



Angel Rabdel Ruiz Salvador

Generado desde: Editor CVN de FECYT

Fecha del documento: 29/11/2018

v 1.4.0

3708cde9db58a058eb365e49ab6adca0

Este fichero electrónico (PDF) contiene incrustada la tecnología CVN (CVN-XML). La tecnología CVN de este fichero permite exportar e importar los datos curriculares desde y hacia cualquier base de datos compatible. Listado de Bases de Datos adaptadas disponible en <http://cvn.fecyt.es/>

Resumen libre del currículum

Descripción breve de la trayectoria científica, los principales logros científico-técnicos obtenidos, los intereses y objetivos científico-técnicos a medio/largo plazo de la línea de investigación. Incluye también otros aspectos o peculiaridades importantes.

En los primeros cuatro años (1992/1995) las investigaciones estuvieron dirigidas a conductividad iónica en sólidos, enfocadas en aspectos tecnológicos. Las investigaciones en esta temática las mantiene en el futuro, pero ocupando una pequeña porción de tiempo. En 1996 cambia a sólidos porosos, en particular zeolitas, y comienza la tesis doctoral que culmina en 1999 con un trabajo dedicado al desarrollo de metodologías computacionales para el estudio de la estructura de zeolitas. Estas investigaciones las realiza en cooperación con The Royal Institution y University College London, ambos de Gran Bretaña. El trabajo fue premiado como el trabajo de mayor relevancia en las ciencias naturales y exactas de la Universidad de La Habana y a la vez premio nacional de la Academia de Ciencias de Cuba.

A partir de 1998 se vincula a investigaciones experimentales de sólidos nanoporosos, aunque el grueso del tiempo se dedica a investigaciones teóricas. En esa fecha inicia la línea de modelización estructural de zeolitas hidratadas y en el 2000 recibe una beca de investigación de la Royal Society, Gran Bretaña. En el año 2000 es elegido miembro del Consejo Científico del Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales. En 2001 comienza a liderar su grupo de trabajo, un año más tarde es elegido Asociado Joven de la Academia de Ciencias de Cuba y en 2004 miembro del Consejo Científico de Universidad de La Habana. En el año 2004 inicia la línea de diseño atomístico de sólidos nanoporosos y el desarrollo de algoritmos de cómputo para esos fines, materializados en el código Tobunporous. Participa como líder local de un proyecto ALFA-UE en cooperación con 4 centros europeos y otros dos latinoamericanos en el diseño, modelización y estudios experimentales de sólidos nanoporosos (zeolitas, MOFS, sólidos mesoporosos) para el almacenamiento de gases. En 2013 se traslada a la Universidad Pablo de Olavide, como postdoc en el grupo RASPA. Desde septiembre de 2018 es Profesor Contratado Doctor en la Universidad Pablo de Olavide, de Sevilla, España.

Las líneas de investigación que aborda en la actualidad son las siguientes:

- Desarrollo de métodos y metodologías para el diseño atomístico de materiales, en particular nanoporosos. Se incluye la programación de códigos y algoritmos para estos fines, como el programa ToBuNPorouS (Topological Building of Nanoporous Solids).
- Desarrollo de metodologías para incrementar la eficiencia en la modelación atomística de la estructura de materiales, en especial nanoporosos. Para este fin las optimizaciones de geometría se realizan tanto por métodos cuánticos (VASP y QuickStep) como clásicos (GULP, DL_POLY). Las metodologías son implementadas en scripts que se ejecutan de forma automática.
- Desarrollo de potenciales interatómicos para describir eficientemente las interacciones intra e intermoleculares, con relevancia en procesos de adsorción y separación molecular, así como en la estructura de los materiales.
- Modelación de procesos de adsorción y difusión en materiales, empleando aproximaciones clásicas (implementadas en los programas RASPA, GULP y DL_POLY) y cuánticas (VASP y QuickStep).
- Diseño conceptual (vinculado a experimentación) de materiales nanoporosos, MOFs y zeolitas, tanto desde la síntesis como de modificaciones a-posteriori.
- Análisis estructural



(vinculado a experimentación) de materiales nanoporosos. Incluye el desarrollo de metodologías y algoritmos teórico-computacionalaes para estos fines.



Angel Rabdel Ruiz Salvador

Apellidos: **Ruiz Salvador**
Nombre: **Angel Rabdel**
ORCID: **0000-0002-2004-687X**
Provincia de contacto: **Sevilla**
Dirección de contacto: **Universidad Pablo de Olavide**
Resto de dirección contacto: **Departamento de Sistemas Físicos, Químicos y Naturales**
Código postal: **41013**
País de contacto: **España**
C. Autón./Reg. de contacto: **Andalucía**
Ciudad de contacto: **Sevilla**
Correo electrónico: **rruisal@upo.es**

Situación profesional actual

Entidad empleadora: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Sistemas Físicos, Químicos y Naturales, Facultad de Ciencias Experimentales
Categoría profesional: Profesor Ayudante Doctor
Fecha de inicio: 28/09/2018
Modalidad de contrato: Contrato laboral temporal **Régimen de dedicación:** Tiempo completo
Primaria (Cód. Unesco): 230700 - Química física
Secundaria (Cód. Unesco): 239900 - Otras especialidades químicas
Terciaria (Cód. Unesco): 221104 - Cristalografía
Funciones desempeñadas: Física Química de Materiales, con énfasis en sólidos nanoporosos (ejemplos MOFs, zeolitas y COFs). Uso de técnicas teórico-computacionales para la modelización de sus propiedades estructurales y de adsorción y difusión de moléculas huéspedes. Diseño in-silico de materiales, desarrollo de herramientas para estos fines. Modificación de materiales nanoporosos para aplicaciones específicas. Análisis estructural de materiales. Diseño conceptual de materiales porosos y aplicaciones basados en ellos. Movilidad y conductividad iónica en sólidos.
Identificar palabras clave: Química cuántica; Química física de materiales; Química computacional; Caracterización; Estructura; Resultados experimentales y teóricos del comportamiento físico de átomos y moléculas

Entidad empleadora: Universidad Pablo de Olavide
Departamento: Departamento de Sistemas Físicos, Químicos y Naturales, Facultad de Ciencias Experimentales
Categoría profesional: Titulado Superior de Apoyo a la Investigación con Grado de Doctor
Fecha de inicio: 01/02/2013
Modalidad de contrato: Contrato laboral temporal **Régimen de dedicación:** Tiempo completo
Primaria (Cód. Unesco): 220000 - Física
Secundaria (Cód. Unesco): 230000 - Química
Funciones desempeñadas: Física Química de Materiales, con énfasis en sólidos nanoporosos (ejemplos MOFs, zeolitas y COFs). Uso de técnicas teórico-computacionales para la modelización de sus propiedades estructurales y de adsorción y difusión de moléculas huéspedes. Diseño in-silico de



materiales, desarrollo de herramientas para estos fines. Modificación de materiales nanoporosos para aplicaciones específicas. Análisis estructural de materiales.

