bouchoux, JF Gal, PC Maria, J.E.Szulejko, T.B. McMahon, J. Tortajada, A. Luna, M. Yáñez and O. Mó
TITULO: *Gas-Phase Basicities of Acid Anhydrides.*
REF. REVISTA: J. Phys.Chem. **102**, 9183 (1998). CLAVE=A
- 139.-** AUTORES: , M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, A. Luna, J. Tortajada and J.P. Morizur.
TITULO: *Exploring the potential energy surface of the association of Cu⁺ to oxaziridine, nitrosomethane and formaldoxime.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem., **102**, 10120 (1998) CLAVE=A
- 140.-** AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Ionic intrinsic reactivities of strained systems*
REF. REVISTA: **Recent Res. Devel. in Physical Chemistry 2, 827 (1998)** CLAVE=CL
- 141.-** AUTORES: A. I. González, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Exploring the Potential Energy Surfaces of the Reactions of O⁺(⁴S) and O⁺(⁴S) with ammonia*
REF. REVISTA: Int. J. Mass. Spectr. **179/180**, 77 (1998) CLAVE=A
- 142.-** AUTORES: M. Begtrup, T. Balle, R.M. Claramunt, D. Sanz, JA. Jimenez, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.
TITULO: *GIAO ab initio calculations of nuclear shieldings of monosubstituted benzenes and n-substituted pyrazoles.*
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **453** 255 (1998) CLAVE=A
- 143.** AUTORES: L. Infantes, C. Foces-Foces, P. Cabildo, R.M. Claramunt, O. Mó, M. Yáñez and J. Elguero.
TITULO: *The Structure of Aminoazoles and its Relationship with Aromaticity: crystal and molecular structure of two polymorphic forms of 4-aminopyrazole.*
REF. REVISTA: Heterocycles **49**, 157 (1998) CLAVE=A
- 144.-** AUTORES: M. Manuel, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *The reactions of Cl⁺(³P) and Cl⁺(¹D) with hydrogen sulfide. A G2 molecular orbital study.*
REF. REVISTA: Mol. Phys. **96**, 231 (1999). CLAVE=A
- 145.-** AUTORES: Z.B. Maksic , M. Eckert-Maksic, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *The Mills-Nixon Effect: Fallacies, Facts and Chemical Relevance.*
REF. REVISTA: **Theoretical and Computational Chemistry vol 6. Pauling's Legacy. Modern Modeling of the Chemical Bonding. Elsevier. Amsterdam (1999)** CLAVE=CL
- 146.-** AUTORES: A. I. González, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *A gas-phase basicity scale for selenocarbonyl compounds based on high-level ab initio and density functional theory calculations*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **103**, 1662 (1999) CLAVE=A
- 147.-** AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Substituent Effects on the Strength of the Intramolecular Hydrogen Bond of Thiomalonaldehyde.*

- REF. REVISTA: J. Org. Chem. **64**, 2314 (1999) CLAVE=A
- 148.-** AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez and I.L. Cooper.
TITULO: *An ab initio Molecular Orbital Study of XO_2^+ ($X= F, Cl, Br, I$) Systems.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **103**, 2793 (1999) CLAVE=A
- 149.-** AUTORES: N. Doslic, K. Sundermann, L. González, O. Mó, J. Giraud-Girard and O. Kuhn.
TITULO: *Ultrafast photoinduced dissipative hydrogen switching dynamics in thioacetylaceton.*
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **1**, 1249 (1999) CLAVE=A
- 150.-** AUTORES: G. Bouchoux, M. Yáñez and O. Mó
TITULO: *Isomerization and Dissociation Processes of Protonated Benzene and Protonated Fulvene in the Gas-Phase.*
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectr. **185/186/187**, 241 (1999). CLAVE=A
- 151.-** AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M. Decouzon, PC Maria, JF Gal and J.C. Guillemin
TITULO: *Gas-Phase basicities and acidities trends in α,β -unsaturated amines, phosphines and arsines.*
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **121**, 4653 (1999). CLAVE=A
- 152.-** AUTORES: M. Alcamí, A.I. González, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Performance of Density Functional Theory methods for the treatment of metal-ligand dications.*
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **307**, 244 (1999) CLAVE=A
- 153.-** AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Density Functional Theory Study on Ethanol Dimers and Cyclic Ethanol Trimers.*
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **111**, 3855 (1999) CLAVE=A
- 154.-** AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M.V. Roux, P. Jiménez, J.Z. Dávalos, M.A.V. Ribeiro da Silva, M. Agostinha, R. Matos, L.M. Amaral, A. Sánchez-Migallón, P. Cabildo, R. Claramunt, J. Elguero and J.F. Liebman.
TITULO: *Enthalpies of Formation of N-Substituted Pyrazoles and Imidazoles.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. **103**, 9336 (1999). CLAVE=A
- 155.-** AUTORES: J.A. Jiménez, R. Claramunt, O. Mó, F. Wehrmann, G. Buntkowsky, H.H. Limbach, R. Goddard and J. Elguero.
TITULO: *The Structure of N-Aminopyrazole in the solid state and in solution: An experimental and computational study.*
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **1**, 5113 (1999) CLAVE=A
- 156.-** AUTORES: J.L. Abboud, R. Notario, O. Mó, M. Yáñez, R. Flammang, N. Jagerovic, I. Alkorta and J. Elguero.
TITULO: *4-nitropyrazole: a nitrogen or an oxygen base in the gas phase?.*
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **12**, 787 (1999) CLAVE=A
- 157.-** AUTORES: A. I. González, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *The structure and stability of Sb_4H^+ clusters. The importance of non-classical structures.*
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **112**, 2258 (2000) CLAVE=A
- 158.-** AUTORES: O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: ENLACE QUÍMICO Y ESTRUCTURA MOLECULAR

- 159.-** AUTORES: A. Luna, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Cu⁺ binding energies. Dramatic failure of the G2 method vs. Good performance of the B3LYP approach.*
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **320**, 129 (2000) CLAVE=A
- 160.-** AUTORES: M. Alcamí,, O. Mó, M. Yáñez, and I.L. Cooper.
TITULO: *The performance of density-functional theory in challenging cases: Halogen oxides.*
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **112**, 6131 (2000) CLAVE=A
- 161.-** AUTORES: A. Luna, B. Amekraz, J.P. Morizur, J. Tortajada, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Reactions of Urea with Cu⁺ in the Gas Phase: An Experimental and Theoretical Study:*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **104**, 3132 (2000) CLAVE=A
- 162.-** AUTORES: J.-L. M. Abboud, I. Alkorta, J.Z. Dávalos, J.F. Gal, M. Herreros, P.C. Maria, O. Mó, M.T. Molina, R. Notario and M. Yáñez.
TITULO: *The P₄...Li Ion in the Gas Phase: A Planetary System.*
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **122**, 4451 (2000) CLAVE=A
- 163.-** AUTORES: M. Lamsabhi, M. Alcamí, O. Mó, W. Bouab, M. Esseffar, J.L.M. Abboud, and M. Yáñez.
TITULO: *Are the Thiouracils Sulfur Bases in the Gas-phase?.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **104**, 5122 (2000) CLAVE=A
- 164.-** AUTORES: G. Bouchoux, B. Gaudin, D. Leblanc, M. Yáñez and O. Mó.
TITULO: *Is ionized cyclopropylamine cyclic?.*
REF. REVISTA: Int. J. Mass. Spectrometr. Ion Chem. **199**, 59 (2000) CLAVE=A
- 165.-** AUTORES: M. C. Oliveira, M.A. Almoester-Ferreira, O. Mó, M. Yáñez and H. Audier.
TITULO: *Exploring the potential energy surface associated with the HBr loss from 2-bromobutane radical cations.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem A, **104**, 9287 (2000) CLAVE=A
- 166.-** AUTORES: A. Luna, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Cu⁺ reactivity trends in sp, sp² and sp³ nitrogen, phosphorus and arsenic containing bases.*
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spect. **201**, 215 (2000) CLAVE=A
- 167.-** AUTORES: F. Ijjaali, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *A Theoretical Study of the Reaction between N⁺(³P) and Formaldehyde and Related processes in the Gas Phase.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **104**, 11132 (2000) CLAVE=A
- 168.-** AUTORES: L. González, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Protonation and Deprotonation of Thiomalonaldehyde. The role of the Intramolecular Hydrogen Bond*
REF. REVISTA: "Recent Theoretical and Experimental Advances in Hydrogen Bonded Clusters". Ed. S.S. Xantheas. Kluwer Academic Pub. (2000). The Netherlands. CLAVE=CL
- 169.-** AUTORES: F. Ijjaali, M. El-Mouhtadi, M. Esseffar, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *The role of the spin-forbidden processes in N⁺(³P)+ NH₃ reactions in the gas phase.*
REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **3**, 179 (2001) CLAVE=A

- 170.-** AUTORES: A. Benidar, R. Le Doucen, J.C. Guillemin, O. Mó, M. Yáñez.
TITULO: *Vibrational Spectra, DFT calculations and Assignments of the syn- and the gauche forms of vinylphosphine.*
REVISTA: J. Mol. Spectrosc. **205**, 252 (2001) CLAVE=A
- 171.-** AUTORES: F. Ijjaali, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Thermochemistry of the reactions between CN⁺ and H₂O in the gas phase.*
REVISTA: Mol. Phys. **99**, 1129 (2001) CLAVE=A
- 172.-** AUTORES: J.F. Gal, M. Decouzon, P.C. Maria, A.I. González, O. Mó, M. Yáñez, S. El Chaouch and J.C. Guillemin.
TITULO: *Acidity trends in α,β -Unsaturated alkanes, silanes, germanes and stannanes.*
REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **123**, 6353 (2001) CLAVE=A
- 173.-** AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, L. González and J. Elguero.
TITULO: *Spontaneous Self-ionization in the Gas Phase. A Theoretical Prediction.*
REF. REVISTA: Chem. Phys. Chem. **7**, 465 (2001) CLAVE=A
- 174.-** AUTORES: I. Alkorta, I. Rozas, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero.
TITULO: *Hydrogen bond vs. proton transfer between neutral molecules in the gas phase*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **105**, 7481 (2001) CLAVE=A
- 175.-** AUTORES: M.C. Oliveira, M.A. Almoester-Ferreira, O. Mó, M. Yáñez, and H. Audier.
TITULO: *Reaction Mechanisms for the HBr Loss from 2-Bromobutane Radical Cations.*
REF. REVISTA: Adv. Mass Spectrom. **15**, 753 (2001) Ed. E. Gelpi. John Wiley & Sons. New York. CLAVE=CL
- 176.-** AUTORES: A. Hoz, I. Almena, C. Foces-Foces, M. Yáñez, O. Mó, M. Alcamí, N. Jagerovic and J. Elguero
TITULO: *Synthesis, X-ray structure and properties of 2-(1'-pyridin-2'-one)benzimidazole*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. B **105**, 12759 (2001) CLAVE=A
- 177.-** AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez
TITULO: *Computational Chemistry. A useful (some times mandatory) tool in mass spectrometry Studies.*
REF. REVISTA: Mass Spectrom. Rev. **20**, 195-245 (2001) CLAVE=A
- 178.-** AUTORES: F. Ijjaali, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *High level ab initio study of the N⁺(³P)+ SH₂ reactions in the gas phase. The role of spin forbidden pathways.*
REVISTA: Int. J. Quantum Chem. **86**, 130 (2002) CLAVE=A
- 179.-** AUTORES: L. Boutreau, J. Tortajada, A. Luna, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Perturbation of the intramolecular hydrogen bonds of Glucose by Cu⁺ association.*
REVISTA: Int. J. Quantum Chem. **86**, 138 (2002) CLAVE=A
- 180.-** AUTORES: M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez
TITULO: *Modeling Intrinsic Basicities and Acidities*
REF. REVISTA: J. Phys Org. Chem. (Rev. Article) **15**, 174 (2002) CLAVE=A
- 181.-** AUTORES: M. Alcamí, A. Luna, O. Mó, M. Yáñez, L. Boutreau and J. Tortajada
TITULO: *An Experimental and Theoretical Investigation of the Reactions between Glucose and Cu⁺*

in the Gas Phase.

- REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 2641 (2002) CLAVE=A
- 182.-** AUTORES: J.C.Guillemín, S. El Chaouch, J.F. Gal, P.C. Maria, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Gas-Phase acidity of primary α,β -unsaturated germanes and stannanes.*
REF. REVISTA: *Main Group Metal Chemistry*, **25**, 85 (2002). CLAVE=A
- 183.-** AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.
TITULO: *Competition between X...H...Y intramolecular hydrogen bonds and X...Y (X=O, S; Y=Se, Te) chalcogen-chalcogen interactions.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A, **106**, 4661 (2002) CLAVE=A
- 184.-** AUTORES: M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, I. Alkorta and J. Elguero.
TITULO: *Triaziridine and Tetrazetidine vs. Cyclic Water trimer and tetramer: A computational approach to the relationship between Molecular and Supramolecular Conformational Analysis.*
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **4**, 2123 (2002) CLAVE=A
- 185.-** AUTORES: A. Luna, M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, and J. Tortajada
TITULO: *A theoretical study of the interaction between Ni⁺ and small oxygen- and nitrogen-containing Bases.*
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom **217**, 119 (2002) CLAVE=A
- 186.-** AUTORES: O. Mó, M. Yáñez J.F. Gal, P.C. Maria and J.C.Guillemín.
TITULO: *Vinyl and Ethynyl Silanes, Germanes and Stannanes. A new case of Dissociative Proton Attachment.*
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **15**, 509 (2002) CLAVE=A
- 187.-** AUTORES: G. Bouchoux, D. Defaye, T. McMahon, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Structural and energetic aspects of the protonation of phenol, catechol, resorcinol and hydroquinone.*
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **8**, 2900 (2002) CLAVE=A
- 188.-** AUTORES: A. Benidar, R. Le Doucen, J.C.Guillemín, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Vibrational Spectra of Vinylarsine and Vinylstibine. An Experimental and Theoretical Study.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 6262 (2002) CLAVE=A
- 189.-** AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *The Crucial role of agostic interactions in the binding of Cu⁺ to alkanes, silanes and germanes in the gas phase.*
REF. REVISTA: J. Comp. Methods in Sciences and Engineering **2**, 411 (2002) CLAVE=A
- 190.-** AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.
TITULO: *The Role of Chalcogen-chalcogen interactions on the intrinsic basicity and acidity of β -chalcogenovinylaldehydes, HC(=X)-CH=CH-CYH (X=O, S; Y=Se, Te).*
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **8**, 3999 (2002) CLAVE=A
- 191.-** AUTORES: J.F. Gal, P.C. Maria, M. Decouzon, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Gas-Phase Lithium cation basicity of some benzene derivatives. An experimental and theoretical study.*

- REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom **219**, 445 (2002) CLAVE=A
- 192.-** AUTORES: L. Bouteau, P. Toulhoat, J. Tortajada, A. Luna, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Reactions between Glycolic Acid and Cu⁺ in the Gas-phase. An experimental and theoretical study.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **106**, 9359 (2002) CLAVE=A
- 193.-** AUTORES: L. Galiano, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Gas Phase chemistry of ethyl- and vinyl-amines, phosphines and arsines. A DFT study of the structure and stability of their Cu⁺ complexes.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 9306 (2002) CLAVE=A
- 194.-** AUTORES: I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, M. Yáñez, and J. Del Bene.
TITULO: *An ab initio study of the structural, energetic, bonding, and IR spectroscopic properties of complexes with dihydrogen bonds.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **106**, 9325 (2002) CLAVE=A
- 195.-** AUTORES: J. Del Bene, S.A. Perera, R.J. Bartlett, I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *One-Bond (^{1d}J_{H-H}) and Three-Bond (^{3d}J_{X-M}) Spin-Spin Coupling Constants across X-H...H-M Dihydrogen Bonds.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **106**, 9331 (2002) CLAVE=A
- 196.-** AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, J.C. Guillemin, E.H. Riague, J.F. Gal, P.C. Maria and C. Dubin-Poliart.
TITULO: *The gas-phase acidity of HCP, CH₃CP, HCAs and CH₃Cas. An unexpected enhanced acidity of the methyl group.*
REF. REVISTA: Chemistry. Eur.J. **8**, 4919 (2002) CLAVE=A
- 197.-** AUTORES: L. Bouteau, E. Leon, L. Rodriguez-Santiago, P. Toulhoat, O. Mó, and J. Tortajada.
TITULO: *Gas-Phase Reactivity of Cu⁺ and Ag⁺ with Glycerol: an Experimental and Theoretical Study.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **106**, 10563 (2002) CLAVE=A
- 198.-** AUTORES: M. Esseffar, E. Quintanilla, J.Z. Dávalos, J.L.M. Abboud, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Nitro derivatives of pyrrole, furan and 1H-tetrazole: ring or nitro bases?.*
REF. REVISTA: New J. Chem. **26**, 1567 (2002) CLAVE=A
- 199.-** AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.
TITULO: *1,8-Chalcogen-Bridged Naphthalenes. Strong Carbon Bases in the Gas Phase.*
REF. REVISTA: New J. Chem. **26**, 1747 (2002) CLAVE=A
- 200.-** AUTORES: L. Galiano, M. Alcamí, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Gas-Phase Chemistry of Ethynyl-Amine, Phosphine and Arsine. Structure and stability of their Cu⁺ and Ni⁺ complexes.*
REF. REVISTA: Chem. Phys. Chem. **4**, 72 (2003) CLAVE=A
- 201.-** AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, J. Elguero, M.V. Roux, P. Jiménez, J.Z. Dávalos, M.A.V. Ribeiro da Silva, M. das D. M. C. Ribeiro da Silva, P. Cabildo, R. Claramunt.
TITULO: *Substituent effects on enthalpies of formation. Benzene derivatives.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 366 (2003). CLAVE=A

- 202.-** AUTORES: I. Corral, O. M3, and M. Y3nez
TITULO: *Structure and stability of $[H_4, C_2, N]^+$ singlet state cations. A comparison between DFT and high-level ab initio calculations.*
REF. REVISTA: Int. J. Quantum Chem. **91**, 438 (2003) CLAVE=A
- 203.-** AUTORES: I. Corral, O. M3, and M. Y3nez.
TITULO: *Agostic vs. π -interactions in complexes of ethynyl-silanes and ethynyl-germanes with Cu^+ in the gas phase.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 1370 (2003) CLAVE=A
- 204.-** AUTORES: J. Del Bene, S.A. Perera, R.J. Bartlett, M. Y3nez. , O. M3, I. Alkorta, and J. Elguero.
TITULO: *Two-Bond F-N Spin-Spin Coupling Constants ($^{2h}J_{N-F}$) across FH...N Hydrogen Bonds.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 3121 (2003) CLAVE=A
- 205.-** AUTORES: J. Del Bene, S.A. Perera, R.J. Bartlett, M. Y3nez. , O. M3, I. Alkorta, and J. Elguero.
TITULO: *Two-Bond N-F Spin-Spin Coupling Constants ($^{2h}J_{N-F}$) across $NH^+...F$ Hydrogen Bonds.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 3126 (2003) CLAVE=A
- 206.-** AUTORES: J. Del Bene, S.A. Perera, R.J. Bartlett, M. Y3nez. , O. M3, J. Elguero, and I. Alkorta.
TITULO: *Two-Bond ^{13}C - ^{15}N Spin-Spin Coupling Constants ($^{2h}J_{C-N}$) across C-H-N Hydrogen Bonds.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **107**, 3222 (2003) CLAVE=A
- 207.-** AUTORES: M. Esseffar, O. M3, and M. Y3nez.
TITULO: *Gas-phase reactivity of lactones. Structures and stability of their Cu^+ complexes.*
REF. REVISTA: Mol. Phys. **101**, 1249 (2003) CLAVE=A
- 208.-** AUTORES: I. Corral, O. M3, and M. Y3nez.
TITULO: *Binding energies of Cu^+ to saturated and α,β -unsaturated alkanes, silanes and germanes. The role of agostic interactions.*
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom. **227**, 401 (2003) CLAVE=A
- 209.-** AUTORES: A. Luna, O. M3, M. Y3nez, J.P. Morizur, E. Leclerc, B. Desmazières, V. Haldys, , J. Chamot-Rooke and J. Tortajada.
TITULO: *Specific reactivity of alkenes with transition metal cations. 1-Pentene- and 1-Octene- Cu^+ reactions in the gas phase.*
REF. REVISTA: Int. J. Mass. Spectrom. **228**, 359 (2003) CLAVE=A
- 210.-** AUTORES: J.F. Gal, P.C. Maria, M. Decouzon, O. M3, M. Y3nez, and J.-L. M. Abboud.
TITULO: *Lithium-Cation/ π complexes of aromatic systems. The effect of increasing the number of fused rings.*
REF. REVISTA: J. Am. Chem. Soc. **125**, 10394 (2003) CLAVE=A
- 211.-** AUTORES: P. Sanz, M. Y3nez, and O. M3.
TITULO: *Characterization of intramolecular hydrogen bonds and other weak intramolecular interactions on the basis of the topology of the charge density .*
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **5**, 2942 (2003) CLAVE=A
- 212.-** AUTORES: P. Sanz, M. Y3nez, and O. M3.

