

Profesor Alejandro Toro-Labbé
Curriculum Vitae



Facultad de Química
Pontificia Universidad Católica de Chile

Santiago, Julio de 2018

RESUMEN

Alejandro Toro-Labbé, Porvenir (1954), Chile. Liceo José Victorino Lastarria. Licenciado en Química de la Universidad de Chile (1977). Docteur d'Etat ès Sciences Physiques de la Universidad Pierre et Marie Curie (1984), París, Francia. Profesor de la Universidad de Chile entre 1977 y 1997. Profesor Titular de la Universidad de Chile. Profesor Titular de la Pontificia Universidad Católica de Chile desde 1998. Director del Laboratorio de Química Teórica Computacional (QTC). Profesor Visitante en: Université Pierre et Marie Curie (París, Francia), Université Joseph Fourier (Grenoble, Francia) Université Claude Bernard (Lyon, Francia), University of Georgia (USA), University of New Orleans (USA), Universidad Autónoma Metropolitana (México), Universidad de Girona (España), Universidad Autónoma de Madrid (España), Universidad Libre de Bruselas (Bélgica), FRIAS-Freiburg Institute for Advanced Studies (Alemania). Director de **14 Tesis de Licenciatura en Química**. Director de **2 Tesis de Magister en Química**. Director de **19 Tesis de Doctorado en Química**. Miembro de variadas comisiones universitarias y de carácter nacional en CONICYT y FONDECYT y la Academia Chilena de Ciencias. Presidente del Consejo Superior de Ciencia de FONDECYT. Director de Investigación y Postgrado, Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Becas *Marie Curie* de la Unión Europea 1991 y 2017. Cátedra Presidencial en Ciencias 1998. Miembro Correspondiente de la Academia Chilena de Ciencias. Beca *John Simon Guggenheim* 2006. Medalla de Honor de la Pontificia Universidad Católica de Chile. Editor Asociado de *Journal of Molecular Modeling* (Springer). Miembro de Comité Editorial de *Journal of Mathematical Chemistry* (Springer). Miembro del Comité Editorial de *Wiley's Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*. Miembro del Comité Editorial de *Journal of the Chilean Chemical Society*. Investigador Principal y Coinvestigador en más de **30 Proyectos** de Investigación. Director del Núcleo Milenio Chemical Processes and Catalysis (CPC). Autor y Coautor de **224 artículos** científicos con mas de **5700 citas** en 3000 artículos científicos; índice **h = 39** (Fuente: Web of Science). Coautor de dos Libros de Química para la Enseñanza Media (Zig-Zag 2001, 2002, 2003). Editor de *Theoretical Aspects of Chemical Reactivity* (Elsevier 2006).

1. DATOS PERSONALES

- Nombre Completo: **Alejandro Miguel Toro Labbé**.
- RUT: 6.625.464-K.
- ResearcherID: J-5026-2013
- ORCID: 0000-0001-9906-2153
- Dirección Personal: Avda. Antonio Varas 1576, Departamento 402. Providencia, Santiago, Chile. Teléfono Móvil: 998246973.
- Dirección Profesional: Laboratorio de Química Teórica Computacional (QTC), Departamento de Química-Física, Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Avenida. Vicuña Mackenna 4860, Macul, Santiago, Chile.
- Teléfono Oficina: (56-2) 2686 4746; Teléfono Secretaría: (56-2) 2686 4743. Fax: (56-2) 2686 4744.
Correo Electrónico: atola@puc.cl
Página Web: <http://quimicateorica.uc.cl/index.html>

2. DIPLOMAS Y GRADOS ACADÉMICOS

1. Licenciado en Ciencias con Mención en Química, Universidad de Chile, Santiago, 1977.
Tesis de Licenciatura: *Cálculo de Momentos Cuadrupolares π en Moléculas Orgánicas Mediante Teoría de Perturbación. Estado Fundamental y Primer Estado Excitado Singulete.*
Facultad de Ciencias, Universidad de Chile.
Santiago, Chile. Octubre de 1977.
2. Diploma de Estudios Avanzados (DEA) en Fisicoquímica (Diplôme d'Etudes Approfondies en Chimie Physique),
Tesis de DEA: *Effet des Supersymetries sur la Dépendance Conformationnelle du Potentiel de Torsion de Molecules a Deux Rotateurs: Résultats de Calcul pour l'Acetone et la Dimethylamine*

Université Pierre et Marie Curie (Paris VI).
Paris, Francia. Junio de 1980.

3. Doctor de Estado en Ciencias Físicas
(Docteur d'Etat ès Sciences Physiques),
Tesis de Doctorado: *Contribution à l'Etude des Effets de Symétrie sur la Dépendence Conformationnelle des Grandeurs Moléculaires des Systèmes Non Rigides*
Université Pierre et Marie Curie (Paris VI).
Paris, Francia. Diciembre de 1984.

3. CARRERA ACADEMICA

1. Universidad de Chile (1977-1998):

- 1977: Académico Jornada Completa, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile. Categoría : Instructor.
- 1979: Entre Octubre de 1979 y Diciembre de 1984. Comisión de Estudios en el *Centre de Mécanique Ondulatoire Appliquée du Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS)*, para efectuar estudios de post grado conducentes al grado de Doctor de Estado en Ciencias Físicas. Grado obtenido en Diciembre de 1984 con mención "Très Honorable".
- 1985: Promoción a la categoría de **Profesor Asistente**.
- 1989: Promoción a la categoría de **Profesor Asociado**.
- 1997: Promoción a la Categoría de **Profesor Titular**.

2. Pontificia Universidad Católica de Chile (desde 1998):

- 1998: Incorporación como Académico Jornada Completa, Facultad de Química. Categoría : **Profesor Titular**.
- 1998: Director del Laboratorio de Química Teórica Computacional (QTC), Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile.
- 2012: Director de Investigación y Postgrado, Dirección de Investigación y Postgrado (DIPOG), Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile.

3. Profesor Visitante en el Extranjero

- 1991: Profesor Visitante en el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC). Madrid, España.
- 1991: Profesor Visitante en la Universidad Pierre et Marie Curie y en el Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS). París, Francia.
- 1992: Profesor Visitante en la Universidad de Saskatchewan. Saskatoon, Canadá.
- 1995: Profesor Visitante en el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC). Madrid, España.
- 1997: Profesor Visitante en el Instituto de Química Computacional de la Universidad de Girona. Girona, España.
- 1998: Profesor Visitante en el Center for Computational Quantum Chemistry (CCQC), Athens, Georgia. Estados Unidos.
- 1999: Profesor Visitante en el Instituto de Química Computacional de la Universidad de Girona. Girona, España.
- 2001: Profesor Visitante en la Universidad Joseph Fourier. Grenoble, Francia.
- 2003: Profesor Visitante en la Universidad Claude Bernard. Lyon, Francia.
- 2004: Profesor Visitante, University of Georgia, Center for Computational Quantum Chemistry (CCQC), Athens, Georgia, USA.
- 2006: Profesor Visitante en la Universidad Joseph Fourier. Grenoble, Francia.
- 2006: Profesor Visitante en la Universidad Autónoma de Madrid. Madrid, España.
- 2007: Profesor Visitante en la Universidad Libre de Bruselas (VUB). Bruselas, Bélgica.
- 2009: Profesor Visitante en la École Normale Supérieure de Chimie de Paris (ENSCP). París, Francia.
- 2010: Profesor Visitante en la Universidad Charles. Praga, República Checa.

- 2010: Profesor Visitante en la Universidad Autónoma de Madrid. Madrid, España.
- 2011: Profesor Visitante en la Universidad Autónoma de Madrid. Madrid, España.
- 2012: Profesor Visitante en la Université de Rouen. Rouen, Francia.
- 2013: Profesor Visitante en la Université Claude Bernard. Lyon, Francia.
- 2016: Profesor Visitante en la Université Claude Bernard. Lyon, Francia.
- 2017: Profesor Visitante en Freiburg Institute for Advanced Studies (FRIAS) Albert-Ludwigs Universitat, Freiburg, Alemania

4. RESUMEN DE ACTIVIDADES DOCENTES

- 1976–1979 Ayudante Instructor en diversas Cátedras dictadas en el Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile.
- 1979–1984 Comisión de Estudios en Francia.
- 1985–1986 Profesor de los siguientes cursos dictados por el Departamento de Química de la Facultad de Ciencias:
Fisicoquímica I: Termodinámica; Fisicoquímica II: Cinética Química; Química Teórica; Teoría de Grupos de Simetría de Moléculas No Rígidas.
- 1987–1988 Estadía Postdoctoral en el *Department of Chemistry, The Pennsylvania State University*, University Park, Pennsylvania, USA.
- 1989–1998 Profesor de diversos cursos de pre y postgrado dictados en la Facultad de Ciencias de la Universidad de Chile:
Química General I; Química General II; Fisicoquímica I: Termodinámica; Fisicoquímica II: Cinética Química; Seminarios de Post Grado en Química; Química Teórica; Fisicoquímica Avanzada; Enlace Químico y Estructura Molecular; Métodos Matemáticos de la Fisicoquímica. Química Moderna (FCFM, Universidad de Chile).
- 1998–2017 Profesor de diversos cursos de pre y postgrado dictados en la Facultad de Química de la Pontificia Universidad Católica de Chile:

1. Química Física III: Introducción a la Química Cuántica.
2. Química Teórica Computacional.
3. Teoría de Grupos de Simetría y sus Aplicaciones en Química Cuántica.
4. Fisicoquímica Avanzada.
5. Reactividad Química.