Identificar palabras clave: Física química y matemáticas

Cargos y actividades desempeñados con anterioridad

	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
	Universidad de La Habana	Investigador Auxiliar (equivalente a Titular en España)	01/02/1992

Entidad empleadora: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad

Categoría profesional: Investigador Auxiliar (equivalente a Titular en España)

Fecha de inicio-fin: 01/02/1992 - 01/10/2012 **Duración:** 19 años - 9 meses - 1 día



Formación académica recibida

Titulación universitaria

Estudios de 1º y 2º ciclo, y antiguos ciclos (Licenciados, Diplomados, Ingenieros Superiores, Ingenieros Técnicos, Arquitectos)

Titulación universitaria: Titulado Superior

Nombre del título: Licenciado en Física

Entidad de titulación: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad

Fecha de titulación: 01/12/1991

Doctorados

Programa de doctorado: Doctorado en Ciencias Físicas

Entidad de titulación: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad

Fecha de titulación: 01/09/1999

Conocimiento de idiomas

Idioma	Comprensión auditiva	Comprensión de lectura	Interacción oral	Expresión oral	Expresión escrita
Francés		A1	A1	A1	A1
Húngaro		B1	B1	B1	B1
Español		C1	C1	C1	C1
Inglés		C1	C1	C1	C1

Actividad docente

Dirección de tesis doctorales y/o proyectos fin de carrera

- Título del trabajo:** Remoción de antibióticos de los sistemas acuosos empleando enrejados metal-orgánicos (MOF) del tipo MIL-53

Tipo de proyecto: Tesina

Entidad de realización: Instituto Superior de Ciencias y Tecnologías Aplicadas

Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba

Alumno/a: José Luis Velázquez Libera

Fecha de defensa: 2012
- Título del trabajo:** Una aproximación teórica al spillover del hidrógeno atómico en la γ - alúmina

Tipo de proyecto: Tesina

Entidad de realización: Instituto Superior de Ciencias y Tecnologías Aplicadas



Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Héctor E. Durán Legrá
Fecha de defensa: 2012

- 3 Título del trabajo:** Diseño de enrejados metal – orgánicos (MOFs) basados en agregados adamantanoides de germanio y la modelación de sus propiedades de adsorción de CO₂
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Ransel Barzaga Guzmán
Fecha de defensa: 2011
- 4 Título del trabajo:** Simulación computacional de la estructura superficial y morfología de la clinoptilolita puro sílice
Tipo de proyecto: Tesina de Máster
Entidad de realización: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Karell Valdivies Cruz
Fecha de defensa: 2011
- 5 Título del trabajo:** Modelación de la distribución Si-Al en la zeolita barrerita
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Rayko Rivera Galán
Fecha de defensa: 2010
- 6 Título del trabajo:** Síntesis de sólidos nanoporosos con enrejados metal orgánicos basados en hexameten-tetramina (HMTA) y níquel
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Instituto Superior de Ciencias y Tecnologías Aplicadas
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Isis Estevez Valdivia
Fecha de defensa: 2010
- 7 Título del trabajo:** Enrejados metal – orgánicos (MOFs) monometálicos, bimetálicos y polioxometálicos de ácido tereftálico e imidazol: Diseño, síntesis y caracterización
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral
Entidad de realización: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Luisa Marleny Rodríguez Albelo
Fecha de defensa: 2010
- 8 Título del trabajo:** La clinoptilolita natural modificada: Estudios estructurales y propiedades de adsorción de dióxido de carbono
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral
Entidad de realización: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Yunier García Basabe
Fecha de defensa: 2010



- 9** **Título del trabajo:** Estudio computacional de la adsorción de CO₂ en MOF-5
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Rafael Sarmiento Pérez
Fecha de defensa: 2009
- 10** **Título del trabajo:** Síntesis de enrejados metal – orgánicos (MOFs) basados en HMT
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Ibis Rodríguez Videaux
Fecha de defensa: 2009
- 11** **Título del trabajo:** Síntesis de sólidos nanoporosos con enrejados metal – orgánicos con gran capacidad de intercambio aniónico
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Instituto Superior de Ciencias y Tecnologías Aplicadas
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Sandy González Hernández
Fecha de defensa: 2008
- 12** **Título del trabajo:** Modelación del comportamiento térmico de la zeolita ZSM-5 por medio del método de la dinámica molecular
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Karell Valdivies Cruz
Fecha de defensa: 2005
- 13** **Título del trabajo:** Introducción al estudio computacional con cálculos ab initio de las interacciones Sulfuro de Molibdeno-Hidrógeno
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Yanaris Ortega García
Fecha de defensa: 2004
- 14** **Título del trabajo:** Preparación de Potenciales Soportes Zeolíticos para la Liberación de Iones de Interés Farmacéutico
Tipo de proyecto: Tesina de Máster
Entidad de realización: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Tania Farías Piñeira
Fecha de defensa: 2004
- 15** **Título del trabajo:** Estudio de la distribución de cationes en perovskitas de litio, lantano y titanio
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Miguel O'Reilly Lukin