- TITULO: *Cyclization triggered by deprotonation. The gas-phase acidity of 1,8-Chalcogen-bridged naphthalenes.*
REF. REVISTA: ChemPhysChem **4**, 830 (2003) CLAVE=A
- 213.-** AUTORES: O. M6 and M. Y6ñez, J.F. Gal, P.C. Maria, M. Decouzon.
TITULO: *Enhanced Li⁺ Binding energies in alkylbenzene derivatives. The scorpion effect.*
REF. REVISTA: Chemistry European J. **9**, 4330 (2003) CLAVE=A
- 214.-** AUTORES: P. Sanz, M. Y6ñez, and O. M6.
TITULO: *Resonance Assisted Intramolecular Chalcogen-Chalcogen Interactions?*
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **9**, 4548 (2003) CLAVE=A
- 215.-** AUTORES: M.C. Sicilia, O. M6, M. Y6ñez, J.C. Guillemin, J.F. Gal and P.C. Maria.
TITULO: *Is Allylphosphine a Carbon or a Phosphorus base in the gas phase?.*
REF. REVISTA: Eur. J. Mass Spectrom. **9**, 257 (2003) CLAVE=A
- 216.-** AUTORES: I. Corral, O. M6, and M. Y6ñez
TITULO: *The importance of agostic-type interactions on the gas- phase of saturated and α,β -unsaturated alkanes, silanes and germanes towards Ni⁺.*
REF. REVISTA: New J. Chem. **27**, 1657 (2003) CLAVE=A
- 217.-** AUTORES: A. El Firdoussi, M. Esseffar, W. Bouab, A. Lamsabhi, J.L.M. Abboud, O. M6, and M. Y6ñez.
TITULO: *Basicity of Lactones and cyclic ketones towards I₂ and ICl. An experimental and theoretical study.*
REF. REVISTA: New J. Chem. **27**, 1741 (2003) CLAVE=A
- 218.-** AUTORES: I. Corral, O. M6, M. Y6ñez, A. Scott, and L. Radom
TITULO: *The Interaction between Neutral Molecules and Ca²⁺: An Assessment of Theoretical Procedures.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **107**, 10456 (2003) CLAVE=A
- 219.-** AUTORES: A. M. Lamsabhi, M. Alcam6, O. M6, and M. Y6ñez.
TITULO: *Gas-Phase Reactivity of uracil, 2-thiouracil, 4-thiouracil, and 2,4-dithiouracil towards the Cu⁺ cation: a DFT study.*
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **4**, 1011 (2003) CLAVE=A
- 220.-** AUTORES: J.-Y. Salpin, J. Tortajada,, M. Alcam6, O. M6 and M. Y6ñez.
TITULO: *Optimization of extended basis sets and assessment of different theoretical schemes for Pb containing compounds.*
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **383**,561 (2004) CLAVE=A
- 221.-** AUTORES: J. Del Bene, J. Elguero, I. Alkorta, M. Y6ñez, and O. M6.
TITULO: *¹⁹F-¹⁹F Spin-Spin Coupling Constant surfaces for (HF)₂ clusters: The orientation and distance dependence of the sign and magnitude of J_{F-F}.*
REF. REVISTA: J. Chem Phys. **120**, 3237 (2004) CLAVE=A
- 222.-** AUTORES: A. Palacios, F. Mart6n, O. M6, M. Y6ñez, and Z. B. Maksic

- TITULO: *Stable doubly charged positive ions formed by direct attachment of alpha particles to HCN and HNC.*
REF. REVISTA: Phys. Rev. Lett. **92**, 133001 (2004) CLAVE=A
- 223.- AUTORES: M.A.V. Ribeiro da Silva, M. das D. M. C. Ribeiro da Silva, L.M.P.F. Amaral, P. Jiménez, M.V. Roux, J.Z. Dávalos, M. Temprano, P. Cabildo, R. Claramunt, J. Elguero, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Experimental thermochemical study of two 2-alkylbenzimidazole isomers (alkyl = propyl and isopropyl).*
REF. REVISTA: J. Chem. Thermo. **36**, 533 (2004). CLAVE=A
- 224.- AUTORES: J. Tortajada, B. Amekraz, M. Alcamí, A. Luna, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Unimolecular reactivity of strong metal cation complexes in the gas phase. Ethylenediamine-Cu⁺*
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **10**, 2927 (2004) CLAVE=A
- 225.- AUTORES: P. Jiménez, M.V. Roux, J.Z. Dávalos, M. Temprano, M.A.V. Ribeiro da Silva, M. das D. M. C. Ribeiro da Silva, L.M.P.F. Amaral, P. Cabildo, R. Claramunt, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero.
TITULO: *Substituent and ring effects on enthalpies of formation: 2-methyl- and 2-ethyl-benzimidazol vs. benzene- and imidazole-derivatives.*
REF. REVISTA: Mol. Phys. **102**, 711 (2004). CLAVE=A
- 226.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez
TITULO: *Bonding and Bonding Perturbation in Ion-Molecule Interactions in the Gas Phase.*
REF. REVISTA: Encyclopedia of Computational Chemistry. Published on line
URL: <http://www.mrw.interscience.wiley.com/ecc/articles/cn0062/frame.html> CLAVE=CL
- 227.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez
TITULO: *The importance of non-conventional structures in the binding of Ni⁺ to ethynyl-silanes and ethynyl-germanes.*
REF. REVISTA: Theoret. Chem. Accounts. **112**, 298 (2004) CLAVE=A
- 228.- AUTORES: M. Alcamí, A. Luna, O. Mó, J. Tortajada and M. Yáñez
TITULO: *A theoretical survey of the potential energy surface of Ethylenediamine + Cu⁺ reactions.*
REF. REVISTA: J. Phys.Chem. A **108**, 8367 (2004) CLAVE=A
- 229.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez
TITULO: *Theoretical survey of the potential energy surfaces associated with the N⁺(³P, ¹D) + C₂H₄ reactions in the gas phase.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **108**, 9762 (2004) CLAVE=A
- 230.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, M. Yáñez, J-Y. Salpin, J. Tortajada and L. Radom
TITULO: *Gas-Phase Reactions between Urea and Ca²⁺: The importance of Coulomb explosions.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **108**, 10080 (2004) CLAVE=A
- 231.- AUTORES: A. El Firdoussi, M. Esseffar, W. Bouab, J.L.M. Abboud, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Push-pull electronic effects in charge-transfer complexes. The case of N-H and N-Me lactams.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **108**, 10568 (2004) CLAVE=A
- 232.- AUTORES: A. M. Lamsabhi, M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, and J. Tortajada.
TITULO: *Cu²⁺ association to uracil and its thio-derivatives. A theoretical study.*
REF. REVISTA: Chem. Phys. Chem. **5**, 1871-78 (2004) CLAVE=A

- 233.- AUTORES: I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, M. Yáñez, and J. Del Bene.
TITULO: *Do coupling constants and chemical shift provide evidence for the existence of Resonance Assisted Hydrogen Bonds (RAHB)?*
REF. REVISTA: Mol. Phys. **102**, 2563 (2004) CLAVE=A
- 234.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez
TITULO: *Li⁺ vs. Cu⁺ association to toluene, phenyl-silane and phenyl-germane. Conventional vs. non-conventional π -complexes.*
REF. REVISTA: Eur. J. Mass Spectrom. **10**, 921 (2004) CLAVE=A
- 235.- AUTORES: E. Quintanilla, J.Z. Dávalos, J.L.M. Abboud, M. Alcamí, M.P. Cabildo, R. Claramunt, J. Elguero, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Why does pivalaldehyde (trimethylacetaldehyde) unexpectedly seem more basic than 1-adamantanecarbaldehyde in the gas-phase?. A FT-ICR and high-level ab initio study.*
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **11**, 1826 (2005) CLAVE=A
- 236.- AUTORES: J.C. Guillemin, E. H. Riague, J.F. Gal, P.C. Maria, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Acidity trends in α,β -unsaturated sulfur, selenium and tellurium derivatives. Comparison with C-, Si-, Ge-, Sn-, N-, P-, As-, and Sb-containing analogs.*
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **11**, 2145 (2005) CLAVE=A
- 237.- AUTORES: J. Del Bene, J. Elguero, I. Alkorta, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Ab initio study of the influence of trimer formation on one and two-bond spin-spin coupling constants across X-H-Y hydrogen bonds: Complexes AH:XH:YH₃ for A,X = ¹⁹F, ³⁵Cl and Y = ¹⁵N, ³¹P.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem A. **109**, 2350 (2005) CLAVE=A
- 238.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, and J.C. Guillemin.
TITULO: *A theoretical study on the dimers of Aminoacrylonitrile (3-Amino-2-Propenenitrile), a compound of astrochemical interest.*
REF. REVISTA: Arkivoc **IX**, 239 (2005) CLAVE=A
- 239.- AUTORES: O. Picazo, I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Chiral Recognition in phosphinic acids dimers.*
REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **18**, 491 (2005) CLAVE=A
- 240.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, M. Eckert-Maksic, Z.B. Maksic, I. Alkorta and J. Elguero.
TITULO: *Periodic trends in bond dissociation energies. A theoretical study.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem A **109**, 4359 (2005) CLAVE=A
- 241.- AUTORES: A. Benidar, J.C. Guillemin, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Infrared Spectra of a Species of Astrochemical Interest: Aminoacrylonitrile (3-Amino-2-Propenenitrile).*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **109**, 4705 (2005) CLAVE=A
- 242.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, J. Del Bene, I. Alkorta, and J. Elguero.
TITULO: *Cooperativity and proton transfer in hydrogen-bonded triads.*
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **6**, 1411 (2005) CLAVE=A
- 243.- AUTORES: A. Palacios, I. Corral, O. Mó, F. Martín and M. Yáñez

- TITULO: *On the existence and lifetimes of Cu²⁺ complexes with water, ammonia and hydrogen cyanide.*
REF. REVISTA: J. Chem. Phys. **123**, 014315 (1-5) (2005) CLAVE=A
- 244.- AUTORES: J. Zevallos, A. Toro-Labbé, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *The role of Intramolecular Hydrogen Bond vs. other weak interactions on the conformation of hyponitrous acid and its mono- and dithio-derivatives.*
REF. REVISTA: Struct. Chem. **16**, 295 (2005) CLAVE=A
- 245.- AUTORES: M.A.V. Ribeiro da Silva, M.das D. M. C. Ribeiro da Silva, L.M.P.F. Amaral, J. Elguero, P. Jiménez, M.V. Roux, J.Z. Dávalos, M. Temprano, P. Cabildo, R. Claramunt, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Thermochemical Properties of Two Benzimidazole Derivatives: 2-Phenyl- and 2-Benzylbenzimidazole.*
REF. REVISTA: J. Chem. Therm. **37**, 1168 (2005). CLAVE=A
- 246.- AUTORES: I. Alkorta, J. Elguero, O. Mó, M. Yáñez, and J. Del Bene.
TITULO: *Are RAHBs “resonance assisted”? A theoretical NMR study.*
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **411**, 411 (2005) CLAVE=A
- 247.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, M. Yáñez and L. Radom
TITULO: *Why the Ca²⁺ and K⁺ binding energies of formaldehyde and ammonia are reversed with respect to their proton affinities?*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **109**, 6735 (2005) CLAVE=A
- 248.- AUTORES: P. Sanz, M. Yáñez, and O. Mó.
TITULO: *The NICS(Nucleus-Independent Chemical Shift) as a probe of the relative stability of β -Chalcogenovinylaldehydes stabilized through intramolecular chalcogen-chalcogen interactions.*
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **730**, 217 (2005) CLAVE=A
- 249.- AUTORES: A. El Firdoussi, M. Esseffar, W. Bouab, J.L.M. Abboud, O. Mó, M. Yáñez and M.F. Ruasse.
TITULO: *Density Functional Theory Study of the Hydrogen Bond Interaction Between Lactones, Lactams and Methanol.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **109**, 9141 (2005) CLAVE=A
- 250.- AUTORES: X. Solans, M. Sodupe, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero.
TITULO: *Hydrogen bond vs. Proton transfer in médium-size zeolitas. A Theoretical Study.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. B **109**, 19301 (2005) CLAVE=A
- 251.- AUTORES: M. Güell, J. Poater, J. M. Luis, O. Mó, M. Yáñez and M. Solà
TITULO: *An aromaticity analysis of Lithium-cation/ π complexes of aromatic systems.*
REF. REVISTA: ChemPhysChem **6**, 2552 (2005) CLAVE=A
- 252.- AUTORES: G. Bouchoux, D. Leblanc, W. Bertrand, T.B. McMahon, J.E. Szulejko, F. Berruyer- Penaud, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Protonation thermochemistry of selected hydroxy and methoxy carbonyl molecules.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **109**, 11851 (2005) CLAVE=A
- 253.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez
TITULO: *Analysis of the bonding in XH₃-Cu⁺ (X=B,Al,Ga) complexes..*
REF. REVISTA: Int. J. Quantum Chem. **106**, 659 (2006) CLAVE=A