5. FORMACIÓN DE CAPITAL HUMANO AVANZADO.

5.1. Dirección de Tesis de Pregrado: Licenciatura en Química.

1. **Bárbara Herrera Pisani.**

Título de la Tesis: *Estudio Teórico de la Estructura y Propiedades de Nuevos Materiales: Sistemas del Tipo $C_{8n}H_{7n}$ y $C_{4n}H_8$ ($n \geq 2$).*

Grado Académico: Licenciado en Química.

Pontificia Universidad Católica de Chile, Noviembre 2000.

2. **Felipe Bulat Jara.**

Título de la Tesis: *Desarrollo Teórico de Modelos de Energía Potencial en Procesos Torsionales y de Transferencia. El Postulado de Hammond Generalizado.*

Grado Académico: Licenciado en Química.

Pontificia Universidad Católica de Chile, Abril 2001.

3. **Jorge Martínez Araya.**

Título de la Tesis: *Una Aproximación a la Reactividad de Fullerenos. Caracterización de la Interacción Dieno–Dienófilo.*

Grado Académico: Licenciado en Química.

Pontificia Universidad Católica de Chile, Enero 2002.

4. **José Vicente Correa Correa.**

Título de la Tesis: *Estudio Teórico de la Rotación Interna de la Histamina, Una Aproximación a la Interacción con su Receptor.*

Grado Académico: Licenciado en Química y Farmacia.

Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Diciembre de 2005.

5. **Felipe Andrés Aros Góngora.**

Título de la Tesis: *Estudio Teórico de la Reacción de Abstracción de*

Hidrógeno por el Radical Hidroxilo en HCFC-21.

Grado Académico: Licenciado en Química.

Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Marzo de 2006.

6. **María Belén Montserrat Camarada Uribe.**

Título de la Tesis: *Estudio Teórico y Experimental del Sistema 3,4-Etilendióxitiofeno.*

Grado Académico: Licenciado en Química.

Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Mayo de 2007.

7. **Eleonora Echegaray Zipper.**

Título de la Tesis: *Estudio Teórico de las Reacciones SN2: $X^- + CH_3Y \rightarrow Y^- + CH_3X$ ($X, Y = F, Cl$). Mecanismo y Efecto del Disolvente.*

Grado Académico: Licenciado en Química.

Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Noviembre de 2007.

8. **Stefan Vogt Geisse.**

Título de la Tesis: *Reacciones Químicas en el Medio Interestelar: La Reacción de Isomerización $HOC^+ \rightarrow HCO^+$ Catalizada por H_2 .*

Grado Académico: Licenciado en Química.

Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Agosto de 2008.

9. **Rodrigo Recabarren.**

Título de la Tesis: *Caracterización Teórica de Procesos de Transferencia de Hidrógeno en Dímeros de Acido Fórmico y Derivados Azufrados.*

Grado Académico: Licenciado en Química.

Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Julio de 2011.

10. **Ricardo Inostroza Rivera.**

Título de la Tesis: *Caracterización Teórica de Procesos de Transferencia de Hidrógeno en Dímeros de Acido Fórmico y Derivados Azufrados.*

Grado Académico: Licenciado en Química.

Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Julio de 2010.

11. Silvia Díaz Acosta.

Título de la Tesis: *Estudio Teórico del Mecanismo de Formación de Aminoacetonitrilo como Precursor Directo del Aminoácido Glicina en el Medio Interestelar.*

Grado Académico: Licenciado en Química.

Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Enero de 2011.

12. Karla Daniela Soto Díaz.

Título de la Tesis: *Mecanismo de Interacción Hidrógeno-Grafeno. Un Estudio Teórico.*

Grado Académico: Licenciado en Química.

Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Noviembre de 2012.

13. Daniela Guzmán Angel.

Título de la Tesis: *Mecanismo de Interacción Hidrógeno-Grafeno. Un Estudio Teórico.*

Grado Académico: Licenciado en Química.

Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Noviembre de 2014.

14. Alejandra Maureira.

Título de la Tesis: *Mecanismo de Interacción Hidrógeno-Grafeno. Un Estudio Teórico.*

Grado Académico: Licenciado en Química.

Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Enero de 2015.

5.2. Dirección de Tesis de Postgrado: Magister y Doctorado.**1. Gloria I. Cárdenas–Jirón, M.Sc.**

Título de la Tesis: *Dinámica de la Rotación Interna en Sistemas Moleculares de Un Rotor.*

Grado Académico: Magister en Ciencias con Mención en Química.

Facultad de Ciencias, Universidad de Chile. Marzo 1993.

2. Joaquín Lahsen Aboid, M.Sc.

Título de la Tesis: *Estudio Teórico del Efecto Solvente Sobre el Perfil de Dureza Química en Procesos de Rotación Interna.*

Grado Académico: Magister en Ciencias con Mención en Química.
Facultad de Ciencias, Universidad de Chile. Mayo 1998.

3. **Dra. Gloria I. Cárdenas Jirón.**

Título de la Tesis: *Modelos Teóricos de Reacciones de Isomerización Unimolecular.*

Grado Académico: Doctor en Ciencias con Mención en Química.
Facultad de Ciencias, Universidad de Chile. Noviembre de 1996.

La Dra. Gloria Cárdenas-Jirón es actualmente Profesor Titular de la Universidad de Santiago de Chile.

4. **Dr. Luis A. Padilla Campos.**

Título de la Tesis: *Estudio de la Interacción Alkali-Superficie de Cobre (111). Potenciales de Interacción, Propiedades y Simulación.*

Grado Académico: Doctor en Ciencias con Mención en Química.
Facultad de Ciencias, Universidad de Chile. Junio de 1997.

El Dr. Luis Padilla-Campos es actualmente Profesor Asociado de la Universidad de Antofagasta, Chile.

5. **Dr. Pablo Jaque Olmedo.**

Título de la Tesis: *Índices de Reactividad y Selectividad para Caracterizar Moléculas, Clusters y Reacciones Químicas.*

Grado Académico: Doctor en Ciencias con Mención en Química.
Facultad de Ciencias, Universidad de Chile. Noviembre de 2003.

El Dr. Pablo Jaque Olmedo es actualmente Profesor Titular de la Universidad Nacional Andrés Bello, Santiago, Chile.

6. **Dra. Soledad Gutiérrez-Oliva.**

Título de la Tesis: *Análisis Teórico de Reacciones Químicas en el Espacio $\{\mu, \eta, V\}$.*

Grado Académico: Doctor en Ciencias con Mención en Química.
Facultad de Ciencias, Universidad de Chile. Septiembre de 2004.

La Dra. Soledad Gutiérrez-Oliva es actualmente Profesor Asociado de la Pontificia Universidad Católica de Chile.

7. **Dra. Jenny Zevallos Dávila.**

Título de la Tesis: *Estudio Teórico de la Estructura, Propiedades y Reactividad de los Diazenos.*

Grado Académico: Doctor en Ciencias Exactas con Mención en Química. Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Septiembre de 2004.

La Dra. Jenny Zevallos Dávila es actualmente Docente Principal de la Universidad Tecnológica de Perú, Arequipa, Perú.

8. **Dra. Bárbara Herrera Pisani.**

Título de la Tesis: *Estudio Teórico de Transferencias Protónicas en Bases de ADN y en Sistemas Modelo.*

Grado Académico: Doctor en Ciencias Exactas con Mención en Química. Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Marzo de 2005.

La Dra. Bárbara Herrera Pisani es actualmente Profesor Asociado de la Pontificia Universidad Católica de Chile.

9. **Dr. Felipe Bulat Jara.**

Título de la Tesis: *Aspectos Metodológicos y Teóricos en el Estudio de Reactividad, Propiedades Eléctricas y Superficies de Energía POTencial.*

Grado Académico: Doctor en Ciencias Exactas con Mención en Química. Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Julio de 2005.

El Dr. Felipe Bulat Jara es actualmente Investigador en Fable Theory & Computation LLC, Washington, Estados Unidos.

10. **Dr. José Luis Moncada Reyes.**

Título de la Tesis: *Estudio Teórico de Reacciones de Isomerización Rotacional en Guanina y Heterociclos Conjugados*

Grado Académico: Doctor en Ciencias Exactas con Mención en Química. Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Abril de 2006.

El Dr. José Luis Moncada Reyes es actualmente Docente de la Universidad Pedro de Valdivia, Santiago, Chile.

11. Dr. Christophe Morell.

Título de la Tesis: *Un Nouveau Descripteur de la Réactivité Chimique: Etude Théorique et Applications à la Sélectivité de Quelques Réactions Chimiques*

Grado Académico en Francia: Docteur de l'Université Joseph Fourier-Grenoble I. Université Joseph Fourier (Grenoble, Francia). Grado Académico en Chile: Doctor en Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Octubre de 2006.

El Dr. Christophe Morell es actualmente Profesor Catedrático de la Universidad Claude Bernard de Lyon, Francia.

12. Dra. Elizabeth Rincón Bedoya.

Título de la Tesis: *Estudio Teórico de la Interacción de Cationes Metálicos con Bases del ADN desde la Perspectiva de la Teoría de Funcionales de la Densidad Conceptual.*

Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Enero de 2007.

La Dra. Elizabeth Rincón Bedoya es actualmente Profesora Asociada de la Universidad Austral de Chile.

13. Dr. Jorge Martínez Araya.

Título de la Tesis: *Estudio Teórico de la Polimerización de Etileno Catalizada por Metilbis(ciclopentadienil) Metaloceno del Grupo IVA.*

Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Junio de 2008.

El Dr. Jorge Martínez Araya es actualmente Profesor Asociado de la Universidad Nacional Andrés Bello, Santiago, Chile.

14. Dr. Patricio Flores Morales.

Título de la Tesis: *Estudio Teórico-Experimental de la Reacción de Aminas con Metilglioxal: Hacia la Comprensión de los Procesos Causantes de la Catarata y a su Posible Prevención.*

Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. Abril de 2009.