Fecha de defensa: 2003

- 16** **Título del trabajo:** Simulación del cristal de sacarosa con impurezas
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Yoandys Gómez De la Torre
Fecha de defensa: 2003
- 17** **Título del trabajo:** Estudio teórico-experimental de la perovskita $\text{LaSr1-xO3-}\delta$. Actividad en la conversión de CO
Tipo de proyecto: Tesina de Máster
Entidad de realización: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Alejandro González Peralta
Fecha de defensa: 2003
- 18** **Título del trabajo:** Estudio computacional de la hidratación de la zeolita goosecrikita
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Neyvis Almora Barrios
Fecha de defensa: 2000
- 19** **Título del trabajo:** Estudio preliminar por simulación de la cristalización de la sacarosa
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Carlos Campaña Cué
Fecha de defensa: 2000
- 20** **Título del trabajo:** Estudio de los sitios ácidos de la zeolita ZSM-5
Tipo de proyecto: Tesina de Máster
Entidad de realización: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Ricardo Grau Crespo
Fecha de defensa: 2000
- 21** **Título del trabajo:** Estudio de la distribución de P y Si en la zeolita SAPO-31
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Blanca N. Díaz González
Fecha de defensa: 1999
- 22** **Título del trabajo:** Aplicación de la física computacional a la caracterización y localización estructural del Na_2CO_3 dentro de una cavidad zeolítica
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Javier de la Torre Rodríguez
Fecha de defensa: 1998



- 23 Título del trabajo:** Estudio de la respuesta dieléctrica de la capas delgadas de óxido de cerio
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Alejandro Cadalso
Fecha de defensa: 1998
- 24 Título del trabajo:** Estudio preliminar del crecimiento de capas delgadas conductoras de oxígeno
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Mario F. García Sánchez
Fecha de defensa: 1995
- 25 Título del trabajo:** Respuesta dieléctrica de formas intercambiadas de la zeolita clinoptilolita
Tipo de proyecto: Tesina
Entidad de realización: Universidad de La Habana **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Alumno/a: Adolfo Delgado Cordero
Fecha de defensa: 1995

Experiencia científica y tecnológica

Actividad científica o tecnológica

Proyectos de I+D+i financiados en convocatorias competitivas de Administraciones o entidades públicas y privadas

- 1 Nombre del proyecto:** Towards more efficient materials for technological processes (RASPA)
Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Sevilla, Andalucía, España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Sofía Calero Díaz
Nº de investigadores/as: 15
Fecha de inicio-fin: 2012 - 2016
- 2 Nombre del proyecto:** Estructura de zeolitas naturales modificadas para adsorción y separación de gases
Entidad de realización: Universidad de La Habana
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Angel Rabel Ruiz Salvador; Yunier García Basabe
Nº de investigadores/as: 4
Entidad/es financiadora/s: Ministerior de Educación Superior
Ciudad entidad financiadora: La Habana, Cuba
Fecha de inicio-fin: 2006 - 2010



- 3** **Nombre del proyecto:** Modelación de las interacciones en óxidos metálicos
Entidad de realización: Universidad de La Habana
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Angel Rabdel Ruiz Salvador; Jorge Arce Molina
Nº de investigadores/as: 3
Entidad/es financiadora/s:
Ministerio de Educación Superior
Ciudad entidad financiadora: La Habana, Cuba
Fecha de inicio-fin: 2006 - 2010
- 4** **Nombre del proyecto:** Crystallography studies of the accessibility of extra-framework cations in partial dealuminated natural zeolite clinoptilolite for the preparation of CO₂ capture nanoadsorbents
Entidad de realización: Elettra Sincrotrón
Ciudad entidad realización: Trieste, Italia
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Angel Rabdel Ruiz Salvador; Andrea Lausi
Nº de investigadores/as: 5
Entidad/es financiadora/s:
Centro Internacional de Física Teórica
Fecha de inicio-fin: 2009 - 2009
- 5** **Nombre del proyecto:** Crystallography studies of the accessibility of extra-framework cations in partial dealuminated natural zeolite clinoptilolite for the preparation of CO₂ capture nanoadsorbents
Entidad de realización: Elettra Sincrotrón
Ciudad entidad realización: Trieste, Italia
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Angel Rabdel Ruiz Salvador; Andrea Lausi
Nº de investigadores/as: 5
Entidad/es financiadora/s:
Centro Internacional de Física Teórica
Fecha de inicio-fin: 2009 - 2009
- 6** **Nombre del proyecto:** Design of nanosorbents for gas storage (NANOGASTOR)
Entidad de realización: Grupo de Universidades y Centros de Investigación de Francia, España, Reino Unido, Alemania, Cuba, Brasil y México
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Guillaume Maurin; Angel Rabdel Ruiz Salvador (coordinador en Cuba)
Entidad/es financiadora/s:
Unión Europea
Fecha de inicio-fin: 2006 - 2009
- 7** **Nombre del proyecto:** Interacciones Orgánicas – inorgánicas: desarrollo de metodologías teórico-computacionales con retroalimentación experimental
Entidad de realización: Universidad de La Habana
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Angel Rabdel Ruiz Salvador
Nº de investigadores/as: 15
Entidad/es financiadora/s:
Ministerio de Ciencia, Tecnología y Medio Ambiente
Ciudad entidad financiadora: La Habana, Cuba
Fecha de inicio-fin: 2004 - 2009



- 8** **Nombre del proyecto:** Computer aided de novo design and synthesis of metal-organic frameworks
Entidad de realización: University College London / Universidad de La Habana
Ciudad entidad realización: Londres, Reino Unido
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Dewi W. Lewis; Angel Rabdel Ruiz Salvador
Nº de investigadores/as: 5
Entidad/es financiadora/s:
Royal Society
Ciudad entidad financiadora: Londres, Reino Unido
Fecha de inicio-fin: 2005 - 2007
- 9** **Nombre del proyecto:** Crystal Chemistry of natural zeolites tailored for gas adsorption and separation: the role of the extra-framework species
Entidad de realización: Elettra Sincrotrón
Ciudad entidad realización: Trieste, Italia
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Andrea Lausi; Angel Rabdel Ruiz Salvador
Nº de investigadores/as: 5
Entidad/es financiadora/s:
Centro Internacional de Física Teórica / OIEA
Ciudad entidad financiadora: Trieste, Italia
Fecha de inicio-fin: 2003 - 2005
- 10** **Nombre del proyecto:** Muestreo de alta eficacia para el desarrollo de compositos orgánicos – inorgánicos
Entidad de realización: Universidad de La Habana
Ciudad entidad realización: La Habana, Cuba
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Angel Rabdel Ruiz Salvador
Nº de investigadores/as: 8
Entidad/es financiadora/s:
Universidad de La Habana
Ciudad entidad financiadora: La Habana, Cuba
Fecha de inicio-fin: 2002 - 2004
- 11** **Nombre del proyecto:** Modelling Hydration of Zeolites: A First Step for Modelling Ion – Exchange
Entidad de realización: University College London
Ciudad entidad realización: Londres, Reino Unido
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Dewi W. Lewis; Angel Rabdel Ruiz Salvador
Nº de investigadores/as: 3
Entidad/es financiadora/s:
Royal Society
Fecha de inicio-fin: 01/09/2000 - 01/03/2001
- 12** **Nombre del proyecto:** Catálisis Computacional
Entidad de realización: Grupo de Universidades y Centros de Investigación Iberoamericanos
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): María Ramírez
Entidad/es financiadora/s:
Programa Iberoamericano para Ciencia y Tecnología (CYTED)
Fecha de inicio-fin: 1996 - 1998