- 254.- AUTORES: A. M. Lamsabhi, M. Alcamí, O. Mó, M. Yáñez, and J. Tortajada.
 TITULO: *On the gas-phase deprotonation of Uracil-Cu²⁺ and Thiouracil-Cu²⁺ Complexes.*
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **110**, 1943 (2006) CLAVE=A
- 255.- AUTORES: L. Infantes, O. Mó, M. Yáñez, M.V. Roux, P. Jiménez, J.Z. Dávalos, M. Temprano, M.A.V. Ribeiro da Silva, M.das D. M. C. Ribeiro da Silva, L.M.P.F. Amaral, P. Cabildo, R. Claramunt, and J. Elguero.
 TITULO: *Substituent Effects on Enthalpies of Formation of Nitrogen Heterocycles: 2-Substituted Benzimidazoles and Related Compounds.*
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **110**, 2535 (2006). CLAVE=A
- 256.- AUTORES: C. Trujillo, A. M. Lamsabhi, O. Mó, and M. Yáñez.
 TITULO: *The reactions of F⁺(³P) and F⁺(¹D) with silicon oxide. Possibility of spin-forbidden processes.*
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A. **110**, 7130 (2006) CLAVE=A
- 257.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez
 TITULO: *Cu⁺ association to some Ph-X (X=OH, NH₂, CHO, COOH, CF₃) phenyl derivatives. A comparison with Li⁺ complexes.*
 REF. REVISTA: Int. J. Mass. Spectrom. **255-256**, 20 (2006) CLAVE=A
- 258.- AUTORES: J. Del Bene, J. Elguero, I. Alkorta, M. Yáñez, and O. Mó.
 TITULO: *An ab initio study of ¹⁵N-¹¹B spin-spin coupling constants for borazine and selected derivatives.*
 REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **110**, 9959 (2006) CLAVE=A
- 259.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, M. Yáñez J-Y Salpin, J. Tortajada, D. Moran and L. Radom
 TITULO: *An experimental and theoretical investigation of glycine+ Ca²⁺ reactions in the gas phase*
 REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **12**, 6787 (2006) CLAVE=A
- 260.- AUTORES: J.F. Gal, P.C. Maria, O. Mó, M. Yáñez and D. Kuck.
 TITULO *Gaseous Complexes between Lithium Cation and Diphenylalkanes. The Pincer Effect.*
 REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **12**, 7676 (2006) CLAVE=A
- 261.- AUTORES: A. Luna, O. Mó, M. Yáñez J.F. Gal, P.C. Maria, and J.C. Guillemin.
 TITULO *Gas-phase protonation and deprotonation of acrylonitrile derivatives N≡C-CH=CH-X (X=CH₃, NH₂, PH₂, SiH₃).*
 REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **12**, 9254 (2006) CLAVE=A
- 262.- AUTORES: I. Corral, O. Mó, and M. Yáñez
 TITULO: *On the stability of non-conventional π-complexes between Ni⁺ and toluene, phenyl-silane and phenyl-germane*
 REF. REVISTA: J. Phys. Org. Chem. **19**, 495 (2006) CLAVE=A
- 263.- AUTORES: A. M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez, J. Tortajada, and J-Y Salpin.
 TITULO *Unimolecular reactivity of Uracil-Cu²⁺ complexes in the Gas-Phase*
 REF. REVISTA: ChemPhysChem. **8**, 181 (2007) CLAVE=A
- 264.- AUTORES: J.Z. Dávalos, R. Herrero, J.L.M. Abboud, O. Mó, and M. Yáñez.

- TITULO: *How can a carbon atom be covalently bound to five ligands?. The case of $\text{Si}_2(\text{CH}_3)_7^+$ or the beauty of symmetry.*
REF. REVISTA: *Angew. Chem. Int. Ed.* **46**, 381 (2007) CLAVE=A
- 265.- AUTORES: J. Del Bene, J. Elguero, I. Alkorta, M. Yáñez, and O. Mó.
TITULO: *Attacking Boron Nucleophiles: NMR Properties of 5-membered Diazaborole Rings.*
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. A* **111**, 419 (2007) CLAVE=A
- 266.- AUTORES: M. Esseffar, R. Herrero, E. Quintanilla, J.Z. Dávalos, , J.L.M. Abboud, M. Yáñez, and O. Mó.
TITULO: *Activation of the disulfide bond and chalcogen-chalcogen interactions. An experimental (FT-ICR) and computational study .*
REF. REVISTA: *Chemistry Eur. J.* **13**, 1796 (2007) CLAVE=A
- 267.- AUTORES: J. Del Bene, O. Mó, M. Yáñez, I. Alkorta, and J. Elguero.
TITULO: *Spin-Spin Coupling Constants for Iminoboranes RBNH, HBNR, and RBNR and Comparisons with Corresponding Isoelectronic Acetylenes RCCH and RCCR, for R = H, CH₃, NH₂, OH, and F.*
REF. REVISTA: *J. Chem. Theor. Comp.* **3**, 549 (2007) CLAVE=A
- 268.- AUTORES: E. Rincón, O. Mó, A. Toro-Labbé, and M. Yáñez.
TITULO: *Effect of Ni(II), Cu(II) and Zn(II) association on the keto-enol tautomerism of thymine.*
REF. REVISTA: *Phys. Chem. Chem. Phys.* **9**, 2531 (2007) CLAVE=A
- 269.- EDITORS: O. Mó, M. Yáñez.
TITULO: *Special Issue on "COMPUTATIONAL ORGANIC CHEMISTRY"*
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct. THEOCHEM*, **811** (2007) CLAVE=L
- 270.- AUTORES: O. Mó, M. Yáñez, J-Y Salpin, and J. Tortajada.
TITULO: *Thermochemistry, Bonding and Reactivity of Ni^+ and Ni^{2+} in the gas phase*
REF. REVISTA: *Mass Spectrom. Rev.* **26**, 474-516 (2007) CLAVE=A
- 271.- AUTORES: C. Trujillo, O. Mó, M. Yáñez, J-Y Salpin, and J. Tortajada.
TITULO: *Gas-Phase Reactions between Thiourea and Ca^{2+} . New evidences for the formation of $[\text{Ca}(\text{NH}_3)]^{2+}$ and other doubly charged species*
REF. REVISTA: *ChemPhysChem* **8**, 1330 (2007) CLAVE=A
- 272.- AUTORES: P. Sanz, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero
TITULO: *The structure of the enols of β -diketones and their nitrogen counterparts: a study on the nature of intramolecular hydrogen bonds.*
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. A* **111**, 3585 (2007) CLAVE=A
- 273.- AUTORES: C. Trujillo, O. Mó, M. Yáñez.
TITULO: *A Theoretical Study of hydration effects on the Prototropic Tautomerism of Selenouracils.*
REF. REVISTA: *Org. Biomol. Chem.* **5**, 3092 (2007) CLAVE=A
- 274.- AUTORES: P. Sanz, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero
TITULO: *Intramolecular hydrogen bond in hydroxymethylene and aminomethylene cyclobutanones and cyclobutenones and their nitrogen counterparts. Another example of non-Resonance Assisted Hydrogen Bonding..*
REF. REVISTA: *ChemPhysChem* **8**, 1950 (2007) CLAVE=A

- 275.- AUTORES: O. M6, M. Y6ñez, A. Mart6n-Pend6s, I. Alkorta, J. Elguero, and J. Del Bene
TITULO: *Unusual substituent effects on the bonding of iminoboranes.*
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **9**, 3970 (2007) CLAVE=A
- 276.- AUTORES: A. Luna, O. M6, M. Y6ñez, J.C. Guillemin, J.F. Gal, and P.C. Maria.
TITULO *Cyano substituent effects on enol and enethiol acidity and basicity: the protonation and deprotonation of 3-hydroxy-2-propenenitrile and its thio analogue.*
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom. **267**, 125 (2007) CLAVE=A
- 277.- AUTORES: J.A. G6mez, J.C. Guillemin, O. M6, and M. Y6ñez.
TITULO: *Strong Dissimilarities between the Gas-Phase Acidities of Saturated and α,β -Unsaturated Boranes and the corresponding Alanes and Gallanes.*
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **14**, 2201 (2008) CLAVE=A
- 278.- AUTORES: A. M. Lamsabhi, O. M6, M. Y6ñez, J. Tortajada, and J-Y Salpin.
TITULO: *Ni⁺ reactions with aminoacetonitrile, a potential pre-biological molecule precursor of glycine.*
REF. REVISTA: J. Mass Spectrom. **43**, 317 (2008) CLAVE=A
- 279.- AUTORES: A. Medina, C.G. Claessens, G.M. Aminur Rahman, A.M. Lamsabhi, O. M6, M. Y6ñez, D.M. Guldi and T. Torres.
TITULO: *Accelerating charge transfer in a triphenylamine-subphthalocyanine donor-acceptor system.*
REF. REVISTA: Chem. Comm. 1759-1761 (2008) CLAVE=A
- 280.- AUTORES: A. Cimas, J.A. G6mez, O. M6, M. Y6ñez and J-Y. Salpin.
TITULO *Computational study on the kinetics of the reaction between Ca²⁺ and Urea..*
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **456**, 156 (2008) CLAVE=A
- 281.- AUTORES: P. Sanz, O. M6, M. Y6ñez, and J. Elguero
TITULO: *Bonding in Tropolone, 2-Aminotropone and Aminotropoimine. No evidence of Resonance Assisted Hydrogen Bonding..*
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **14**, 4225 (2008) CLAVE=A
- 282.- AUTORES: C. Trujillo, O. M6, M. Y6ñez, J. Tortajada, and J-Y Salpin.
TITULO: *Selenourea-Ca²⁺ Reactions in the Gas-Phase. Similarities and dissimilarities with urea and thiourea..*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. B. **112**, 5479 (2008) CLAVE=A
- 283.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, O. M6, M. Y6ñez and R. Boyd.
TITULO: *Gas-phase Interactions of Calcium (Ca²⁺) with Seleno Derivatives of Uracil*
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **4**, 1002 (2008.) CLAVE=A
- 284.- AUTORES: C. Trujillo, A.M. Lamsabhi, O. M6, and M. Y6ñez.
TITULO *The importance of the oxidative character of doubly charged metal cations in binding neutral bases. [Urea-M]²⁺ and [Thiourea-M]²⁺ (M = Mg, Ca, Cu) Complexes.*
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **10**, 3229 (2008) CLAVE=A
- 285.- AUTORES: C. Trujillo, A. M. Lamsabhi, O. M6, M. Y6ñez, and J-Y. Salpin.