El Dr. Patricio Flores Morales es actualmente Profesor Asistente de la Universidad de Concepción, Concepción, Chile.

15. **Dr. José Vicente Correa.**

Título de la Tesis: *Reactivity of Five-Membered Rings: A Conceptual Density Functional Theory Study.*

Cotutoría: Pontificia Universidad Católica de Chile y Vrije Universiteit Brussel (Universidad Libre de Bruselas). 16 de Enero de 2012.

El Dr. José Vicente Correa es actualmente Docente en la Universidad Pedro de Valdivia, Santiago, Chile.

16. **Dra. María Luisa Cerón Villarroel.**

Título de la Tesis: *Estudio Teórico y Experimental del Mecanismo de la Reacción del Reformado de Metanol sobre Catalizadores Cu y Ni Soportados en Circonia.*

Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile. 30 de Enero de 2012.

La Dra. María Luisa Cerón es actualmente Profesora Asistente de la Universidad Finis Terrae, Santiago, Chile.

17. **Dra. Fernanda Jacqueline Duarte González.**

Título de la Tesis: *Hydrogen Activation by Carbene Systems and Proton Transfer Reactions. A Reaction Electronic Flux Analysis.* Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. 12 de Julio de 2012.

La Dra. Fernanda Duarte González es actualmente Profesora en la Universidad de Edinburgo, Escocia.

18. **Dr. Ricardo Inostroza Riveros.**

Título de la Tesis: *Aspectos del Mecanismo de Reacción de Transferencias Protónicas en Formamida y Derivados. Posibles Aplicaciones en Biomoléculas.* Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. 12 de Enero de 2015.

Codirectores de Tesis: Dra. Bárbara Herrera Pisani (PUC), Dr. Laurent Joubert (Université de Rouen, Francia).

El Dr. Ricardo Inostroza es actualmente Profesor Asistente

de la Universidad Arturo Prat (UAP), Iquique, Chile.

19. **Dra. Silvia Díaz Acosta.**

Título de la Tesis: *Formación de Aminoácidos en el Medio Interestelar. Una Perspectiva Teórica*. Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. 22 de Junio de 2015. **Codirectora de Tesis:** Dra. Soledad Gutiérrez-Oliva.

La Dra. Silvia Díaz Acosta es Asesora Científica del Senado de la República de Chile

20. **Dra. Daniela Ortega Ulloa.**

Título de la Tesis: *Theoretical Study of the Mechanism of Complex Catalytic Reactions*. Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile. 2 de Noviembre de 2017. **Codirector de Tesis:** Dra. Dominik Horinek (University of Regensburg, Germany).

La Dra. Daniela Ortega Ulloa es actualmente investigadora postdoctoral en la Universidad Tecnológica Metropolitana (UTEM)

5.3. Dirección de Tesis de Grado en Curso:

1. **Rocío Durán.**

Tesis de Doctorado en Curso. Fecha de término: 2018.

2. **Daniela Guzmán Angel.**

Tesis de Doctorado en Curso. Fecha de término: 2019.

3. **Nery Villegas Escobar.**

Tesis de Doctorado en Curso. Fecha de término: 2020.

4. **Cesar Barrales.**

Tesis de Doctorado en Curso. Fecha de término: 2019.

5. **Angie Forero Girón.**

Tesis de Doctorado en Curso. Fecha de término: 2020.

5.4. Dirección de Post Doctorados:

1. **Dra. Patricia Pérez López:** 1999-2001. Financiamiento: Proyecto FONDECYT # 3990033.
La Dra. Patricia Pérez López es actualmente Profesora Titular de la Universidad Nacional Andrés Bello (UNAB).
2. **Dr. Santanu Sengupta:** 2000-2001. Financiamiento: Proyecto FONDECYT # 3000028.
El Dr. Santanu Sengupta es actualmente Profesor Veer Surendra Sai University of Technology, Burla, India.
3. **Dr. Pablo Jaque Olmedo:** 2004-2005. Financiamiento: Proyecto MECESUP # PUC 0004.
El Dr. Jaque Olmedo es actualmente Profesor Asociado en la Universidad Nacional Andrés Bello.
4. **Dra. Soledad Gutiérrez-Oliva:** 2005-2007. Financiamiento: Programa Bicentenario en Ciencia y Tecnología.
La Dra. Gutiérrez-Oliva es actualmente Profesora Asociada de la Pontificia Universidad Católica de Chile.
5. **Dra. Bárbara Herrera Pisani:** 2005-2007. Financiamiento: Programa Bicentenario en Ciencia y Tecnología.
La Dra. Herrera Pisani es actualmente Profesora Asociada en la Pontificia Universidad Católica de Chile.
6. **Dr. William Tiznado Vásquez:** 2008-2009. Financiamiento: FONDECYT.
El Dr. William Tiznado Vásquez es actualmente Profesor Asociado en la Universidad Nacional Andrés Bello.
7. **Dr. Esteban Vöhringer-Martínez:** 2009-2010. Financiamiento: Fundación Alexander von Humboldt.
El Dr. Vöhringer-Martínez es actualmente Profesor Asociado en la Universidad de Concepción.
8. **Dr. Santanab Giri:** 2011-2012. Financiamiento: CIMAT, Universidad de Chile.
El Dr. Santanab Giri es actualmente Investigador Asociado en el Indian Institute of Technology.

9. **Dr. Sebastián Miranda Rojas:** 2012-2014. Financiamiento: FONDECYT.
El Dr. Sebastián Miranda Rojas es actualmente Profesor Asistente de la Universidad Nacional Andrés Bello, Santiago, Chile.
10. **Dr. Diego Cortes Arriagada:** 2013-2016. Financiamiento: FONDECYT, Núcleo Milenio Chemical Processes and Catalysis (CPC).
El Dr. Cortés es actualmente investigador en el Programa Institucional de Fomento a la Investigación, Desarrollo e Innovación. Universidad Tecnológica Metropolitana. Santiago, Chile.
11. **Dr. Stefan Vogt:** 2014-2017. Financiamiento: FONDECYT, Núcleo Milenio Chemical Processes and Catalysis (CPC).
El Dr. Vogt es actualmente Profesor Asistente en la Universidad de Concepción. Concepción, Chile.
12. **Dr. Ricardo Inostroza:** 2015-2017. Financiamiento: Núcleo Milenio Chemical Processes and Catalysis (CPC).
El Dr. Inostroza es actualmente Profesor Asistente en la Universidad Arturo Prat, Iquique, Chile.
13. **Dra. Silvia Díaz Acosta:** 2015-2016. Financiamiento: Núcleo Milenio Chemical Processes and Catalysis (CPC).
La Dra. Díaz Acosta es actualmente Asesora Científica del Senado de la República de Chile.
14. **Dra. Karina Massiel Muñoz Becerra:** 2016. Financiamiento: Núcleo Milenio Chemical Processes and Catalysis (CPC).
La Dra. Muñoz Becerra es actualmente Investigador Postdoctoral en la Universidad Católica de Chile. Santiago, Chile.
15. **Dr. Ricardo Matute :** 2016-2017. Financiamiento: Núcleo Milenio Chemical Processes and Catalysis (CPC).

6. PRINCIPALES ACTIVIDADES ADMINISTRATIVAS

- 1982: Miembro del Comité Organizador del Simposio Internacional *Symmetries and Properties of Non Rigid Molecules*. Montrouge, Francia.
- 1985–1986: Miembro del Consejo del Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile.
- 1987–1990: Coordinador de Computación de la Facultad de Ciencias.
- 1989: Coordinador en Chile del Proyecto Florida–Latinoamérica patrocinado por la Universidad de Florida, Gainesville, Florida, USA.
- 1990: Miembro del Comité de Química, Dirección de Investigación de la Universidad de Chile.
- 1991–1997: Miembro del Comité Académico de Post Grado en Química de la Universidad de Chile.
- 1992–1994: Miembro de la Comisión de Calificación Académica de la Facultad de Ciencias, Universidad de Chile.
- 1994: Director Académico, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile.
- 1994–1998: Miembro del Comité de Becas de Postgrado en Química de CONICYT.
- 1996: Miembro del Comisión Nacional de Acreditación de Programas de Postgrado en Química de CONICYT.
- 1997: Coordinador del Comité de Becas de Postgrado en Química de CONICYT.
- 1997–2002: Miembro del Grupo de Estudio de Química, FONDECYT.
- 1999–2002: Director del Grupo de Estudio de Química, FONDECYT.
- 1999–2012: Miembro del Comité de Investigación y Postgrado, Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile.
- 1999–2001: Jefe del Departamento de Química–Física, Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile.

- 1999–2009: Miembro del Consejo Asesor de la Dirección de Investigación y Postgrado, PUC.
- 2000–2005: Miembro de la Comisión de Evaluación de la Calidad de Programas de Postgrado de Universidades Autónomas (CONAP), Ministerio de Educación, CONICYT.
- 2006–2009: Miembro del Consejo Superior de Ciencia, FONDECYT.
- 2008–2009: Presidente del Consejo Superior de Ciencia, FONDECYT.
- 2010–2014: Coordinador de Química, Becas Conicyt y Becas Chile.
- 2012–2014: Miembro del Comité Evaluador de Proyectos FONDEQUIP, Conicyt.
- 2012–2015: Director de Investigación y Postgrado, Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile.
- 2015–a la fecha: Miembro del Consejo Asesor de FONDEQUIP, Fondo de Equipamiento Científico y Tecnológico de CONICYT.