Actividades científicas y tecnológicas

Producción científica

Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1** Rabdel Ruiz-Salvador, A.; Grau-Crespo, Ricardo; Gray, Aileen E.; Lewis, Dewi W. Aluminium distribution in ZSM-5 revisited: The role of Al-Al interactions. JOURNAL OF SOLID STATE CHEMISTRY. 198, pp. 330 - 336. 02/2013. ISSN 0022-4596

Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 0
- 2** Sarmiento-Perez, Rafael A.; Marleny Rodriguez-Albelo, L.; Gomez, Ariel; Autie-Perez, Miguel; Lewis, Dewi W.; Rabdel Ruiz-Salvador, A. Surprising role of the BDC organic ligand in the adsorption of CO₂ by MOF-5. MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS. 163, pp. 186 - 191. 15/11/2012. ISSN 1387-1811

Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 2
- 3** Ruiz-Hernandez, Sergio E.; Grau-Crespo, Ricardo; Almora-Barrios, Neyvis; Wolthers, Mariette; Rabdel Ruiz-Salvador, A.; Fernandez, Nestor; de Leeuw, Nora H. Mg/Ca Partitioning Between Aqueous Solution and Aragonite Mineral: A Molecular Dynamics Study. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 18 - 32, pp. 9828 - 9833. 08/2012. ISSN 0947-6539

Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 1
- 4** Garcia-Basabe, Yunier; Rabdel Ruiz-Salvador, A.; Maurin, Guillaume; de Menorval, Louis-Charles; Rodriguez-Iznaga, Inocente; Gomez, Ariel. Location of extra-framework Co²⁺, Ni²⁺, Cu²⁺ and Zn²⁺ cations in natural and dealuminated clinoptilolite. MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS. 155, pp. 233 - 239. 01/06/2012. ISSN 1387-1811

Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 0
- 5** Garcia-Sanchez, M. F.; Fernandez, N.; Martinez-Sarrion, M. -L.; Mestres, L.; Santana, G.; Lewis, D. W.; Ruiz-Salvador, A. R. Chemical insertion in the perovskite solid solutions Pr_{0.5+x}Li_{0.5-3x}Bi_y square 2xTiO₃: Implications on the electrical properties. MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING B-ADVANCED FUNCTIONAL SOLID-STATE MATERIALS. 177 - 8, pp. 563 - 569. 15/05/2012. ISSN 0921-5107

Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 0
- 6** Marleny Rodriguez-Albelo, L.; Rousseau, Guillaume; Mialane, Pierre; Marrot, Jerome; Mellot-Draznieks, Caroline; Rabdel Ruiz-Salvador, A.; Li, Shiwen; Liu, Rongji; Zhang, Guangjin; Keita, Bineta; Dolbecq, Anne. epsilon-Keggin-based coordination networks: Synthesis, structure and application toward green synthesis of polyoxometalate@graphene hybrids. DALTON TRANSACTIONS. 41 - 33, pp. 9989 - 9999. 2012. ISSN 1477-9226

Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 5



- 7** L. Marleny Rodriguez Albelo; G. Rousseau; Pierre Mialane; J. Marrot; Caroline Mellot-Draznieks; A. Rabdel Ruiz Salvador; S. Li; R. Liu; G. Zhang; B. Keita; Anne Dolbecq. ϵ -Keggin-based coordination networks: Synthesis, structure and application toward green synthesis of polyoxometalate@graphene hybrids. Dalton T.41, pp. 9989 - 9999. Royal Society of Chemistry, 2012.
Tipo de producción: Artículo científico
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.838
Tipo de soporte: Revista
Categoría: Inorganic Chemistry
Revista dentro del 25%: Si
- 8** Garcia-Basabe, Yunier; Rodriguez-Iznaga, Inocente; de Menorval, Louis-Charles; Llewellyn, Philip; Maurin, Guillaume; Lewis, Dewi W.; Binions, Russell; Autie, Miguel; Rabdel Ruiz-Salvador, A. Step-wise dealumination of natural clinoptilolite: Structural and physicochemical characterization. MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS. 135 - 1-3, pp. 187 - 196. 11/2010. ISSN 1387-1811
Tipo de producción: Artículo científico
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Citas: 11
- 9** Garcia-Basabe, Yunier; Gomez, Ariel; Rodriguez-Iznaga, Inocente; Montero, Alfredo; Vlaic, Gilberto; Lausi, Andrea; Rabdel Ruiz-Salvador, A. Locating Extra-Framework Cations in Low-Silica Zeolites by a Combinatorial Approach of the Direct Space Method and Rietveld Refinement: Application to Ni²⁺ and Co²⁺ Enriched Clinoptilolite. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 114 - 13, pp. 5964 - 5974. 08/04/2010. ISSN 1932-7447
Tipo de producción: Artículo científico
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Citas: 2
- 10** Ruiz-Hernandez, Sergio E.; Grau-Crespo, Ricardo; Rabdel Ruiz-Salvador, A.; De Leeuw, Nora H. Thermochemistry of strontium incorporation in aragonite from atomistic simulations. GEOCHIMICA ET COSMOCHIMICA ACTA. 74 - 4, pp. 1320 - 1328. 15/02/2010. ISSN 0016-7037
Tipo de producción: Artículo científico
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Citas: 10
- 11** Rodriguez Albelo, L. Marleny; Rabdel Ruiz-Salvador, A.; Lewis, Dewi W.; Gomez, Ariel; Mialane, Pierre; Marrot, Jerome; Dolbecq, Anne; Sampieri, Alvaro; Mellot-Draznieks, Caroline. Zeolitic polyoxometalates metal organic frameworks (Z-POMOF) with imidazole ligands and epsilon-Keggin ions as building blocks; computational evaluation of hypothetical polymorphs and a synthesis approach. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 12 - 30, pp. 8632 - 8639. 2010. ISSN 1463-9076
Tipo de producción: Artículo científico
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Citas: 11
- 12** Farias, Tania; Rabdel Ruiz-Salvador, A.; Velazco, Lya; Charles de Menorval, Louis; Rivera, Aramis. Preparation of natural zeolitic supports for potential biomedical applications. MATERIALS CHEMISTRY AND PHYSICS. 118 - 2-3, pp. 322 - 328. 15/12/2009. ISSN 0254-0584
Tipo de producción: Artículo científico
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Citas: 7
- 13** Marleny Rodriguez-Albelo, L.; Rabdel Ruiz-Salvador, A.; Sampieri, Alvaro; Lewis, Dewi W.; Gomez, Ariel; Nohra, Brigitte; Mialane, Pierre; Marrot, Jerome; Secheresse, Francis; Mellot-Draznieks, Caroline.; Biboum, Rosa Ngo; Keita, Bineta; Nadjo, Louis; Dolbecq, Anne. Zeolitic Polyoxometalate-Based Metal-Organic Frameworks (Z-POMOFs): Computational Evaluation of Hypothetical Polymorphs and the Successful Targeted Synthesis of the Redox-Active Z-POMOF1. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 131 - 44, pp. 16078 - 16087. 11/11/2009. ISSN 0002-7863
Tipo de producción: Artículo científico
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Citas: 65