- TITULO *Interactions of Ca^{2+} with uracil and its thio derivatives in the gas phase* .
REF. REVISTA: Org. Biomol. Chem. **6**, 3695 (2008) CLAVE=A
- 286.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez, J-Y. Salpin, V. Haldys, J. Tortajada, J.C. Guillemin.
TITULO: *Ni^+ reactions with aminoacrylonitrile, a species of astrochemical relevance*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **112**, 10509 (2008) CLAVE=A
- 287.- AUTORES: M. Yáñez, O. Mó, I. Alkorta, and J. Del Bene.,
TITULO: *Structures, bonding, and one-bond B-N and B-h spin-spin coupling constants for a series of neutral and anionic five-membered rings containing BN bonds.*
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **4**, 1869 (2008) CLAVE=A
- 288.- AUTORES: C. Trujillo, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO *Why selenouracils are as basic as uracil but stronger acids in the gas phase?*
REF. REVISTA: ChemPhysChem **9**, 1715 (2008) CLAVE=A
- 289.- AUTORES: A. Eizaguirre, O. Mó, M. Yáñez, and J.C. Guillemin.
TITULO: *α,β -unsaturated and saturated derivatives of Be, Mg and Ca. Are they carbon or metal acids in the gas phase?*
REF. REVISTA: Chemistry Eur. J. **14**, 10423 (2008) CLAVE=A
- 290.- AUTORES: C. Trujillo, O. Mó, M. Yáñez, and B. Silvi.
TITULO *On the Bonding of selenocyanates and isoselenocyanates and their protonated derivatives.*
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **4**, 1593 (2008) CLAVE=A
- 291.- AUTORES: M. Hurtado, J.G. Contreras, A. Matamala, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Conformational analysis, magnetic properties and nitrogen inversion of N-substituted 1,3-oxazines.*
REF. REVISTA: New J. Chem. **32**, 2209 (2008) CLAVE=A
- 292.- AUTORES: A.M. Lamsabhi, O. Mó, S. Gutierrez-Oliva, P. Perez, A. Toro-Labbé, and M. Yáñez.
TITULO: *The mechanism of double proton transfer in dimers of uracyl and 2-thiouracyl The reaction force perspective.*
REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **30**, 389 (2009) CLAVE=A
- 293.- AUTORES: P. Sanz, O. Mó, M. Yáñez, and J. Elguero
TITULO: *The effects of C by N replacement on the hydrogen bonding of malonaldehyde: N-formylformimidic acid, N-(hydroxymethyl) formamide and related compounds.*
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **11**, 762 (2009) CLAVE=A
- 294.- AUTORES: M. Hurtado, O. Mó, M. Yáñez, and J.C. Guillemin.
TITULO: *Acidity enhancement of the cyclopentadiene cycle by PH_2 and AsH_2 substitution.*
REF. REVISTA: Croatica Chimica Acta. **82**, 1 (2009) CLAVE=A
- 295.- AUTORES: J.E. del Bene, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Substituent effects on B-N bonding and coupling constants in five-membered rings $N_3B_2H_4X$ and $N_2B_3H_4X$ for $X= H, F, \text{ and } Li$.*
REF. REVISTA: Croatica Chimica Acta. **82**, 149 (2009) CLAVE=A
- 296.- AUTORES: I. Alkorta, J. E. Del Bene, J. Elguero, O.Mó and M. Yáñez.

- TITULO: *A theoretical study of diborenes HRB=BRH for R = CO, NH₃, OH₂ PH₃, SH₂, ClH: Structures, energies and spin-spin coupling constants.*
REF. REVISTA: Theor. Chem. Acc. **124**, 186-195 (2009) CLAVE=A
- 297.-** AUTORES: P.Sanz, M. Yáñez, O.Mó, I. Alkorta, and J. Elguero.
TITULO: *Beryllium bonds, do they exist?.*
REF. REVISTA: J. Chem. Theor. Comp. **5**, 2763-2771 (2009) CLAVE=A
- 298.-** AUTORES: M. Esseffar, A. El Firdoussi, W. Bouab, J.L.M. Abboud, O. Mo, and M. Yáñez.
TITULO: *Combined Experimental and Theoretical Study on Hydrogen-Bonded Complexes between Cyclic Ketones, Lactones and Lactams and 3,4-Dinitrophenol*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **113**, 14711-14717 (2009) CLAVE=A
- 299.-** AUTORES: M. Hurtado, A.M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J.-C. Guillemin.
TITULO: *Are cyclopentadienylberyllium, magnesium and calcium hydrides carbon or metal acids in the gas phase?.*
REF. REVISTA: Dalton Trans. **39**, 4593-4601 (2010) CLAVE=A
- 300.-** AUTORES: M. Hurtado, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Homoselenocisteina. An Oxygen or a Selenium acid in the gas-phase?.*
REF. REVISTA: Can. J. Chem. **88**, 744-753 (2010) CLAVE=A
- 301.-** AUTORES: A.M. Lamsabhi, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Serine-Ca²⁺ vs. Serine-Cu²⁺ complexes. A theoretical perspective.*
REF. REVISTA: Can. J. Chem. **88**, 759-768 (2010) CLAVE=A
- 302.-** AUTORES: Alvaro Cimas, Inés Corral, Otilia Mó, Manuel Yáñez and Nazario Martín.
TITULO: *Hydrogen bonding in electronically excited states: A comparison between formic acid dimer and its mono-substituted thioderivatives.*
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **12**, 13037-46 (2010) CLAVE=A
- 303.-** AUTORES: José A. Gámez, Inés Corral, Otilia Mó and Manuel Yáñez.
TITULO: *Unexpected gas-phase ion chemistry results unraveled by computational chemistry.*
REF. REVISTA: Current Org. Chem. **14**, 1600-1611 (2010) CLAVE=A
- 304.-** AUTORES: Ibon Alkorta, José Elguero, Janet E. Del Bene, Otilia Mó, and Manuel Yáñez,
TITULO: *New insights into factors which influence B-N bonding in X: BH_{3-n}F_n and X: BH_{3-n}Cl_n for X= N₂, HCN, LiCN, H₂CNH, NF₃, NH₃ and n = 0-3: The importance of deformation.*
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **16**, 11897-11905 (2010) CLAVE=A
- 305.-** AUTORES: A. Benidar, J-C. Guillemin, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Infrared Spectra of a Species of Potential Prebiotic and Astrochemical Interest: Cyanoethenethiol (HS-CH=CH-CN).*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **114**, 9583-9588 (2010) CLAVE=A
- 306.-** AUTORES: A. Gonzalez-Castrillo, M. Hurtado, O. Mó, M. Yáñez, and J.C. Guillemin.
TITULO: *The role of hyperconjugative π -aromaticity on the enhanced acidity of CpXH₃ (X= C, Si, Ge) derivatives.*
REF. REVISTA: Mol. Phys. **108**, 2467-2476 (2010) CLAVE=A
- 307.-** AUTORES: Janet E. Del Bene, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez,

- TITULO: *Structural and Electronic Effects on One-bond Spin-spin Coupling Constants $^1J(B-N)$, $^1J(B-H)$, $^1J(B-F)$ for Complexes of Nitrogen Bases with BH_3 and its Fluoro-substituted Derivatives.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **114**, 12775-12779 (2010) CLAVE=A
- 308.-** AUTORES: A. Eizaguirre, O.Mó, M. Yáñez and R.J. Boyd
TITULO: *Effect of Sr^{2+} association on the tautomerization processes of uracil and its dithio- and diseleno-derivatives.*
REF. REVISTA: Org. Biomol. Chem. **9**, 423-431 (2011) CLAVE=A
- 309.-** AUTORES: Otilia Mó and Manuel Yáñez.
TITULO: *La Química Computacional en la Nueva Frontera.*
REF. REVISTA: Arbor **187**, 143-155 (2011) CLAVE=A
- 310.-** AUTORES: A. Eizaguirre, A.M. Lamsabhi, O.Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Assisted Intramolecular Proton Transfer in $(uracil)_2Ca^{2+}$ complexes*
REF. REVISTA: Theor. Chem. Acc. **128**, 457-464 (2011) CLAVE=A
- 311.-** AUTORES: Otilia Mó and Manuel Yáñez.
TITULO: *La Química Cuántica o la larga travesía del desierto*
REF. REVISTA: Gaceta de la RSEM **14**, 229-246 (2011) CLAVE=A
- 312.-** AUTORES: C. Trujillo, A. M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J.-Y. Salpin.
TITULO: *Unimolecular Reactivity upon collision of Uracil- Ca^{2+} complexes in Gas Phase: Comparison with uracil- M^+ ($M= H$, alkali metals) and uracil- M^{2+} ($M=Cu, Pb$) systems..*
REF. REVISTA: Int. J. Mass Spectrom. **306**, 27-36 (2011). CLAVE=A
- 313.-** AUTORES: A. Eizaguirre, O.Mó, M. Yáñez and J-Y. Salpin.
TITULO: *Modeling the interaction between peptide functions and Sr^{2+} : Formamide- Sr^{2+} reactions in the gas phase*
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **13**, 18409 (2011) CLAVE=A
- 314.-** AUTORES: M. Hurtado, A-M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J-C. Guillemin .
TITULO: *Stability trends and tautomerization of chalcocyclopentadienes. The role of aromaticity.*
REF. REVISTA: New J. of Chem. **35**, 2713-2719 (2011) CLAVE=A
- 315.-** AUTORES: A-M. Lamsabhi, M. Yáñez, O. Mó, C. Trujillo, F. Blanco, I. Alkorta, J. Elguero, E. Caballero, M.S. Rodríguez-Morgade, CG. Claessens and T. Torres.
TITULO: *TDDFT study of the UV-vis spectra of subporphyrazines and subphthalocyanines*
REF. REVISTA: Journal of Porphyrins and Phthalocyanines **15**, 1220-1230 (2011) CLAVE=A
- 316.-** AUTORES:, I. Corral, A.M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez.
TITULO: *Infrared spectra of charge-solvated vs. salt-bridge conformations of glycine-, serine- and cisteine- Ca^{2+} complexes.*
REF. REVISTA: Int. J. Quant. Chem. **112**, 2126-2134 (2012) CLAVE=A
- 317.-** AUTORES: M. Hurtado, A-M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J-C. Guillemin.
TITULO: *On the origin of the enhanced acidity of chalcocyclopentadienes(cyclopentadiene-chalcogenols) in the gas phase.*
REF. REVISTA: ChemPhysChem **13**, 1167-1172 (2012), Inside cover, VIP, CLAVE=A