7. PREMIOS Y RECONOCIMIENTOS

- 1979 Beca del Gobierno Francés para efectuar estudios de Doctorado en en la Universidad Pierre et Marie Curie, París, Francia.
- 1987–1988 Beca Postdoctoral en el Department of Chemistry, The Pennsylvania State University. University Park, Pennsylvania, USA.
- 1990 Miembro Correspondiente de la Academia Europea de Ciencias, Artes y Letras.
- 1991 **Beca Marie Curie** otorgada por la Unión Europea para realizar una pasantía en el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), Madrid, España. Febrero–Abril 1991.
- 1991 **Beca Marie Curie** otorgada por la Unión Europea para realizar una pasantía en la Universidad Pierre et Marie Curie y en el Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS), París, Francia. Mayo–Julio 1991.

- 1994 Beca Fundación Andes, Programa de Estadías de Investigación. Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS), París, Francia, Octubre–Noviembre 1994.
- 1995 Estadía en régimen sabático en el CSIC, Madrid. Dirección General de Investigación Científica y Tecnológica (DGICYT) del Ministerio de Educación y Ciencia de España.
- 1998 **Cátedra Presidencial en Ciencias.** Presidencia de la República de Chile. Santiago, Chile.
- 1999 **Medalla de Honor,** Pontificia Universidad Católica de Chile.
- 2005 **Miembro Correspondiente de la Academia Chilena de Ciencias.**
- 2006 **Beca John Simon Guggenheim Memorial Foundation,** New York, Estados Unidos.
- 2008 Electo Miembro Permanente del Board de la **World Association of Theoretical and Computational Chemistry (WATOC).**
- 2017 Marie Sklodowska-Curie Fellowship otorgada por la Unión Europea para realizar una estadía de 10 meses en Freiburg Institute for Advanced Studies (FRIAS), Albert-Ludwigs Universitat Freiburg, Freiburg, Alemania.

8. SEMINARIOS Y CONFERENCIAS

Se destacan conferencias en las siguientes instituciones:

1. Centre de Mécanique Ondulatoire Appliquée du CNRS. París, Francia.
2. Facultad de Ciencias, Universidad de Chile.
3. Facultad de Química, Pontificia Universidad Católica de Chile.
4. Department of Chemistry, The Pennsylvania State University, University Park, Pennsylvania, Estados Unidos.

5. Department of Chemistry and Physical Sciences, Philadelphia College of Textiles and Sciences. Philadelphia, Pennsylvania, Estados Unidos.
6. Laboratoire de Chimie Physique, Université Pierre et Marie Curie. París, Francia.
7. Instituto de Estructura de la Materia, Consejo Superior de Investigaciones Científica (CSIC). Madrid, España.
8. Department of Chemistry, University of Saskatchewan, Saskatoon, Canadá.
9. Departamento de Química, Universidad de Granada, Granada, España.
10. Instituto de Química Computacional, Universidad de Girona. Girona, España.
11. Departamento De Química, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México.
12. Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del I.P.N., DF, México.
13. Center for Computational Quantum Chemistry (CCQC), University of Georgia, Athens, Georgia, Estados Unidos.
14. Chemistry Department, Duke University, Durham, Estados Unidos.
15. Commissariat d'Energie Atomique, Grenoble, Francia.
16. Université Joseph Fourier, Grenoble, Francia.
17. École Normale Supérieure de Chimie de Paris, Francia.
18. Université Claude Bernard (Lyon I), Lyon, Francia.
19. Universidad Autónoma de Madrid, España.
20. Department of Chemistry, Duke University, Estados Unidos.
21. Universidad de Guanajuato, México.
22. Universidad de Buenos Aires, Argentina.
23. Universidad de Concepción, Concepción, Chile.

24. Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.
25. Universidad de Antioquía, Medellín, Colombia.
26. Free University of Brussels (VUB), Bélgica.
27. Freiburg Institute for Advanced Studies (FRIAS), Freiburg, Alemania.
28. Université de Strasbourg, Strasbourg, Francia.
29. Universität Heidelberg, Heidelberg, Alemania.
30. Universidad Autónoma de México, México.

9. OTRAS ACTIVIDADES CIENTIFICAS

- Par Revisor de Revistas Nacionales e Internacionales:
 1. *Journal of the American Chemical Society.*
 2. *Journal of Physical Chemistry A.*
 3. *Journal of Physical Chemistry B.*
 4. *Chemical Physics Letters.*
 5. *Computational and Theoretical Chemistry.*
 6. *Journal of Mathematical Chemistry.*
 7. *Journal of Molecular Modeling.*
 8. *Journal of Chemical Physics.*
 9. *Tetrahedron.*
 10. *International Journal of Quantum Chemistry.*
 11. *Journal of Physical Organic Chemistry.*
 12. *Wiley's Interdisciplinary Reviews.*
 13. *Theoretical Chemistry Accounts.*
 14. *Physical Chemistry Chemical Physics.*
 15. *ChemPhysChem.*

- Par Revisor de Proyectos de Investigación:
 1. Fondo Nacional de Ciencias y Tecnología, FONDECYT.
 2. Pontificia Universidad Católica de Chile.
 3. Universidad de Chile.
 4. Universidad Católica del Norte.
 5. Universidad de Concepción.
 6. Universidad Andrés Bello.
 7. Universidad de la República, Uruguay.
 8. Research Foundation (FWO), Flanders, Bélgica.
 9. Fond de la Recherche Scientifique (FNRS), Bélgica.

10. American Chemical Society, Petroleum Research Fund, Estados Unidos.
- Miembro de las Siguietes Sociedades Científicas:
 1. Sociedad Chilena de Química.
 2. American Chemical Society.
 3. Centre de Mécanique Ondulatoire Appliquée (CMOA, Francia).
 4. World Association of Theoretical and Computational Chemist (WATOC).
 - Editoriales y Comités Científicos:
 1. Editor Asociado de *Journal of Molecular Modeling*, Springer.
 2. Miembro del Comité Editorial de *Journal of Mathematical Chemistry*, Springer.
 3. Miembro del Comité Editorial de *Wiley's Interdisciplinary Reviews. Computational Molecular Science*.
 4. Miembro del Comité Editorial de *Journal of the Chilean Chemical Society*.
 5. Miembro del Comité Científico de *Molecular Engineering* desde Enero de 1995. Kluwer Academic Publishers.
 6. Miembro del Comité Editorial de *Anales de la Academia de Ciencias*, Academia Chilena de Ciencias, Instituto de Chile.
 7. Editor Invitado de *Quantum Theory, Theoretical and Computational Chemistry*. Volumen Especial de: *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, **433**, (1998). Elsevier, 1998.
 8. Editor de *Theoretical Aspects of Chemical Reactivity*. Volumen 19 de la Serie *Theoretical and Computational Chemistry*. Elsevier, Amsterdam, 2006.
 - Comités y Organización de Congresos Científicos.
 1. Miembro del Comité Organizador del **XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUI-TEL 1995**, 25–29 de Septiembre, Pucón, Chile.

2. Miembro del Comité de Honor de **QUITEL (Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina)**.
3. Miembro del Comité Científico del **XXIV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 1998**. Puebla, México.
4. Miembro del comité Científico de las **XXIII Jornadas Chilenas de Química**. Valdivia, Noviembre de 1999.
5. Organizador del **Simposio Internacional Gaussian en Chile**. SECICO-PUC, 13-16 de Noviembre de 2002.
6. Miembro del Comité Científico del **XXVII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2003**. Marrakesh, Marruecos 2003.
7. Miembro del Comité Científico del **XXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2005**. Isla Margarita, Venezuela 2005.
8. Miembro del Comité Científico del **XXXVI Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2010**. Anglet, Francia 2010.
9. Miembro del Comité Científico del **XXXVII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2011**. Rivera Maya, México 2011.
10. Miembro del Comité Científico del **XXXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2012**. Natal, Brasil 2012.
11. Miembro del Comité Organizador del Congreso Internacional **Summer Talks in Santiago III. Recent Developments in Quantum Chemistry**. Santiago, Enero de 2012.
12. Miembro del Comité Científico del **XXXIX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2013**. Granada, España 2013.
13. Presidente del Comité Organizador del Congreso Internacional de la *World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)*, **WATOC2014**, Santiago, Chile. 5-10 Octubre de 2014.

14. Miembro del Comité Científico del XL Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2014. Islas Galápagos, Ecuador 2014.
15. Miembro del Comité Científico del XLI Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2015. Turín, Italia 2015.
16. Miembro del Comité Científico del XLII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2016. Montevideo, Uruguay 2016.
17. Miembro del Comité Científico del XLIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2017. París, Francia 2017.
18. Organizador del XLIV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2018. 8-12 de Octubre de 2018. Santiago, Chile.