- 14** Lewis, Dewi W.; Rabdel Ruiz-Salvador, A.; Gomez, Ariel; Marleny Rodriguez-Albelo, L.; Coudert, Francois-Xavier; Slater, Ben; Cheetham, Anthony K.; Mellot-Draznieks, Caroline. Zeolitic imidazole frameworks: structural and energetics trends compared with their zeolite analogues. CRYSTENGCOMM. 11 - 11, pp. 2272 - 2276. 2009. ISSN 1466-8033
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 36
- 15** Garcia-Sanchez, Mario-Fidel; Fernandez, Nestor; Martinez-Sarrion, Maria-Luisa; Mestres, Lourdes; Fernandez-Gutierrez, Floiran; Santana, Guillermo; Ruiz-Salvador, A. Rabdel. Separation of electronic and ionic conductivity in mixed conductors from the ac response: Application to Pr(0.56)Bi(0.04)Li(0.2)TiO(3). APPLIED PHYSICS LETTERS. 93 - 3, 21/07/2008. ISSN 0003-6951
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 1
- 16** Ruiz-Salvador, A. Rabdel; Almora-Barrios, Neyvis; Gomez, Ariel; Lewis, Dewi W. Interplay of water, extra-framework cations and framework atoms in the structure of low-silica zeolites: the case of the natural zeolite Goosecreekite as studied by computer simulation. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 9 - 4, pp. 521 - 532. 2007. ISSN 1463-9076
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 11
- 17** Ruiz-Salvador, AR; Garcia-Sanchez, MF; O'Reilly-Lukin, M; Lewis, DW; Gomez, A. Approaching the structure of heavily defective ionic oxides through atomistic modeling. Physica Status Solidi C - Conference and Critical Reviews, Vol 2, No 10. 2 - 10, pp. 3521 - 3524. 2005. Disponible en Internet en: <17th Latin American Symposium on Solid State Physics>. ISSN 1610-1634
Tipo de producción: Artículo científico **Citas:** 1
Fuente de citas: WOS
- 18** Gibbs, T; White, CLIM; Ruiz-Salvador, AR; Lewis, DW. Effect of hydration levels and pressure on zeolite structure. RECENT ADVANCES IN THE SCIENCE AND TECHNOLOGY OF ZEOLITES AND RELATED MATERIALS, PTS A - C. 154, pp. 1737 - 1745. 2004. Disponible en Internet en: <14th International Zeolite Conference>. ISSN 0167-2991
Tipo de producción: Artículo científico **Citas:** 0
Fuente de citas: WOS
- 19** White, CLIM; Ruiz-Salvador, AR; Lewis, DW. Pressure-induced hydration effects in the zeolite laumontite. ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION. 43 - 4, pp. 469 - 472. 2004. ISSN 1433-7851
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 9
- 20** Ruiz-Salvador, AR; Gomez, A; Diaz, BN; Ortega, Y; Lewis, DW. Si atoms in SAPO-31: A computational study. RECENT ADVANCES IN THE SCIENCE AND TECHNOLOGY OF ZEOLITES AND RELATED MATERIALS, PTS A - C. 154, pp. 1439 - 1447. 2004. Disponible en Internet en: <14th International Zeolite Conference>. ISSN 0167-2991
Tipo de producción: Artículo científico **Citas:** 2
Fuente de citas: WOS