- 318.-** AUTORES: Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, José Elguero.
TITULO: *Modulating the strength of hydrogen bonds through beryllium bonds.*
REF. REVISTA: J. Comp. Theor. Chem. **8**, 2293-2300 (2012) CLAVE=A
- 319.-** AUTORES: Goar Sanchez-Sanz, Ibon Alkorta, José Elguero, Manuel Yáñez, Otilia Mó.
TITULO: *Strong interactions between copper halides and unsaturated systems: new metallocycles? or the importance of deformation.*
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **14**, 11468-11477 (2012) CLAVE=A
- 320.-** AUTORES: A. Eizaguirre, O.Mó, M. Yáñez, J-Y. Salpin and J. Tortajada.
TITULO: *Modelling peptide-metal dication interactions: Formamide-Ca²⁺ reactions in the Gas Phase.*
REF. REVISTA: Org. Biomol. Chem. **10**, 7552-7561 (2012) CLAVE = A
- 321.-** AUTORES: A. Martin-Somer, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez
TITULO: *Unexpected Acidity Enhancement Triggered by AlH₃ Association to Phosphines.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem A. **116**, 6950-6954 (2012) CLAVE=A
- 322.-** AUTORES: A. Martin-Somer, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez
TITULO: *The importance of deformation on the strength of berillium bonds.*
REF. REVISTA: Comp and Theoret. Chem. **998**, 74-79 (2012) CLAVE=A
- 323.-** AUTORES: Laura Albrecht, Russell J. Boyd, Otilia Mó and Manuel Yáñez
TITULO: *Cooperativity between Hydrogen bonds and beryllium bonds in (H₂O)_nBeX₂ (n =1-3, X = H, F) complexes. A new perspective.*
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys.. **14**, 14540-14547 (2012) CLAVE=A
- 324.-** AUTORES: M. M. Vallejos, A-M. Lamsabhi*, N. M. Peruchena, O. Mó and M. Yáñez
TITULO: *Microsolvation of Morpholine, a bidentate base. The importance of cooperativity*
REF. REVISTA: J.Phys. Org. Chem. **25**, 1380-1390 (2012) CLAVE=A
- 325.-** AUTORES: M. Montero-Campillo, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez
TITULO: *Alkyl Mercury Compounds: An Assessment of DFT Methods.*
REF. REVISTA: Theoret. Chem. Acc. **132**, 1328-8 (2013) CLAVE=A
- 326.-** AUTORES: R. Verzeni, O. Mó, A. Cimas, I. Corral and M. Yáñez
TITULO: *MS-CASPT2 study of the low-lying electronic excited states of di-thiosubstituted formic acid dimers.*
REF. REVISTA: Theoret. Chem. Acc. **132**, 1338-8 (2013) CLAVE=A
- 327.-** AUTORES: Gavin S. Heverly-Coulson, Russell J. Boyd, Otilia Mó and Manuel Yáñez
TITULO: *Revealing unexpected mechanisms for nucleophilic attack on S-S and Se-Se bridges.*
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **19**, 3629-3638 (2013) CLAVE=A
- 328.-** AUTORES: A. Eizaguirre, O.Mó, M. Yáñez and J-Y. Salpin.
TITULO: *Unimolecular reactivity of the [Urea-Sr]²⁺ complex, a metastable dication in the gas phase: An experimental and theoretical perspective.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. B **117**, 2088-2095 (2013) CLAVE=A
- 329.-** AUTORES: M. Montero-Campillo, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez
TITULO: *UV-Vis Spectra Of Subporphyrazines And Subphthalocyanines With Aluminum*

And Gallium: A Time Dependent-DFT Study.

REF. REVISTA: ChemPhysChem. **14**, 915-922 (2013) CLAVE=A

- 330.-** AUTORES: Oriana Brea, Manuel Yáñez, Otilia Mó, and Al Mokhtar Lamsabhi.
TITULO: *On the stability of [(uracil)₂-Cu]²⁺ complexes in the gas phase. Different pathways for the formation of [(uracil-H)(uracil)-Cu]⁺ monocations.*
REF. REVISTA: Org. Biomol. Chem., **11**, 3862-3870 (2013) CLAVE=A
- 331.-** AUTORES: Cristina Trujillo, Goar Sánchez-Sanz, Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, and Manuel Yáñez,
TITULO: *Resonance assisted hydrogen bonds in open-chain and cyclic structures of malonaldehyde enol: A theoretical study.*
REF. REVISTA: J. Mol. Struct. **1048**, 138-151 (2013) CLAVE=A
- 332.-** AUTORES: M. Montero-Campillo, A-M. Lamsabhi, O. Mó and M. Yáñez
TITULO: *Modulating weak intramolecular interactions through the formation of beryllium bonds: complexes between squaric acid and BeH₂.*
REF. REVISTA: J. Mol. Mod. **19**, 2759-2766 (2013) CLAVE=A
- 333.-** AUTORES: Manuel Yáñez, Otilia Mó, Ibon Alkorta, José Elguero.
TITULO: *Can conventional Bases and Unsaturated Hydrocarbons be converted into gas-phase Superacids that are stronger than most of the known Oxyacids? The role of Beryllium Bonds.*
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **19**, 11637-11643 (2013) CLAVE=A
- 334.-** AUTORES: M. Hurtado, M. Monte-Caballero, A-M. Lamsabhi, M. Yáñez, O. Mó and J-Y Salpin.
TITULO: *Modelling interactions between an amino acid and a metal dication: cysteine-Ca(II) reactions in the gas phase.*
REF. REVISTA: ChemPlusChem **78**, 1124-1133 (2013), CLAVE=A
- 335.-** AUTORES: Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, and José Elguero.
TITULO: *Enhancing and modulating the intrinsic acidity of imidazole and pyrazol through Beryllium bonds.*
REF. REVISTA: J. Mol. Mod. **19**, 4139-4145 (2013) CLAVE=A
- 336.-** AUTORES: Gavin S. Heverly-Coulson, Russell J. Boyd, Otilia Mó and Manuel Yáñez
TITULO: *Dramatic substituent effects on the mechanisms of nucleophilic attacks on Se-S bridges.*
REF. REVISTA: J. Comp. Chem. **34**, 2537-2547 (2013) CLAVE=A
- 337.-** AUTORES: D. Nieto, S. Bruña, M. Montero-Campillo, J. Méndez, A.M. González-Vadillo, J. Perles, O. Mó and I. Cuadrado.
TITULO: *Unexpected mechanochemical and silica gel-mediated formation of the highly electro-poor 1-cyanocarbonylferrocene.*
REF. REVISTA: Chem. Comm. **49**, 9785-87 (2013) CLAVE=A
- 338.-** AUTORES: A-M. Lamsabhi, O. Mó, M. Yáñez and J-C. Guillemin.
TITULO: *Conformational preferences of RCH₂CH₂CN (R= CH₃, F, Cl) cyanides and their corresponding isocyanides.*
REF. REVISTA: Struct. Chem. **24**, 1789-1798 (2013), CLAVE=A
- 339.-** AUTORES: A. Benidar, R. Georges, J-C. Guillemin O. Mó and M. Yáñez.

- TITULO: *Infrared Spectra of Cyanoacetaldehyde (NCCH₂CHO), a Potential Prebiotic compound of Astrochemical Interest.*
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **14**, 2764-2771 (2013), CLAVE=A
- 340.-** AUTORES: Manuel Yáñez, Otilia Mó, Ibon Alkorta, and José Elguero.
TITULO: *Spontaneous ion-pair formation in the gas phase induced by Beryllium bonds*
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **590**, 22-26 (2013) CLAVE=A
- 341.-** AUTORES: M. Hurtado, A-M. Lamsabhi, M. Yáñez, and O. Mó.
TITULO: *Complexation of Ca²⁺ with Selenocysteine and its effects on its intrinsic acidity*
REF. REVISTA: Arkivoc **ii**, 207-223 (2014), CLAVE=A
- 342.-** AUTORES: Ibon Alkorta, José Elguero, Manuel Yáñez, and Otilia Mó.
TITULO: *Cooperativity in Beryllium Bonds*
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **16**, 4305-4312 (2014) CLAVE=A
- 343.-** AUTORES: A. Benidar, M. Montero-Campillo, A-M. Lamsabhi, O. Mó, J-C. Guillemin and M. Yáñez.
TITULO: *On the Structures, lifetimes, and Infrared Spectra of Alkyl Mercury Hydrides.*
REF. REVISTA: ChemPhysChem **15**, 530-541 (2014), CLAVE=A
- 344.-** AUTORES: Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, and José Elguero.
TITULO: *Spontaneous proton transfers induced by Beryllium bonds*
REF. REVISTA: Mol. Phys. **112**, 592-600 (2014) CLAVE=A
- 345.-** AUTORES: F. Aguilar-Galindo, M. Montero-Campillo, M. Yáñez, and O. Mó
TITULO: *On the Stability of [Pb(Proline)]²⁺ Complexes. Reconciling Theory with Experiment.*
REF. REVISTA: Chem. Phys. Lett. **598**, 91-95 (2014) CLAVE=A
- 346.-** AUTORES: M. Montero-Campillo, M. Yáñez, A-M. Lamsabhi, and O. Mó
TITULO: *Spontaneous H₂ Loss through the Interaction of Squaric Acid Derivatives and BeH₂.*
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. **20**, 5309-5316 (2014) CLAVE=A
- 347.-** AUTORES: Laura Albrecht, Russell J. Boyd, Otilia Mó and Manuel Yáñez
TITULO: *Changing weak halogen bonds into strong ones through cooperativity with beryllium bonds.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **118**, 4205-4213 (2014) CLAVE=A
- 348.-** AUTORES: K. Lemishko, M. Montero-Campillo, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *The Behavior of Carboxylic Acids Upon Complexation With Beryllium Compounds.*
REF. REVISTA: J. Phys. Chem. A **118**, 5720-5726 (2014) CLAVE=A
- 349.-** AUTORES: A. Martin-Somer, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *Are Boryl radicals from amine- and phosphine-boranes the most stable radicals?.*
REF. REVISTA: ChemPhysChem. **15**, 2288-2294 (2014) CLAVE=A
- 350.-** AUTORES: E. Fernandez Villanueva, O. Mó, and M. Yáñez.
TITULO: *On the existence and Characteristics of π -Berilium bonds.*
REF. REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **16**, 17531-17536 (2014) CLAVE=A
- 351.-** AUTORES: M. Hurtado, O. Mó, M. Yáñez, B. Herrera, and A-M. Lamsabhi.
TITULO: *New insights into the gas-phase unimolecular fragmentations of [Cysteine-Ca]²⁺*

complexes.