10. PROYECTOS DE INVESTIGACION

- 1985 Proyecto FONDECYT N°5033, *Estudio Teórico de los Efectos de la Simetría sobre la Dinámica de Sistemas No Rígidos*. **Calidad: Investigador Responsable.**
- 1985–1989 Participación en otros Proyectos de Investigación en calidad de **Investigador Asociado.**
- 1986–1989 Proyecto DTI Q 2445, *Estudio Teórico de la Dependencia Conformacional y Efecto del Solvente sobre las Propiedades Termodinámicas de Equilibrios Acido–Base: Aminas Aromáticas*. **Calidad: Investigador Responsable.**
- 1989–1990 Proyecto FONDECYT N°1175, *Dinámica y Estructura de Sistemas Moleculares en Equilibrio Conformacional*. **Calidad: Investigador Responsable.**
- 1990–1992 Proyecto DTI Q–3071/9013, *Estudio Teórico de Propiedades Estáticas y Dinámicas de Equilibrios Conformacionales en Compuestos Capto–Dativos. Modelo de Estados de Transición y Reactividad en Fase Gas y en Fase Condensada*. **Calidad: Investigador Responsable.**

- 1991–1993 Proyecto FONDECYT N°0835 *Caracterización Químico–Matemática de Procesos Dinámicos y Estructuras Moleculares*. **Calidad: Investigador Responsable.**
- 1992 Proyecto NSERC (Natural Sciences and Engineering Research Council, Canadá), *New Rules for the Characterization of Potential Barriers in Isomerization reactions and Phase Transitions*. **Calidad: Coinvestigador.**
- 1992–1995 Proyecto de Colaboración Universidad de Chile (CMCA, Facultad de Ciencias)–Consejo Superior de Investigaciones Científicas (Instituto de Estructura de la Materia, CSIC), Madrid, España.
- 1995–1996 Proyecto FONDECYT N°2950029, *Modelos Teóricos de Reacciones de Isomerización Unimolecular*. **Calidad: Patrocinador de Proyecto de Doctorado.**
- 1995–1997 Proyecto FONDECYT N°2950016, *Estudio de la Interfase Alkali-Superficies de Cobre. Potenciales de Interacción, Propiedades y Simulación*. **Calidad: Patrocinador de Proyecto de Doctorado.**
- 1996–1998 Proyecto FONDECYT N°1961021, *Relaciones entre Perfiles de Propiedades Electrónicas Globales y de Energía Potencial en Reacciones de Isomerización Rotacional y de Intercambio*. **Calidad: Investigador Responsable.**
- 1996–1998 Proyecto FONDECYT N°1960909, *Interacciones Vibrónicas en Activación Química*. **Calidad: Coinvestigador.**
- 1997–1998 Proyecto Programa de Cooperación Científica Internacional, *Colisiones Inelásticas y Procesos de Adsorción y Desorción de H₂, D₂ en Superficies de Cobre*. **Calidad: Investigador Responsable en Chile.**
- 1998–1999 Proyecto Programa de Colaboración Científica Iberoamericana, *Estudio Teórico de la química atmosférica de sistemas alternativos a los clorofluorocarbonados (CFCs): Los hidrofluorocarbonados (HFCs) y los hidroclorofluorocarbonados (HCFCs)*. **Calidad: Investigador Responsable en Chile.**

- 1999–2001 Proyecto FONDECYT N°1990543, *Determinación Teórica de Perfiles de Reacción. Caracterización de Mecanismos y Reactividad Química. Calidad: Investigador Responsable.*
- 1999–2001 Proyecto Cátedra Presidencial en Ciencias 1998: *Theory of Chemical Reactions in the $\{\mu, \eta, V\}$ Space. Calidad: Investigador Responsable.*
- 1999–2001 Proyecto FONDECYT N°3990033, *Relaciones Energía–Densidad en Reactividad Química. Calidad: Patrocinador de Proyecto de Postdoctorado.*
- 2000–2001 Proyecto FONDECYT N°3000028, *Estudio Teórico de Reacciones de Formación y Agregación de Moléculas del Tipo CHX-CHY (X, Y=O, S). Calidad: Patrocinador de Proyecto de Postdoctorado.*
- 2000–2002 Proyecto FONDECYT N°2000050, *Caracterización Teórica de las Propiedades Catalíticas de la Superficie de Cu(111) Frente a CO y H₂. Calidad: Patrocinador de Proyecto de Doctorado.*
- 2000–2002 Proyecto FONDECYT N°1000971, *Estudio de Procesos de Activación Dinámica y Química Mediante Interacciones Vibrónicas. Calidad: Coinvestigador.*
- 2001–2003 Proyecto FONDECYT N°2010099, *Estudio Teórico de la Estructura y Reactividad de los Diazenos. Calidad: Patrocinador de Proyecto de Doctorado.*
- 2001–2003 Proyecto FONDECYT N°2010139, *Análisis de Reacciones Químicas en el Espacio $\{\mu, \eta, V\}$. Calidad: Patrocinador de Proyecto de Doctorado.*
- 2002–2006 Proyecto FONDECYT N°1020534, *Formulación y Aplicaciones de Índices de Reacción y de Reactividad Química. Calidad: Investigador Responsable.*
- 2003–2005 Patrocinador de Proyecto Conicyt de Ayuda de Tesis de Doctorado. Estudiante: Bárbara Herrera Pisani.
- 2003–2005 Patrocinador de Proyecto Conicyt de Ayuda de Tesis de Doctorado. Estudiante: Felipe Bulat Jara.

- 2003–2005 Programa de Cooperación ECOS-Chile Código C03 E02. *Etablissement de corrélations entre l'étude expérimentale et l'analyse théorique de la réactivité de films minces moléculaires, à base de macro-complexes métalliques, pour la conception de capteurs électrochimiques de molécules d'intérêt biologique.* **Calidad: Coinvestigador.** Investigador Responsable en Francia: Fethi Bedioui.
- 2004–2007 Proyecto FONDECYT N°1040923, *Aplicaciones del Método de Tensores Irreducibles del Oscilador Armónico (hot) y Potenciales Moleculares Modelo en Química Cuántica.* **Calidad: Co Investigador.**
- 2006–2007 Programa de Cooperación Científica Internacional Conicyt-CSIC (España), *Análisis de la Relación Estructura-Actividad Mediante Descriptores Mecano-Cuánticos Aplicado a la Catálisis Homogénea para Polimerización de Olefinas* (Folio 2005-170). **Calidad: Investigador Responsable en Chile.** Investigador Responsable en España: Victor Cruz.
- 2006–2007 Programa de Cooperación Científica y Tecnológica Chile-Comunidad Flamenca de Bélgica. *Characterization of Chemical Reactions and Molecular Structures Through the Use of Density Functional Theory Based Descriptors.* Agencia de Cooperación Internacional. **Calidad: Investigador Responsable en Chile.** Investigador Responsable en Bélgica: Paul Geerlings.
- 2006–2007 Proyecto de la Universidad Autónoma de Madrid-Banco Santander Central Hispano para la Cooperación Internacional. *Caracterización de Estructuras y Reactividades de Sistemas de Interés en Catálisis Homogénea.* **Calidad: Investigador Responsable en Chile.** Investigador Responsable en España: Manuel Yáñez.
- 2006–2008 Proyecto FONDECYT N°1060590, *Fuerza de Reacción: Una Nueva Perspectiva para Caracterizar Mecanismos de Reacciones Químicas.* **Calidad: Investigador Responsable.**
- 2009–2012 Proyecto FONDECYT N°1090460, *Using the Reaction Electronic Flux Descriptor to Characterize the Mechanisms of Chemical Reactions.* **Calidad: Investigador Responsable.**
- 2010–2013 Proyecto FONDECYT N°1100881: *Can Glycine be formed in the interstellar medium?.* **Calidad: Coinvestigador.**

2012–2014 ECOS-CONICYT N°C11E03, *Mecanismo de Reacciones Químicas Mediante el Uso de DFT Conceptual*. **Calidad: Investigador Responsable en Chile.**

2012–2015 Proyecto FONDECYT N°1120093, *Mechanistic Aspects of Proton Transfer Reactions with Applications to Biomolecules and Materials Science*. **Calidad: Coinvestigador.**

2013–2016 Proyecto FONDECYT N°1130072, *Toward a Theory of Chemical Reactions and Reaction Dynamics*. **Calidad: Investigador Responsable.**

2014–2018 Proyecto FONDECYT N°1141098, *The Mechanism of Hydrogenation Reactions of Amino Acids Precursors in the Interstellar Medium*. **Calidad: Coinvestigador.**

2014–2016 Proyecto Iniciativa Científica Milenio N° 120082. *Nucleus Millennium Chemical Processes and Catalysis (CPC)*. **Calidad: Investigador Responsable.**

2017–2021 Proyecto FONDECYT N°1170837. *Reactivity and Reaction Mechanism of Carbenoids*. **Calidad: Coinvestigador.**

2018–2022 Proyecto FONDECYT N°1181072. *Unveiling the Mechanism of Chemical Reactions. More on the Reaction Force and the Characterization of Transition States*. **Calidad: Investigador Responsable.**

11. CONTRIBUCIONES A CONGRESOS Y SIMPOSIOS

1. LLildo Espinoza, Patricio Fuentealba, **Alejandro Toro-Labbé**: *Cálculo de Hiperpolarizabilidades γ por Medio de Teoría de Perturbación*. VIII Jornadas Chilenas de Química, Universidad de Santiago, Santiago, Chile 1976.
2. LLildo Espinoza, **Alejandro Toro-Labbé**: *Cálculo de Momentos Cuadrupolares en Moléculas Orgánicas Aromáticas y Determinación de Fuerzas Intermoleculares Benceno–Benceno*, IX Jornadas Chilenas de Química, Jahuel, Chile, 1977.
3. LLildo Espinoza, **Alejandro Toro-Labbé**: *Estudio Teórico de la Solubilización de Moléculas Orgánicas en Agregados Micelares. I Fuerzas Intermoleculares*, X Jornadas Chilenas de Química, Valdivia, Chile, 1978.
4. LLildo Espinoza, **Alejandro Toro-Labbé**: *Estudio Teórico de la Solubilización de Moléculas Orgánicas en Agregados Micelares. II Propiedades Conformacionales*, XI Jornadas Chilenas de Química, Concepción, Chile, 1979.
5. Jean Maruani, **Alejandro Toro-Labbé**: *Efecto de Supersimetrías sobre la Dependencia Conformacional del Potencial de Torsión de Moléculas con dos Rotores*. XII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Barcelona, España, 1981.
6. Jean Maruani, **Alejandro Toro-Labbé**: *Dependences Conformationnelles des Diverses Propriétés des Systèmes Moleculaires Non Rigides*, Simposio Internacional *Symmetries and Properties of Non Rigid Molecules*. Montrouge, Francia, 1982.
7. Jean Maruani, Renato Contreras, Raymond Constanciel, **Alejandro Toro-Labbé**: *Etude du Potentiel Orientationnel du Systeme $H_2O \cdots HF$ dans le Vide at Sous l'Influence d'un Milieu Fortement Polarizable*. Simposio Internacional *Symmetries and Properties of Non Rigid Molecules*. Montrouge, Francia, 1982.
8. Jean Maruani, **Alejandro Toro-Labbé**: *Symetrie Effective des Structures Non Rigides et Determination de leurs Conformations*. Coloquio CNRS *Conformations et Propriétés Moléculaires*. Paris, Francia, 1983.