- 21** Garcia-Sanchez, MF; M'Peko, JC; Ruiz-Salvador, AR; Rodriguez-Gattorno, G; Echevarria, Y; Fernandez-Gutierrez, F; Delgado, A. An elementary picture of dielectric spectroscopy in solids: Physical basis. JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION. 80 - 9, pp. 1062 - 1073. 09/2003. ISSN 0021-9584
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 26
- 22** Farias, T; Ruiz-Salvador, AR; Rivera, A. Interaction studies between drugs and a purified natural clinoptilolite. MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS. 61 - 1-3, pp. 117 - 125. 18/07/2003. Disponible en Internet en: <6th International Conference on Occurrence, Properties and Utilization of Natural Zeolites>. ISSN 1387-1811
Depósito legal: JUN 03-07, 2002
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 23
- 23** Rivera, A; Farias, T; Ruiz-Salvador, AR; de Menorval, LC. Preliminary characterization of drug support systems based on natural clinoptilolite. MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS. 61 - 1-3, pp. 249 - 259. 18/07/2003. Disponible en Internet en: <6th International Conference on Occurrence, Properties and Utilization of Natural Zeolites>. ISSN 1387-1811
Depósito legal: JUN 03-07, 2002
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 19
- 24** Grau-Crespo, R; Acuay, E; Ruiz-Salvador, RR. A free energy minimisation study of the monoclinic-orthorhombic transition in MFI zeolite. CHEMICAL COMMUNICATIONS. 21, pp. 2544 - 2545. 2002. ISSN 1359-7345
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 13
- 25** Lewis, DW; Ruiz-Salvador, AR; Almora-Barrios, N; Gomez, A; Mistry, M. Modelling of hydrated Ca-rich zeolites. MOLECULAR SIMULATION. 28 - 6-7, pp. 649 - 661. 2002. Disponible en Internet en: <Meeting on Calcite and Related Materials: Growth and Dissolution>. ISSN 0892-7022
Depósito legal: JAN, 2001
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 13
- 26** Cue, CC; Salvador, ARR; Morales, SA; Rodriguez, FLF; Gonzalez, PP. Raffinose-sucrose crystal interaction modelling. JOURNAL OF CRYSTAL GROWTH. 231 - 1-2, pp. 280 - 289. 09/2001. ISSN 0022-0248
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 3
- 27** Agacino, E; de la Mora, P; Ruiz-Salvador, AR. Reactivity analysis in diamond surfaces with a density functional calculation. STRUCTURAL CHEMISTRY. 12 - 2, pp. 101 - 111. 04/2001. ISSN 1040-0400
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 3
- 28** Almora-Barrios, N; Gomez, A; Ruiz-Salvador, AR; Mistry, M; Lewis, DW. Understanding Si/Al distributions in Al-rich zeolites: the role of water in determining the structure of Goosecreekite. CHEMICAL COMMUNICATIONS. 6, pp. 531 - 532. 2001. ISSN 1359-7345
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 15



- 29** Grau-Crespo, R; Peralta, AG; Ruiz-Salvador, AR; Gomez, A; Lopez-Cordero, R. A computer simulation study of distribution, structure and acid strength of active sites in H-ZSM-5 catalyst. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 2 - 24, pp. 5716 - 5722. 2000. ISSN 1463-9076
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 36
- 30** Ruiz-Salvador, AR; Gomez, A; Lewis, DW; Catlow, CRA; Rodriguez-Albelo, LM; Montero, L; Rodriguez-Fuentes, G. Clinoptilolite-heulandite polymorphism: structural features from computer simulation. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 2 - 8, pp. 1803 - 1813. 2000. ISSN 1463-9076
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 13
- 31** Gonzalez, JG; Alcaz, JDLC; Ruiz-Salvador, AR; Gomez, A; Dago, A; de las Pozas, C. Computational study of substitution of Al by Fe³⁺ in the AlPO₄-5 framework. MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS. 29 - 3, pp. 361 - 367. 07/1999. ISSN 1387-1811
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 8
- 32** Ruiz-Salvador, AR; Gomez, A; Lewis, DW; Rodriguez-Fuentes, G; Montero, L. Silicon-aluminium distribution in dehydrated calcium heulandite. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 1 - 7, pp. 1679 - 1685. 01/04/1999. ISSN 1463-9076
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 16
- 33** Ruiz-Salvador, AR; Lewis, DW; Rubayo-Soneira, J; Rodriguez-Fuentes, G; Sierra, LR; Catlow, CRA. Aluminum distribution in low Si/Al zeolites: Dehydrated Na-clinoptilolite. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 102 - 43, pp. 8417 - 8425. 22/10/1998. ISSN 1520-6106
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 28
- 34** Gutierrez, FF; Ruiz-Salvador, AR; M'Peko, JC; Velez, MH. Proton mobility calculations in the presence of negative capacitances. EUROPHYSICS LETTERS. 44 - 2, pp. 211 - 215. 15/10/1998. ISSN 0295-5075
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 3
- 35** M'Peko, JC; Ruiz-Salvador, AR; Rodriguez-Fuentes, G. Conductivity activation energy and analysis of the sintering process of dielectric ceramics. MATERIALS LETTERS. 36 - 5-6, pp. 290 - 293. 08/1998. ISSN 0167-577X
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 7
- 36** Rodriguez-Fuentes, G; Ruiz-Salvador, AR; Mir, M; Picazo, O; Quintana, G; Delgado, M. Thermal and cation influence on IR vibrations of modified natural clinoptilolite. MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS. 20 - 4-6, pp. 269 - 281. 03/1998. ISSN 1387-1811
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 24
- 37** RamirezDuverger, A; RuizSalvador, AR; HernandezSanchez, MP; GarciaSanchez, MF; RodriguezGattorno, G. CeO₂ thin films by flash evaporation. SOLID STATE IONICS. 96 - 1-2, pp. 89 - 93. 03/1997. ISSN 0167-2738
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 11

- 38** RuizSalvador, AR; Sastre, G; Lewis, DW; Catlow, CRA. Space group symmetry and Al-O-P bond angles in AIPO4-5. JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY. 6 - 11, pp. 1837 - 1842. 11/1996. ISSN 0959-9428
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Fuente de citas: WOS **Citas:** 22
- 39** Delgado, A; RuizSalvador, AR; RodriguezFuentes, G; BerazainIturralde, A. Dielectric response in natural clinoptilolite. CONFERENCE RECORD OF THE 1996 IEEE INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON ELECTRICAL INSULATION, VOLS 1 AND 2. pp. 866 - 869. 1996. Disponible en Internet en: <1996 IEEE International Symposium on Electrical Insulation>.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Documento o Informe científico-técnico
Fuente de citas: WOS **Citas:** 0
- 40** Chemical Engineering of Photoactivity in Heterometallic Titanium-Organic Frameworks by Metal Doping. 2018.
- 41** Fitting electron density as a physically sound basis for the development of interatomic potentials of complex alloys. 2018.
- 42** Screening heteroatom distributions in zeotype materials using an effective Hamiltonian approach: the case of aluminogermanate PKU-9. 2018.
- 43** The Si-Ge substitutional series in the chiral STW zeolite structure type. 2018.
- 44** Importance of Blocking Inaccessible Voids on Modeling Zeolite Adsorption: Revisited. 2017.
- 45** Porphyrin-based metal-organic frameworks for solar fuel synthesis photocatalysis: band gap tuning via iron substitutions. 2017.
- 46** Selective sulfur dioxide adsorption on crystal defect sites on an isorecticular metal organic framework series. 2017.
- 47** Tuning the separation properties of zeolitic imidazolate framework core-shell structures via post-synthetic modification. 2017.
- 48** Comparing gas separation performance between all known zeolites and their zeolitic imidazolate framework counterparts. 2016.
- 49** Controlling Thermal Expansion: A Metal-Organic Frameworks Route. 2016.