REF. REVISTA: Comp. Theor. Chem. **1047**, 38-46 (2014) CLAVE=A

- 352.-** AUTORES: A. Martin-Somer, M.M. Montero-Campillo, O. Mó, M. Yáñez, I. Alkorta and J. Elguero.
TITULO: *Some Interesting Features of Non-Covalent Interactions*
REF. REVISTA: Croat Chem.Acta. **87**,291-306 (2014) CLAVE=A
- 353.-** AUTORES: Kathy J. Chen, Otilia Mó, Manuel Yáñez, and Inés Corral
TITULO: *Can transition metals and group II mono- and dications discriminate between homo- and heterochiral XYYX' dimers (X,X'=H,Me; Y=O,S,Se)?*
REF. REVISTA: Croat Chem.Acta. **87**,481-493 (2014) CLAVE=A
- 354-** AUTORES: Ibon Alkorta, José Elguero, Otilia Mó, Manuel Yáñez, and Janet E. Del Bene.
TITULO: *Using Beryllium Bonds to Change Halogen Bonds From Traditional to Chlorine-shared to Ion-pair.*
REF. REVISTA: PCCP **17**, 2259-2267 (2015) CLAVE=A
- 355.-** AUTORES: A. Martin-Somer, O. Mó, M. Yáñez and JC Guillemin.
TITULO: *Acidity enhancement of unsaturated bases of the group 15 by association with borane and beryllium dihydride. Unexpected boron and beryllium Bronsted acids.*
REF. REVISTA: Dalton Trans. **44**, 1193-1202 (2015) DOI: 10.1039/c4dt02292k
CLAVE=A
- 356.-** AUTORES: M.M. Montero-Campillo, S. Bruña, I. Cuadrado, and O. Mó
TITULO: *Intervaleance Charge Transfer Across Non Covalent Interactions On Vinyl Silyl Biferrocenyl Compounds.*
REF. REVISTA: Comp. Theor. Chem. **1053**, 281-288 (2015)
- 357.-** AUTORES: A-M. Lamsabhi, S. Gutierrez-Oliva, O. Mó, A. Toro-Labbé and M. Yáñez
TITULO: *Effects of the Ionization in the Tautomerism of Uracil: a new Perspective.*
REF. REVISTA: J. Comp.Theoret. Chem. (submitted) CLAVE=A
- 358.-** AUTORES: J-F. Gal, M. Yáñez, O. Mó,
TITULO: *The aluminum mono-cation basicity and affinity scales.*
REF. REVISTA: Eur. J. Mass Spectr. (submitted) CLAVE=A
- 359.-** AUTORES: Oriana Brea, Otilia Mó, Manuel Yáñez, Ibon Alkorta, José Elguero.
TITULO: *Creating σ -holes trough the formation of berillium bonds.*
REF. REVISTA: Chem. Eur. J. (to be submitted) CLAVE=A

ESTANCIAS EN CENTROS EXTRANJEROS
(superiores a cuatro semanas)

CENTRO: Carnegie- Mellon University

LOCALIDAD: Pittsburgh PAIS: EEUU AÑO: 1974-76 DURACION: 2 años

TEMA: Estancia postdoctoral con el Prof. Pople

CENTRO: Sydney University

LOCALIDAD: Sydney PAIS: Australia AÑO: 2003 DURACION: 3 meses

TEMA: Visiting Professor en el grupo del Profesor Leo Radom

CENTRO: Université d'Evry val d'Essonne

LOCALIDAD: Evry PAIS: Francia AÑO: 2004 DURACION: 1 mes

TEMA: Visiting Professor en el grupo de la Profesora Jeanine Tortajada

CENTRO: Université d'Evry val d'Essonne

LOCALIDAD: Evry PAIS: Francia AÑO: 2012 DURACION: 3 meses

TEMA: Sabatico en el grupo de la Profesora Jeanine Tortajada

CENTRO: Dalhousie University

LOCALIDAD: Dalhousie PAIS: Canada AÑO: 2012 DURACION: 3 meses

TEMA: Visiting Professor en el grupo del Profesor Russell Boyd

CONGRESOS

-
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicacion Invitada
CONGRESO: Euchem Conference on Ion Chemistry. Gaseous vs. Solvated Ions
LUGAR DE CELEBRACION: Lido di Ostia AÑO: 1982
-
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicacion Invitada
CONGRESO: Symposium on the Chemistry of Heterocyclic Compounds (VIIIth) and of Nucleic Acid Components
LUGAR DE CELEBRACION: Praga (Checoslovaquia) AÑO: 1984
-
- TIPO DE PARTICIPACION: Miembro del Comité Organizador
CONGRESO: First Europhysics Summer School on Chemical Physics
LUGAR DE CELEBRACION: Santander (España) AÑO: 1986
-
- TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada
CONGRESO: 12^{eme} Colloque sur la Physique des Collisions Atomiques et Electroniques.
LUGAR DE CELEBRACION: Caen (Francia) AÑO: 1988
-
- TIPO DE PARTICIPACION: Miembro del Comité Organizador
CONGRESO: Third Europhysics Summer School on Chemical Physics
LUGAR DE CELEBRACION: Santander (España) AÑO: 1988
-
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada.
CONGRESO: Second Euchem Conference on the Gas Phase Ion Chemistry. Structure and Stereochemistry.
LUGAR DE CELEBRACION: Frascati-Roma (Italia) AÑO: 1989
-
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: Forty Years of Quantum Chemistry. An International Conference in Honor of Prof. J.A. Pople.
LUGAR DE CELEBRACION: Athens, Georgia (U.S.A.) AÑO: 1989
-
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: XIX Congreso Internazionale dei Chimici Teorici dei Paesi di Espressione Latina.
LUGAR DE CELEBRACION: Roma (Italia) AÑO: 1990
-
- TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de la Sesión de Clausura.
CONGRESO: I South European Conference of the Atomic and Molecular Physics.
LUGAR DE CELEBRACION: Gandia (España) AÑO: 1992
-
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: XX Congreso de Químicos Teóricos de los Países de expresión Latina.
LUGAR DE CELEBRACION: Mérida (Venezuela) AÑO: 1992
-
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: The Third World Congress of Theoretical Organic Chemists (WATOC'93)
LUGAR DE CELEBRACION: Toyohashi (Japón) AÑO: 1993
-
- TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: 8th International Congress of Quantum Chemistry
LUGAR DE CELEBRACION: Praga (Republica Checa, junio de 1994) AÑO: 1994
-
- TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada

CONGRESO: The 5th European Symposium on Organic Reactivity. ESOR-V
LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Compostela (España) AÑO: 1995

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: Recent Theoretical and Experimental Advances in Hydrogen-Bonded Clusters
LUGAR DE CELEBRACION: Elounda Creta junio de 1994) AÑO: 1997

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada
CONGRESO: Hydrogen Transfer: Experiment and Theory
LUGAR DE CELEBRACION: Berlin (Alemania) AÑO: 1997

TIPO DE PARTICIPACION: Secretary of the Organizing Committee
CONGRESO: Workshop on Computational Chemistry
LUGAR DE CELEBRACION: Miraflores de la Sierra, Madrid (España) AÑO: 1998

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: XXIV QUITEL
LUGAR DE CELEBRACION: Puebla de los Angeles (Mexico) AÑO: 1998

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: International Symposium on Gas-Phase Ion Chemistry and Physics
LUGAR DE CELEBRACION: Rome (Italy) AÑO: 1998

TIPO DE PARTICIPACION: Profesora Invitada
CONGRESO: International Conference in Honor John A. Pople.
LUGAR DE CELEBRACION: Amelia Island Florida (USA) AÑO: 1999

TIPO DE PARTICIPACION: Secretary of the Organizing Committee
CONGRESO: International Symposium on Physical Organic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACION: Miraflores de la Sierra, Madrid (España) AÑO: 1999

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: 5th World Congress of Theoretically Oriented Chemists.
LUGAR DE CELEBRACION: Londres (Reino Unido) AÑO: 1999

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: Xth International Congress of Quantum Chemistry.
LUGAR DE CELEBRACION: Menton (Francia) AÑO: 2000

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: 15th International Mass Spectrometry Conference.
LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (España) AÑO: 2000

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: Third European Conference on Computational Chemistry EUCCO-CC3.
LUGAR DE CELEBRACION: Budapest (Hungria) AÑO: 2000

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: International Conference on: Electronic Structure: Prediction and Applications.
LUGAR DE CELEBRACION: San Sebastián (España) AÑO: 2000

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: 8th European Symposium on Organic Reactivity.
LUGAR DE CELEBRACION: Cavtat (Dubrovnik) (Croatia) AÑO: 2001

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada
CONGRESO: Electronic Structure and Chemical Reactivity.
LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (España) AÑO: 2001

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: 4th European Conference on Computational Chemistry.
LUGAR DE CELEBRACION: Assisi (Italia) AÑO: 2002

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: Electronic Structure Principles and Applications (ESPA2002).
LUGAR DE CELEBRACION: Sevilla (España) AÑO: 2002

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: HALCHEM Internacional Meeting
LUGAR DE CELEBRACION: Cerdeña (Italia) AÑO: 2002

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: Gordon Research Conference: Gaseous Ions: Structures, Energetics & Reactions
LUGAR DE CELEBRACION: Ventura, California (USA) AÑO: 2003

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitadas
CONGRESO: Modelling Chemical Reactivity: from gas phase to solution and enzymes.
LUGAR DE CELEBRACION: Nancy (Francia) AÑO: 2003

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: XIth Internacional Congreso of Quantum Chemistry 2003
LUGAR DE CELEBRACION: Bonn (Alemania) AÑO: 2003

TIPO DE PARTICIPACION: Miembro del Comité Científico
CONGRESO: 29th Congres Internacional des Chimistes Theoriciens d'Expression Latine
LUGAR DE CELEBRACION: Marrakech (Marruecos) AÑO: 2003

TIPO DE PARTICIPACION: Chairperson de Sesión
CONGRESO: 5th European Conference on Computacional Chemistry (EUCOCC5)
LUGAR DE CELEBRACION: La Londe les Maures (Francia) AÑO: 2004

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: Molecular Quantum Mechanics: The No Nonsense Path to Progress
LUGAR DE CELEBRACION: Cambridge (Inglaterra) AÑO: 2004

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada
CONGRESO: XXX Congreso Internacional de Quimicos Teóricos de Expresión Latina
LUGAR DE CELEBRACION: Oporto (Portugal) AÑO: 2004

TIPO DE PARTICIPACION: Plenary Lecture
CONGRESO: Electronic Structure, Principles and Applications (ESPA2004)
LUGAR DE CELEBRACION: Valladolid (España) AÑO: 2004

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: 7th Congreso of the World Association of Theoretical Oriented Chemists (WATOC 2005)
LUGAR DE CELEBRACION: Ciudad del Cabo (Sudáfrica) AÑO: 2005

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada
CONGRESO: Symposium in Honor of J.A. Pople. 229th ACS National Meeting
LUGAR DE CELEBRACION: San Diego, CA (USA) AÑO: 2005

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: 10th European Symposium on Organic Reactivity
LUGAR DE CELEBRACION: Roma (Italia) AÑO: 2005

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: International Chemical Congress of Pacific basin Societies (Pacifichem2005)
LUGAR DE CELEBRACION: Honolulu (USA) AÑO: 2005

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada
CONGRESO: 89th Canadian Chemistry Conference
LUGAR DE CELEBRACION: Halifax (Canada) AÑO: 2006

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: Electronic Structure, Principles and Applications (ESPA2006)
LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Compostela (España) AÑO: 2006

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación invitada
CONGRESO: 6th European Conference on Computational Chemistry (EUCC6)
LUGAR DE CELEBRACION: Tale (Eslovaquia) AÑO: 2006

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación invitada
CONGRESO: 9th European Conference on Atoms Molecules & Photons (ECAMP IX)
LUGAR DE CELEBRACION: Hersonissos, Creta (Grecia) AÑO: 2007

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación invitada
CONGRESO: Molecular Quantum Mechanics: Analytic Gradients and Beyond
LUGAR DE CELEBRACION: Budapest (Hungria) AÑO: 2007

TIPO DE PARTICIPACION: Presidenta de Sesión
CONGRESO: 3rd Symposium on Theoretical Biophysics (TheoBio-07)
LUGAR DE CELEBRACION: Cetraro, Calabria (Italia) AÑO: 2007

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia invitada
CONGRESO: XXXI Reunión Bienal de la RSEQ
LUGAR DE CELEBRACION: Toledo (España) AÑO: 2007

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación invitada
CONGRESO: Isolated Biomolecules and Biomolecular Interactions (IBBI08)
LUGAR DE CELEBRACION: Valladolid (España) AÑO: 2008

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación invitada
CONGRESO: XXV QUITEL

LUGAR DE CELEBRACION: S. Andrés (Colombia)

AÑO: 2009

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada

CONGRESO: Molecular Quantum Mechanics 2010. In honor of H.F. Schaefer

LUGAR DE CELEBRACION: Berkeley, California (EEUU)

AÑO: 2010

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesion

CONGRESO: ESPA-2010. Electronic Structure Principles and Applications.