9. Jean Maruani, **Alejandro Toro-Labbé**: *Symmetry-Adapted Fourier Series Expansions of the Conformational Dependences of Hyperfine Couplings in Organic Radicals*. 23° Congress Ampere on Magnetic Resonance and Related Phenomena. Zurich, Suiza, 1984.
10. Jean Maruani, **Alejandro Toro-Labbé**: *Estudio de la Simetría de Sistemas Compuestos: Moléculas Atrapadas en Sitios Cristalinos*. XV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Viana do Castelo, Portugal, 1984.
11. Marcelo Campos–Vallette, Renato Contreras y Guillermo Díaz–Fleming, **Alejandro Toro-Labbé**: *Inertia Defects of Urea*. 16° Congreso Europeo de Espectroscopía Molecular. Madrid, España, 1985.
12. Marcelo Campos–Vallette, C. Acevedo, Gloria I. Cárdenas-Jirón, **Alejandro Toro-Labbé**: *Caracterización Espectral de la Formación de Dímeros de la Timina*. XVI Jornadas Chilenas de Química, Osorno, 1985.
13. **Alejandro Toro-Labbé**: *An Ab Initio Study of the Torsional Potential and Electronic Properties of Biphenyl Molecule*. 20° Sanibel Symposia of Quantum Chemistry and Solid State Physics. Marineland (Florida), USA, 1986.
14. **Alejandro Toro-Labbé**: *Modelos Teóricos del Estado Líquido*. Escuela Internacional PNUD–UNESCO en Química Teórica y Espectroscopía Molecular, Valparaíso, 1987.
15. Jean Maruani, **Alejandro Toro-Labbé**: *Conjugate Symmetry of Molecular Systems and Determination of their Conformations*. 31° Congreso IUPAC. Sofia, Bulgaria, 1987.
16. **Alejandro Toro-Labbé**: *On the Representation of Potential Functions Hindering the Internal Rotation of Single Top Molecules*. 1989 Sanibel Symposia. Saint Augustine (Florida), USA, 1989.
17. Gloria I. Cárdenas-Jirón, **Alejandro Toro-Labbé**: *Análisis de la Dinámica de la Rotación Interna en Sistemas Moleculares de Un Rotor*. XVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. La Plata, Argentina, 1989.

18. Cristian Cárdenas-Lailhacar, **Alejandro Toro-Labbé**: *Estudio Teórico del Potencial de Torsión de Moléculas del Tipo XSSX y XSC-CSX (X=H,F). Aspectos Termodinámicos y Cinéticos*. XVIII Congreso Internacional de Químicos teóricos de Expresión Latina. La Plata, Argentina, 1989.
19. María Paz Benavides-Liñero, **Alejandro Toro-Labbé**: *Propiedades Termodinámicas de Fluidos Simples en la Región Crítica Mediante Dinámica Molecular*. XVIII Jornadas Chilenas de Química. Santiago, 1989.
20. Ricardo Letelier, Constantino Utreras-Díaz, **Alejandro Toro-Labbé**: *Espectro Teórico de Rotación Interna Mediante Métodos Numéricos*. XVIII Jornadas Chilenas de Química. Santiago, 1989.
21. **Alejandro Toro-Labbé**: *Potential Models for Intramolecular Isomerization Reactions*, Conferencia Especial Invitada al 2º Congreso WATOC (World Association of Theoretical Organic Chemist), 8–14 de Julio. Toronto, Canadá, 1990.
22. Gloria I. Cárdenas-Jirón, **Alejandro Toro-Labbé**: *Modelo Teórico de Potenciales Intramoleculares. Estudio sobre la Rotación Interna en Sistemas HXNX (X=O,S)*. XIX Congresso Internazionale dei Chimici Teorici dei Paesi di Espressione Latina, Roma, Italia, 10–14 de Septiembre de 1990.
23. **Alejandro Toro-Labbé**: *Modelo Teórico de Potenciales para el Análisis de Procesos de Isomerización Rotacional*, Microsimposio de Fisicoquímica Orgánica, Pontificia Universidad Católica de Chile, 24–27 de Septiembre 1990.
24. María Paz Benavides, **Alejandro Toro-Labbé**: *Modelo Semi-Analítico para Determinar Propiedades Termodinámicas de Fluidos en Regiones de Equilibrio de Fases*. XIX Congreso Latinoamericano de Química, Buenos Aires, Argentina, 5–9 de Noviembre de 1990.
25. Gloria I. Cárdenas-Jirón, **Alejandro Toro-Labbé**: *Rotación Interna en Sistemas Moleculares de un Rotor: Formulación Teórica de Potenciales Torsionales*. Primer Simposio Nacional de Espectroscopía y Estructura Molecular, Santiago, Chile, 26–27 de Septiembre de 1991.

26. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Estructura e Dinamica de Sistemas Moleculares en Equilibrio Conformacional*. VI Simposio Brasileño de Química Teórica, Caxambú, Brasil, 17–20 de Noviembre de 1991.
27. María Paz Benavides, **Alejandro Toro-Labbé:** *Propiedades Termodinámicas de Fluidos Mediante Dinámica Molecular: Etano Líquido y en la Región de Transición de Fase Líquido–Gas*. Primer Workshop de Química Computacional. Santiago, Chile, 21–22 de Septiembre de 1992.
28. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Métodos y Formalismos Computacionales en Química Teórica*, Conferencia Plenaria. Primer Workshop de Química Computacional. Santiago, Chile, 21–22 de Septiembre de 1992.
29. Gloria I. Cárdenas–Jirón, **Alejandro Toro-Labbé:** *Análisis Teórico de la Dependencia Conformacional de Estructuras y Propiedades Moleculares Globales y Locales. Estudio Computacional de Reacciones de Isomerización Rotacional en Moléculas del Tipo HXNX ($X=O,S$) y XSSX ($X=H,F,Cl$)*. Primer Workshop de Química Computacional. Santiago, Chile, 21–22 de Septiembre de 1992.
30. Marcela Aliste, **Alejandro Toro-Labbé:** *Estudio ab initio de la Doble Transferencia Protónica en el Dímero del Acido Nitroso*. Primer Workshop de Química Computacional. Santiago, Chile 21–22 de Septiembre de 1992.
31. Gustavo A. Arteca, **Alejandro Toro-Labbé:** *Estudio Teórico de la Dinámica Molecular de la Reacción de Isomerización Cis–Trans de Acido Nitroso*. XX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Mérida, Venezuela, 10–15 de Octubre de 1992.
32. Luis Padilla-Campos, **Alejandro Toro-Labbé:** *Un Modelo de Potencial para la Rotación Interna de Bitiofeno y Bipirrol*. XXI Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Grenoble, Francia, 19–23 de Septiembre de 1993.
33. Luis Padilla-Campos, **Alejandro Toro-Labbé:** *Análisis del Potencial de Torsión de Bitiofeno*. XX Jornadas Chilenas de Química. Punta de Tralca, Chile, 18–22 de Octubre de 1993.

34. Gloria I. Cárdenas-Jirón, **Alejandro Toro-Labbé**: *Análisis del Potencial de Torsión de FO–NO: Un Problema para Métodos Teóricos Convencionales*. XX Jornadas Chilenas de Química. Punta de Tralca, Chile, 18–22 de Octubre de 1993.
35. Carolina Aliaga, Patricia Perez, Renato Contreras, **Alejandro Toro-Labbé**: *Estudio Teórico del Potencial de Interacción del Complejo NH₃ :: HSCN*. XX Jornadas Chilenas de Química. Punta de Tralca, Chile, 18–22 de Octubre de 1993.
36. Gloria I. Cárdenas-Jirón, **Alejandro Toro-Labbé**: *Perfiles de Dureza Molecular en Reacciones de Isomerización Rotacional*. XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Pucón, Chile, 25–29 de Septiembre de 1995.
37. Luis Padilla-Campos, **Alejandro Toro-Labbé**: *Un Modelo de Potencial para la Descripción de la Adsorción de Metales Alcalinos sobre Superficies de Cu(111)*. XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Pucón, Chile, 25–29 de Septiembre de 1995.
38. Jaime Roessler, **Alejandro Toro-Labbé**: *Interacción Electrón–Vibrón: Solución Exacta Versus Aproximaciones*. XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Pucón, Chile, 25–29 de Septiembre de 1995.
39. Luis Padilla-Campos, **Alejandro Toro-Labbé**: *On the Adsorption of Alkali Metals on a Cu(111) Surface*. 36 Sanibel Symposium, Saint Augustine, Florida, USA, 24 de Febrero – 2 de Marzo de 1996.
40. Gloria I. Cárdenas-Jirón, **Alejandro Toro-Labbé**: *Correlation Between Hardness and Energy Profiles for Rotational Isomerization Processes*. 36 Sanibel Symposium, Saint Augustine, Florida, USA, 24 de Febrero – 2 de Marzo de 1996.
41. Soledad Gutiérrez-Oliva, Junia Melin, Gloria I. Cárdenas-Jirón, **Alejandro Toro-Labbé**: *Perfiles de Potencial Químico Electrónico y de Dureza Molecular para el Análisis de la Reacción de Isomerización de Diimida*. XXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Cáceres, España, 16–20 de Septiembre de 1996.