- 50 Critical Role of Dynamic Flexibility in Ge-Containing Zeolites: Impact on Diffusion. 2016.
- 51 Modelling a Linker Mix-and-Match Approach for Controlling the Optical Excitation Gaps and Band Alignment of Zeolitic Imidazolate Frameworks. 2016.
- 52 Atomic charges for modeling metal-organic frameworks: Why and how. 2015.
- 53 Electronic structure of porphyrin-based metal-organic frameworks and their suitability for solar fuel production photocatalysis. 2015.
- 54 Thermostructural behaviour of Ni-Cr materials: modelling of bulk and nanoparticle systems. 2015.
- 55 Understanding Nanopore Window Distortions in the Reversible Molecular Valve Zeolite RHO. 2015.

Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

- 1 **Nombre del congreso:** VIII Seminarios de Estudios Avanzados sobre Diseño Molecular y Bioinformática. -
Fecha de celebración: 2011
Entidad organizadora: Universidad de La Habana. -
2011.
- 2 **Nombre del congreso:** 16th Congress of the International Zeolite Association. -
Fecha de celebración: 2010
Entidad organizadora: Universidad de Sorrento and Italian Zeolite Association Sorrento, Italy. -
2010.
- 3 **Nombre del congreso:** 14th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods. -
Fecha de celebración: 2009
Entidad organizadora: ICTP, Trieste, Italy. -
2009.
- 4 **Nombre del congreso:** 7th Seminars of Advanced Studies on Molecular Design and Bioinformatics: Molecular Interactions. -
Fecha de celebración: 2009
Entidad organizadora: Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. -
2009.
- 5 **Nombre del congreso:** VII Congreso Internacional de Química e Ingeniería Química y I Congreso Iberoamericano de Química. Bioquímica e Ingeniería Química. -
Fecha de celebración: 2009
Entidad organizadora: Sociedad Cubana de Química, La Habana, Cuba. -
2009.



- 6** **Nombre del congreso:** 6th International Meeting on Photodynamics. -
Fecha de celebración: 2008
Entidad organizadora: Instituto Superior de Ciencias y Tecnologías Avanzadas, La Habana, Cuba. - 2008.
- 7** **Nombre del congreso:** XI Simposio de la Sociedad Cubana de Física. -
Fecha de celebración: 2008
Entidad organizadora: Sociedad Cubana de Física, La Habana, Cuba. - 2008.
- 8** **Nombre del congreso:** XXXIII QUITEL Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina. -
Fecha de celebración: 2007
Entidad organizadora: Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. - 2007.
- 9** **Nombre del congreso:** 5th International Meeting on Photodynamics, Habana. -
Fecha de celebración: 2006
Entidad organizadora: Instituto Superior de Ciencias y Tecnologías Avanzadas, La Habana, Cuba. - 2006.
- 10** **Nombre del congreso:** XXVII Congreso Latinoamericano de Química, La Habana. -
Fecha de celebración: 2006
Entidad organizadora: Sociedad Cubana de Química, La Habana, Cuba. - 2006.
- 11** **Nombre del congreso:** Zeolite '06—7th International Conference on the Occurrence, Properties, and Utilization of Natural Zeolites. -
Fecha de celebración: 2006
Entidad organizadora: New Mexico Tech and International Natural Zeolite Association, Sorrento, USA. - 2006.
- 12** **Nombre del congreso:** XXXI QUITEL: Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina. -
Fecha de celebración: 2005
Entidad organizadora: Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas, Margarita, Venezuela. - 2005.
- 13** **Nombre del congreso:** 14th Congress of the International Zeolite Association. -
Fecha de celebración: 2004
Entidad organizadora: Universidad de Cape Town, Cape Town, Sudáfrica. - 2004.
- 14** **Nombre del congreso:** 1st British – Cuban Workshop on Nanoscience. -
Fecha de celebración: 2004
Entidad organizadora: Academia de Ciencias y British Council, La Habana, Cuba. - 2004.
- 15** **Nombre del congreso:** Simposio Latinoamericano de Física del Estado Sólido. -
Fecha de celebración: 2004
Entidad organizadora: Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. - 2004.



- 16** **Nombre del congreso:** V Seminarios de Estudios Avanzados sobre Diseño Molecular y Bioinformática. -
Fecha de celebración: 2004
Entidad organizadora: Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. -
2004.
- 17** **Nombre del congreso:** Crystallisation and Crystal Growth Network Meeting. -
Fecha de celebración: 2003
Entidad organizadora: Reading, Reino Unido. -
2003.
- 18** **Nombre del congreso:** EuroClay2003. -
Fecha de celebración: 2003
Entidad organizadora: European Clay Group Association, Modena, Italia. -
2003.
- 19** **Nombre del congreso:** 25th Annual Meeting and 3rd Gordon Style Conference. -
Fecha de celebración: 2002
Entidad organizadora: British Zeolite Association, Edimburgo, Reino Unido -
2002.
- 20** **Nombre del congreso:** IV Seminarios de Estudios Avanzados sobre Diseño Molecular y Bioinformática. -
Fecha de celebración: 2002
Entidad organizadora: Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. -
2002.
- 21** **Nombre del congreso:** 12th Congress of the International Zeolite Association, -
Fecha de celebración: 2001
Entidad organizadora: Universidad de Montpellier y Sociedad Francesa de Zeolitas, Montpellier, Francia. -
2001.
- 22** **Nombre del congreso:** Metánica 2001. -
Fecha de celebración: 2001
Entidad organizadora: Ministerio de la Industria Sidero-Mecánica, La Habana, Cuba. -
2001.
- 23** **Nombre del congreso:** Workshop on Calcite and Related Materials, -
Fecha de celebración: 2001
Entidad organizadora: British CPP5 Network, Reading, Reino Unido. -
2001.
- 24** **Nombre del congreso:** 12th International Conference on Zeolites. -
Fecha de celebración: 1998
Entidad organizadora: Baltimore, USA. -
1998.
- 25** **Nombre del congreso:** III Conferencia Internacional de Química. -
Fecha de celebración: 1998
Entidad organizadora: Sociedad Cubana de Química, La Habana, Cuba. -
1998.