LUGAR DE CELEBRACION: Oviedo (Spain)

AÑO: 2010

TIPO DE PARTICIPACION: Chairman de Sesion

CONGRESO: ECAMP 2010. European Conference in Atoms, Molecules and Photons.

LUGAR DE CELEBRACION: Salamanca (Spain)

AÑO: 2010

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada

CONGRESO: Canadian Society of Chemistry (CSC 2011) Conference

LUGAR DE CELEBRACION: Montreal (Canada)

AÑO: 2011

TIPO DE PARTICIPACION: Co-presidente del Comité Organizador

CONGRESO: World Association of Theoretical and Computational Chemists. (WATOC-2011)

LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Compostela (Spain)

AÑO: 2011

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada.

CONGRESO: Modeling Interactions in Biomolecules V.

LUGAR DE CELEBRACION: Kutná Hora (Republica Checa)

AÑO: 2011

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada.

CONGRESO: 4th Annual Meeting of the COST action CUSPEL.

LUGAR DE CELEBRACION: Cluj-Napoca (Rumania)

AÑO: 2012

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicacion Invitada

CONGRESO: Canadian Society of Chemistry (CSC 2012) Conference

LUGAR DE CELEBRACION: Calgary (Canada)

AÑO: 2012

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada

CONGRESO: ESPA-2012. Electronic Structure Principles and Applications.

LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (Spain)

AÑO: 2012

TIPO DE PARTICIPACION: Chairperson of session

CONGRESO: Quantum Chemistry in the Solid State: Magnetic Coupling and Excited States. Symposium in honor of Ria Broer.

LUGAR DE CELEBRACION: Groningen (The Netherlands)

AÑO: 2012

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada

CONGRESO: Modeling and Design of Molecular Materials 2012.

LUGAR DE CELEBRACION: Wroclaw (Poland)

AÑO: 2012

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada

CONGRESO: Theoretical Chemistry in Spain told by women. .

LUGAR DE CELEBRACION: Tarragona (Spain)

AÑO: 2013

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada

CONGRESO: 7th Molecular Quantum Mechanics.

LUGAR DE CELEBRACION: Lugano (Suiza)

AÑO: 2013

TIPO DE PARTICIPACION: Chairperson of session

CONGRESO: XXIX-QUITEL-2013.

LUGAR DE CELEBRACION: Granada (España)

AÑO: 2013

TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia Invitada

CONGRESO: XVIII Workshop in "Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology

LUGAR DE CELEBRACION: Paraty, Rio de Janeiro (Brasil)

AÑO: 2013

TIPO DE PARTICIPACION: Chairperson of session
CONGRESO: 9° ESPA- Electronic Structure Principles and Applications
LUGAR DE CELEBRACION: Badajoz (Spain)

AÑO: 2014

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Invitada
CONGRESO: 97th Canadian Chemistry Conference 2014
LUGAR DE CELEBRACION: Vancouver (Canada)

AÑO: 2014

TIPO DE PARTICIPACION: Chairwoman de Sesión
CONGRESO: Xth WATOC
LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Chile (Chile)

AÑO: 2014

TESIS DOCTORALES DIRIGIDAS

TITULO: Caracterización de Enlaces de Hidrógeno Inter e Intramoleculares. Estudio Teórico de Casos Significativos
DOCTORANDA: Leticia González Herrero
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid
AÑO: 1998
FACULTAD: Ciencias
CALIFICACION: Apto cum Laude por Unanimidad

TITULO: Química en Fase Gas de los Cationes Halógeno: Estudio Teórico de las Reacciones $F^+(^3P, ^1D)$ y $Cl^+(^3P, ^1D)$ con H_2O y con H_2S .
DOCTORANDA: Mercedes Manuel García
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid
AÑO: 1998
FACULTAD: Ciencias
CALIFICACION: Apto cum Laude por Unanimidad

TITULO: Contribution a l'étude theorique par les méthodes ab initio des mecanismes reactionnels de processus interstellaires.
DOCTORANDO: Fatima Ijjaali
UNIVERSIDAD: Cadi Ayyad
AÑO: 2002
FACULTAD: Sciences
CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude por Unanimidad

TITULO: Una Aproximación Teórica a la Química de los Calcógenos
DOCTORANDO: Pablo Sanz Mercado
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid
AÑO: 2003
FACULTAD: Ciencias
CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude por Unanimidad

TESIS DOCTORALES DE LAS QUE HA SIDO TUTORA

TITULO: Estudio de reacciones de transferencia protonica por resonancia ciclotronica de iones con transformada de Fourier
DOCTORANDA: Marta Herreros Portolés
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid
AÑO: 1996
FACULTAD: Ciencias
CALIFICACION: Apto cum Laude por Unanimidad

TITULO: Estructura Molecular de Pirazoles-NH monocíclicos: Métodos mecanocuánticos y cristalográficos. Modos de empaquetamiento cristalino.
DOCTORANDA: Lourdes Infantes San Mateo
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid
AÑO: 2000
FACULTAD: Ciencias
CALIFICACION: Apto cum Laude por Unanimidad

TITULO: Espectroscopia Raman de Rotación-vibración de algunas moléculas de interés: H_2O , D_2O , HDO , $(CO_2)_2$ y $(N_2)_2$.
DOCTORANDA: Gustavo Avila Blanco
UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid
AÑO: 2004
FACULTAD: Ciencias
CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude

TITULO: Estudio por RCI con TF (FT-ICR) de relaciones entre la estructura, reactividad y estabilidad termodinámica de especies iónicas y neutras en fase gaseosa.

DOCTORANDA: Esther Quintanilla Luján

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 2005

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude

TITULO: Estudio teórico de sistemas de relevancia atmosférica: espectroscopia IR de cristales de ácido nítrico y sus hidratos.

DOCTORANDA: Delia Fernandez Torre

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 2005

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude y mencion europea

TITULO: Estudio teórico del Proceso de Protonación de la Piridina en Clusters de Moléculas de Agua.

DOCTORANDA: M^a del Carmen Sicilia Aparicio

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 2005

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude

TITULO: Modelización del proceso de interacción de los analgésicos nicotínicos frente al subtipo $\alpha 4\beta 2$ del receptor nAChR.

DOCTORANDA: M^a Magdalena Mora Salazar

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 2008

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude

TITULO: Estudio ab initio espectroscópico de cadenas de Carbono: C4, C5 y C6.

DOCTORANDA: Helena Massó González

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 2008

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude y mencion europea

TITULO: Una Aproximación Metaheurística para la Construcción Óptima de Hamiltonianos Rovibracionales Anarmónicos.

DOCTORANDA: María Eugenia Castro Sánchez

UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid

AÑO: 2010

FACULTAD: Ciencias

CALIFICACION: Sobresaliente cum Laude

GRANDES EQUIPOS QUE UTILIZA O HA UTILIZADO

EQUIPO: Univac 1108

FECHA: 1971-76 CLAVE: UA

EQUIPO: IBM 4341, 4381, 3090 VM/CMS

FECHA: desde 1976 CLAVE: UA

EQUIPO: DEC VAX 11/750, 11/780 VMS

FECHA: desde 1982 CLAVE: UA

EQUIPO: IBM RISC 6000

FECHA: desde 1990 CLAVE: UA

OTROS MERITOS O ACLARACIONES QUE DESEA HACER CONSTAR

1. Premio Extraordinario de Licenciatura en Ciencias Químicas.

Universidad de Santiago de Compostela.

Julio de 1970.

2. Premio Extraordinario de Doctorado.

Universidad Autónoma de Madrid.

Enero de 1975.

3) Asociaciones a las que pertenece:

- Miembro de la Sociedad Europea de Física desde Enero de 1987.
- Miembro de la Real Sociedad Española de Física desde Enero de 1988.
- Miembro del Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular desde su fundación.
- Miembro de la Real Sociedad Española de Química desde 2000

4) Revistas de las que es referee:

- Journal of Molecular Structure (THEOCHEM).
- Journal of the American Chemical Society.
- Journal of Physical Chemistry B
- Journal of Physical Chemistry A
- New J. of Chem
- Journal of Physics B.
- Chemical Physics Research.
- Chemical Physics Letters.
- ChemPhysChem
- European Journal of Organic Chemistry.
- Journal of Physical Organic Chemistry

5) Puestos Académicos Desempeñados:


- Secretaria del Instituto Universitario de Estudios de la Mujer de la Universidad Autónoma de Madrid (I.U.E.M.) desde Enero de 1990 a Mayo de 1991.
- Directora del Instituto Universitario de Estudios de la Mujer de la Universidad Autónoma de Madrid (I.U.E.M.) 1991-95
- Vicedecana de Estudiantes. Facultad de Ciencias UAM. desde 1996.
- Responsable del Programa de Doctorado "Química Teórica y Computacional" con mención de calidad MCD2003-00675. Cursos 2000 hasta 2006.
- Responsable del Master Europeo "European Master on Theoretical Chemistry and Computational Modelling" desde el curso 2006-2007. Con Eurolabel de la ECTNA (Certificate number :EM0701 de 14/10/2007). En estos momentos este es un master ERASMUS MUNDUS 2009-2013 coordinado por el Prof. Manuel Yáñez del Departamento de Química UAM.
- Presidenta de la Sección de Madrid de la Real Sociedad Española de Química desde mayo del 2002-2008
- Directora del Departamento de Química de la UAM desde abril de 2004 hasta abril de 2008.
- Directora General de Programas y Transferencia de Conocimiento de la Secretaría de Estado de Universidades del Ministerio de Ciencia e Innovación desde el 1 de mayo de 2008 al 25 de abril de 2009.
- Coordinadora Científica del Programa Consolider-Ingenio 2010.

6) Evaluaciones de Investigación y Docencia

- 6 tramos de Investigación evaluados positivamente (periodo 1970-2006)
- 7 tramos de Docencia evaluados positivamente (periodo 1970-2005)

7) Comités Científicos de los que forma parte

- Comisión de Evaluación de las Universidades Gallegas
- Comisión de Evaluación del Profesorado Universitario de la ANECA
- Miembro de la Comisión Técnica de Evaluación del Programa Campus de Excelencia Internacional, así como del programa Innocampus.
- Presidenta del Comité de evaluación del Programa Consolider.
- Miembro del Label Committee de la ECTNA (European Chemistry Thematic Network Association).

A handwritten signature in blue ink, enclosed in a blue oval. The signature reads "Otilia Rodríguez".