42. Gloria I. Cárdenas-Jirón, **Alejandro Toro-Labbé**: *Naturaleza de la Energía de Activación en Procesos de Rotación Interna*. XXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Cáceres, España, Septiembre 16–20 de 1996.
43. Luis Padilla-Campos, **Alejandro Toro-Labbé**: *Simulación Monte Carlo de la Adsorción de Potasio sobre la Superficie de Cu(111)*. XXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Cáceres, España, Septiembre 16–20 de 1996.
44. Soledad Gutiérrez-Oliva, Junia Melin, Gloria I. Cárdenas-Jirón, **Alejandro Toro-Labbé**: *Relaciones entre Perfiles de Energía Potencial, Potencial Químico Electrónico y Dureza Molecular. Estudio de la Reacción de Isomerización de Diimida Mediante Rotación Interna e Inversión*. II Workshop de Química Computacional y Espectroscopía Molecular. Valdivia, Chile, 9–11 de Diciembre de 1996.
45. Soledad Gutiérrez-Oliva, Junia Melin, **Alejandro Toro-Labbé**: *Reacciones Químicas en el Espacio $\{\mu, \eta, V\}$* . II Workshop de Química Computacional y Espectroscopía Molecular. Valdivia, Chile, 9–11 de Diciembre de 1996.
46. Soledad Gutiérrez-Oliva, Junia Melin, Gloria I. Cárdenas-Jirón, **Alejandro Toro-Labbé**: *Relations Between Potential Energy, Electronic Chemical Potential and Hardness Profiles*. Density Functional Theory Symposium, Duke University, Durham (North Carolina), USA, 3–7 de junio de 1997.
47. Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé**: *Fragmentos Moleculares y Reactividad Química. Energía de Formación, Potencial Químico y Dureza Molecular en Reacciones $HCX + XH \rightarrow HCX-XH$ ($X=O,S$)*. XXII Jornadas Chilenas de Química, Puyehue, 12–15 Noviembre de 1997.
48. Junia Melin, **Alejandro Toro-Labbé**: *La Reacción $HCS-OH \rightleftharpoons HCO-SH$ en el Espacio $\{\mu, \eta, V\}$: Energía, Potencial Químico y Dureza Molecular*. XXII Jornadas Chilenas de Química, Puyehue, 12–15 Noviembre de 1997.

49. María Jesús Aguirre, Mauricio Isaacs, R. Aguayo y José.H. Zagal, **Alejandro Toro-Labbé**: *Relaciones Lineales entre Energía de Activación y Dureza Molecular para Reacciones Electroquímicas Catalizadas por Complejos con Ligandos Macrocíclicos de Metales de Transición*. XXII Jornadas Chilenas de Química, Puyehue, 12–15 Noviembre de 1997.
50. Luis Padilla-Campos, **Alejandro Toro-Labbé**: *Estudio de la Transferencia de Carga de Metales Alcalinos Adsorbidos en Superficies de Cobre*. XXII Jornadas Chilenas de Química, Puyehue, 12–15 Noviembre de 1997.
51. Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé**: *Energy, Chemical Potential and Hardness Profiles for the Isomerization Mechanisms of HOOH, HSOH and HSSH*. 13th Canadian Symposium on Theoretical Chemistry, Vancouver, Canadá, 2–7 de Agosto de 1998.
52. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Perfiles de Energía, Potencial Químico y Dureza Molecular en el Estudio de Reacciones Químicas*. XXIV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Puebla, México, 20–25 de Septiembre de 1998.
53. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Caracterización de Reacciones Químicas a Partir de Perfiles de Energía, Potencial Químico y Dureza Molecular*, XI Congreso Argentino de Fisicoquímica; I Congreso de Fisicoquímica del Mercosur. Santa Fé, Argentina, 19–23 de Abril de 1999.
54. Soledad Gutiérrez-Oliva, Pablo Jaque, Patricia Pérez, **Alejandro Toro-Labbé**: *Proton Transfer and Isomerization Reactions in the $\{\mu, \eta, E\}$ Space*. 8° International Conference on the Applications of density Functional Theory to Chemistry and Physics. Roma, Italia, 6–10 de Septiembre de 1999.
55. **Alejandro Toro-Labbé**: *Reacciones de Isomerización y Transferencia a Partir de Indices de Reactividad Global*. XXV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Nápoles, Italia, 13–18 de Septiembre de 1999.

56. Pablo Jaque, **Alejandro Toro-Labbé**: *Reacción de Doble Transferencia Protónica en Dímeros de CHX-XH (X=O,S)*. XXIII Jornadas Chilenas de Química. Valdivia, Chile, 24–27 de Noviembre de 1999.
57. Pratim K. Chattaraj, Patricio Fuentealba, Pablo Jaque, **Alejandro Toro-Labbé**: *Validez del Principio de Mínima Polarizabilidad en Vibraciones Moleculares y Rotaciones Internas: Un Estudio SCF Ab Initio*. XXIII Jornadas Chilenas de Química. Valdivia, Chile, 24–27 de Noviembre de 1999.
58. Patricia Pérez, **Alejandro Toro-Labbé**: *Estudio Teórico del Equilibrio Ceto-Enol en Acetil Derivados a Partir de los Perfiles de Energía, Potencial Químico y Dureza Molecular*. XXIII Jornadas Chilenas de Química. Valdivia, Chile, 24–27 de Noviembre de 1999.
59. Jorge Ricardo Letelier, **Alejandro Toro-Labbé**: *Fuerzas Orbitales y la Estabilidad Conformacional de H₂O₂ y H₂S₂*. XXIII Jornadas Chilenas de Química. Valdivia, Chile, 24–27 de Noviembre de 1999.
60. Soledad Gutiérrez-Oliva, Pablo Jaque y **Alejandro Toro-Labbé**: *The Sanderson's Principle to Estimate Chemical Potentials, Molecular Hardness and Reaction Energies. Application to the CHX-XH and (CHX-XH)₂ (X=O,S) Series*. 40th Sanibel Symposium. Saint Augustine, USA, 26 de Febrero al 3 de Marzo de 2000.
61. Soledad Gutiérrez-Oliva, Pablo Jaque) y **Alejandro Toro-Labbé**: *The Sanderson's Principle to Estimate Chemical Potentials, Molecular Hardness and Reaction Energies*. DFT 2000. Menton, Francia, 11–14 de Junio de 2000.
62. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Hacia un Modelo Unificado para Caracterizar Diferentes Tipos de Reacciones Químicas*. XXVI Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Caxambu, Brasil, 3–9 Septiembre de 2000.
63. Bárbara Herrera y **Alejandro Toro-Labbé**: *Estudio Teórico de la Estructura y Propiedades de Cubano, Cubilcubano y Diflúor Cubilcubano*.

- XXVI Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Caxambu, Brasil, 3–9 Septiembre de 2000.
64. Felipe Bulat–Jara y **Alejandro Toro-Labbé**: *Estudio de Perfiles Energéticos en Reacciones de Isomerización Rotacional. Funciones de Energía Potencial Tipo Gibbs*.
XXVI Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Caxambu, Brasil, 3–9 Septiembre de 2000.
65. Soledad Gutiérrez–Oliva, Pablo Jaque, **Alejandro Toro-Labbé**: *Estimación de Propiedades Electrónicas Globales y Energías de Enlace Mediante el Principio de Sanderson*.
XXVI Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Caxambu, Brasil, 3–9 Septiembre de 2000.
66. Pratim K. Chattaraj, Patricia Pérez, Jenny Zevallos y **Alejandro Toro-Labbé**: *Estudio Ab Initio y DFT del Efecto Solvente en Reacciones de Reordenamiento Intramolecular*.
XXVI Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Caxambu, Brasil, 3–9 Septiembre de 2000.
67. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Determinación de Propiedades Electrónicas de Polímeros. Reglas de Aditividad para la Electronegatividad, Dureza y Polarizabilidad*.
V Simposio Chileno de Química y Físico Química de Polímeros, CHIPOL-2000. Quilpué, Chile, 3–7 Diciembre de 2000.
68. Bárbara Herrera y **Alejandro Toro-Labbé**: *Estudio Teórico de la Estructura y Propiedades de Polímeros Derivados de Cubano*.
V Simposio Chileno de Química y Físico Química de Polímeros, CHIPOL-2000. Quilpué, Chile, 3–7 Diciembre de 2000.
69. Felipe Bulat y **Alejandro Toro-Labbé**: *Generalizing the Hammond Postulate*.
International Conference on Molecular Quantum Mechanics. Seattle, USA, 22–26 de Julio de 2001.
70. José Luis Moncada y **Alejandro Toro-Labbé**: *Estudio Teórico de la Isomerización Rotacional de la Guanina: Perfiles de Energía y Propiedades Electrónicas*.