- 26** **Nombre del congreso:** IV Conferencia Nacional Zeolitas. -
Fecha de celebración: 1998
Entidad organizadora: Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. -
1998.
- 27** **Nombre del congreso:** Primer Taller Nacional de Materiales Compuestos, Composites'98. -
Fecha de celebración: 1998
Entidad organizadora: Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. -
1998.
- 28** **Nombre del congreso:** 5th International Conference on Natural Zeolites. -
Fecha de celebración: 1997
Entidad organizadora: Universidad de Napoles, Italia. -
1997.
- 29** **Nombre del congreso:** Evento por el Centenario por el Descubrimiento del Electrón. -
Fecha de celebración: 1997
Entidad organizadora: Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. -
1997.
- 30** **Nombre del congreso:** I Taller de Simulación Computacional y Diseño Molecular, Habana'97. -
Fecha de celebración: 1997
Entidad organizadora: Instituto Superior de Ciencias y Tecnologías Nucleares, La Habana, Cuba. -
1997.
- 31** **Nombre del congreso:** V Taller Iberoamericano de Tamices Moleculares. -
Fecha de celebración: 1997
Entidad organizadora: Universidad de Central de Caracas, Venezuela. -
1997.
- 32** **Nombre del congreso:** XV Simposio Iberoamericano de Catálisis. -
Fecha de celebración: 1996
Entidad organizadora: Universidad de Córdoba, Argentina. -
1996.

Gestión de I+D+i y participación en comités científicos

Comités científicos, técnicos y/o asesores

- 1** **Título del comité:** Buro de Arbitros de Proyectos Nacionales de la Agencia de Ciencia y Técnica. -
Entidad de afiliación: Ministerio de Ciencia, Tecnología y Medio Ambiente, Cuba, (CITMA) -
Fecha de finalización: 2012
- 2** **Título del comité:** Consejo de la Asociación Internacional de Zeolitas Naturales (INZA) -
Entidad de afiliación: Asociación Internacional de Zeolitas Naturales (INZA) -
Fecha de finalización: 2006



- 3 Título del comité:** Miembro del Comité de Maestría y Doctorado en Ciencia y Tecnología de Materiales -
Entidad de afiliación: Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana. -
Fecha de finalización: 2006
- 4 Título del comité:** Consejo Científico de la Universidad de La Habana, -
Entidad de afiliación: Universidad de La Habana, Cuba -
Fecha de finalización: 2004
- 5 Título del comité:** Academia de Ciencias -
Entidad de afiliación: Academia de Ciencias de Cuba, Cuba -
Fecha de finalización: 2002
- 6 Título del comité:** Consejo Científico Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE) – Facultad de Física -
Entidad de afiliación: Universidad de La Habana. -
Fecha de finalización: 2000
- 7 Título del comité:** Miembro -
Entidad de afiliación: Cubasolar (Sociedad Cubana de Energía Renovable) -
- 8 Título del comité:** Miembro -
Entidad de afiliación: Sociedad Cubana de Química -
- 9 Título del comité:** Vicepresidente, 2002 – 2008, miembro actualmente -
Entidad de afiliación: Sociedad Cubana de Física -

Otros méritos

Estancias en centros de I+D+i públicos o privados

- 1 Entidad de realización:** /entidad: Universidad de Guelph, Canadá. - Localización,
Fecha de inicio: 2010
Objetivos de la estancia: Estudios computacionales de la estructura y dinámica de nanopartículas -
- 2 Entidad de realización:** /entidad: University College London, Londres, Reino Unido. - Localización,
Fecha de inicio: 2009
Objetivos de la estancia: Estudios computacionales en zeolitas y enrejados metal –orgánicos y materiales relacionados -
- 3 Entidad de realización:** /entidad: Elettra Sincroton, Trieste, Italia. - Localización,
Fecha de inicio: 2009
Objetivos de la estancia: Estudios de difracción de Rayos-X del comportamiento térmico de zeolitas -
- 4 Entidad de realización:** /entidad: Universidad de Montpellier 2, Francia - Localización,
Fecha de inicio: 2008
Objetivos de la estancia: Estudios computacionales en zeolitas y enrejados metal –orgánicos y materiales relacionados -



- 5 Entidad de realización:** /entidad: University College London, Londres, Reino Unido. - Localización,
Fecha de inicio: 2007
Objetivos de la estancia: Estudios computacionales en zeolitas y enrejados metal –organicos y materiales relacionados -
- 6 Entidad de realización:** /entidad: University College London, Londres, Reino Unido - Localización,
Fecha de inicio: 2006
Objetivos de la estancia: Estudios computacionales en zeolitas y materiales relacionados -
- 7 Entidad de realización:** /entidad: University College London, Londres, Reino Unido - Localización,
Fecha de inicio: 2003
Objetivos de la estancia: Estudios computacionales en zeolitas y materiales relacionados -
- 8 Entidad de realización:** /entidad: University College London, Londres, Reino Unido - Localización,
Fecha de inicio: 2002
Objetivos de la estancia: Estudios computacionales en zeolitas y materiales relacionados -
- 9 Entidad de realización:** /entidad: Universidad Autónoma de Madrid, España. - Localización,
Fecha de inicio: 2000
Objetivos de la estancia: Cálculos cuánticos de embedding para sólidos -
- 10 Entidad de realización:** /entidad: University College London y Royal Institution, Londres, Reino Unido - Localización,
Fecha de inicio: 2000
Objetivos de la estancia: Estudios computacionales en zeolitas y materiales relacionados -
- 11 Entidad de realización:** /entidad: Royal Institution y University College London, Londres, Reino Unido - Localización,
Fecha de inicio: 1999
Objetivos de la estancia: Estudios computacionales en zeolitas y materiales relacionados -
- 12 Entidad de realización:** /entidad: Universidad Nacional Autónoma de México, DF México. - Localización,
Fecha de inicio: 1997
Objetivos de la estancia: diamantes.
- 13 Entidad de realización:** /entidad: Royal Institution, Londres, Reino Unido - Localización,
Fecha de inicio: 1996
Objetivos de la estancia: Estudios computacionales en zeolitas y materiales relacionados -