- XXIV Jornadas Chilenas de Química. Temuco, 28–30 de Noviembre de 2001.
71. Felipe Bulat y **Alejandro Toro-Labbé**: *Generalización del Postulado de Hammond*.
XXIV Jornadas Chilenas de Química. Temuco, 28–30 de Noviembre de 2001.
72. Jenny Zevallos y **Alejandro Toro-Labbé**: *Análisis Comparativo de los Orbitales de Kohn–Sham y Hartree–Fock*.
XXIV Jornadas Chilenas de Química. Temuco, 28–30 de Noviembre de 2001.
73. Bárbara Herrera y **Alejandro Toro-Labbé**: *Estudio Teórico de Reacciones de Tautomerización en Sistemas del Tipo HXNY (X, Y=O, S)*.
XXIV Jornadas Chilenas de Química. Temuco, 28–30 de Noviembre de 2001.
74. Soledad Gutiérrez–Oliva, Pablo Jaque y **Alejandro Toro-Labbé**: *Determinación de Potencial Químico Electrónico y Dureza Molecular a Partir de Fragmentos*.
XXIV Jornadas Chilenas de Química. Temuco, 28–30 de Noviembre de 2001.
75. Pablo Jaque y **Alejandro Toro-Labbé**: *Estudio Teórico de Reacciones de Fragmentación en Cluster Neutros de Cobre*.
XXIV Jornadas Chilenas de Química, 28-30 de Noviembre 2001, Temuco, Chile.
76. Soledad Gutiérrez Oliva, Pablo Jaque y **Alejandro Toro-Labbé**: *Determinación de Potencial Químico Electrónico y Dureza Molecular a Partir de Fragmentos*.
XXIV Jornadas Chilenas de Química, 28–30 de Noviembre de 2001, Universidad de la Frontera, Temuco, Chile.
77. Pablo Jaque y **Alejandro Toro-Labbé**: *Theoretical Study of Fragmentation Reactions on Neutral Copper Cluster*.
XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 18-21 Noviembre 2001, Caxambú, Brasil.

78. **Conferencia Invitada:**
Soledad Gutiérrez Oliva, Pablo Jaque and **Alejandro Toro-Labbé:** *Characterization of Chemical Reactions Through Classical Concepts and DFT Descriptors.*
10th Conference on Current Trends in Computational Chemistry. 1-3 Noviembre de 2001, Jackson, USA.
79. Eduardo Chamorro, **Alejandro Toro-Labbé** y P. Fuentealba: *Transferencia Intramolecular de Protones en Derivados de Acido Tio-Oxálico: Un Estudio Teórico.*
XXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2002. 1-6 de Septiembre de 2002, Montevideo, Uruguay.
80. Jenny Zevallos, **A. Toro-Labbé:** *Estudio Ab Initio de la Rotación Interna del Grupo Fenilo en Trans y Cis Fenildiazeno.*
XXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2002. 1-6 de Septiembre de 2002, Montevideo, Uruguay.
81. Jean Cadet, André Grand, Christophe Morell, Bárbara Herrera y **Alejandro Toro-Labbé:** *Reactividad Química en Bases Pirimidínicas del ADN y ARN a Partir de Descriptores Basados en la TFD.*
XXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2002. 1-6 de Septiembre de 2002, Montevideo, Uruguay.
82. Bárbara Herrera y **Alejandro Toro-Labbé:** *Estudio Teórico de la Tautomerización en Sistemas del Tipo HXNY (X, Y=O, S).*
XXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2002. 1-6 de Septiembre de 2002, Montevideo, Uruguay.
83. Felipe Bulat y **Alejandro Toro-Labbé:** *Estudio Teórico de la Rotación Interna de Glyoxal y Algunos Derivados Halogenados.*
XXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2002. 1-6 de Septiembre de 2002, Montevideo, Uruguay.
84. José Luis Moncada Reyes y **Alejandro Toro-Labbé:** *Estudio Teórico de la Rotación Interna de la Hidroxi-Guanina.*
XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL, Montevideo- Uruguay, 2-8 de Septiembre 2002.

85. Jean Cadet, André Grand, Christophe Morell, Bárbara Herrera and **Alejandro Toro-Labbé**: *The Chemical Reactivity of Pyrimidine Bases of DNA and RNA Through the use of DFT Descriptors*.
Summer School in Molecular Physics and Quantum Chemistry, 18th-23rd August, **2002**, Oxford, Inglaterra.
86. José Luis Moncada Reyes y **Alejandro Toro-Labbé**: *Estudio Teórico de la Rotación Interna de la Hidroxi-Guanina*
3^{er} WorkShop de Química Computacional y Espectroscopía Molecular, Olmué, 23-25 de Octubre 2002, .
87. P. Jaque, **A. Toro-Labbé**: *Caracterización de Clusters de Cobre a través de Descriptores de Reactividad*.
IX Encuentro de Química Inorgánica. 31 de Julio - 2 de Agosto 2002, Santiago, Chile.
88. **Conferencia Invitada:**
P. Jaque, and **A. Toro-Labbé**: *Characterization of Copper Clusters Through the Use of Density Functional Theory Reactivity Descriptors*.
4th European Conference on Computational Chemistry. 1-6 Septiembre 2002, Assisi, Italia.
89. P. Jaque, **A. Toro-Labbé**: *Characterization of Copper Clusters Through the Use of Density Functional Theory Reactivity Descriptors*.
3er Workshop de Química Computacional y Espectroscopía Molecular. 23-25 de Octubre 2002, Olmué, Chile.
90. B. Herrera y **A. Toro-Labbé**: *Estudio Teórico de la Tautomerización en sistemas del tipo HXNY (X, Y=O,S)*.
3er Workshop de Química Computacional y Espectroscopía Molecular, 23-25 de Octubre 2002, Olmué, Chile.
91. **Conferencia Invitada:**
S. Gutiérrez-Oliva, P. Jaque, **A. Toro-Labbé**: *Characterization of Chemical Reactions Through Classical Concepts and DFT Descriptors*.
3er Workshop de Química Computacional y Espectroscopía Molecular. 23-25 de Octubre 2002, Olmué, Chile.
92. P. Jaque, **A. Toro-Labbé**: *Formación de Clusters de Cobre a Partir de Energías de Enlaces Experimentales*.

- 3er Workshop de Química Computacional y Espectroscopia Molecular.
23-25 de Octubre 2002, Olmué, Chile.
93. J. Zevallos y **A. Toro-Labbé**: *Estudio Ab-Initio de la Rotación Interna del Grupo Fenilo en trans- y cis-Fenildiazeno*.
3er Workshop de Química Computacional y Espectroscopía Molecular,
23-25 de Octubre, 2002, Olmué, Chile.
94. Felipe Bulat y **Alejandro Toro-Labbé**: *Estudio Teórico de la Rotación Interna de Glyoxal y Algunos Derivados Halogenados*.
3er Workshop de Química Computacional y Espectroscopía Molecular,
23-25 de Octubre, 2002, Olmué, Chile.
95. Soledad Gutiérrez Oliva and **Alejandro Toro-Labbé**. *The Torsional Isomerization of Oxalyl Chloride: The Use of DFT Descriptor*.
4th European Computational Chemistry Conference (EUCCO-CC4), 1–
6 de Septiembre de 2002, Assisi, Italia.
96. **Conferencia Invitada**:
Soledad Gutiérrez Oliva, Pablo Jaque y **Alejandro Toro-Labbé**. *The Use of DFT Reactivity Descriptors to Characterize Chemical Reactions*.
7th European Workshop Quantum Systems in Chemistry & Physics, 10–
15 Septiembre de 2002, Bratislava, Slovakia.
97. Pablo Jaque, **Alejandro Toro-Labbé**: *Formación de Clusters de Cobre a Partir de Energías de Enlaces Experimentales*.
Symposium interacción Metal-Metal en Química de Coordinación de
Complejos Polinucleares de Metales de Transición. 7-9 de Enero 2003,
Viña del Mar, Chile.
98. José Luis Moncada, Alejandro Toro-Labbé: *Energía y Durezas Locales*.
XXV Jornadas Chilenas de Química. 6-9 de Enero 2004, Antofagasta.
Chile.
99. **Alejandro Toro-Labbé**, María Soledad Gutiérrez-Oliva, Jane S. Murray, Monica C. Concha, Peter Politzer: *The Force Associated with a Chemical Reaction*.
44th Sanibel Symposium. 28 de Febrero-5 de Marzo de 2004, St. Augustine, Florida, USA.

100. **Alejandro Toro-Labbé**, María Soledad Gutiérrez-Oliva: *The Torsional Problem of Oxalyl Chloride: A Challenge for Theoretical Methods*
44th Sanibel Symposium. 28 de Febrero-5 de Marzo de 2004, St. Augustine, Florida, USA.
101. **Conferencia Invitada:**
María Soledad Gutiérrez-Oliva, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé**: *The Role of the Reaction Force to Characterize the Hydrogen Transfer Between Sulfur and Oxygen Atoms*.
Computational Chemical Dynamics Conference. 7-9 de Octubre de 2004, Minneapolis, Minnesota, USA.
102. Bárbara Herrera y **Alejandro Toro-Labbé**: *El Rol del Perfil de Fuerzas para caracterizar Interacciones Locales Específicas que Activan las Reacciones de Transferencias Protónicas Intramoleculares en ADN*.
4th Workshop of Computational Chemistry and Molecular Spectroscopy. 19-22 de Octubre de 2004, Punta de Tralca, Chile.
103. Felipe Bulat, Benoît Champagne, Bernard Kirtman, **Alejandro Toro-Labbé**, Weitao Yang: *Assessment of the Optimized Effective Potential Procedure for Exact Exchange in the Calculation of Static Field Responses of Push-Pull π -Conjugated Systems. Correct Asymptotic Behavior of (Hyper)Polarizabilities and the Role of the Exact Exchange*.
4th Workshop of Computational Chemistry and Molecular Spectroscopy. 19-22 de Octubre de 2004, Punta de Tralca, Chile.
104. Elizabeth Rincón, Pablo Jaque, Alejandro Toro-Labbé: *El Rol de la Transferencia Protónica 1-3 como Activante de la Migración Intramolecular de Magnesio (II) en Timina*.
4th Workshop of Computational Chemistry and Molecular Spectroscopy. 19-22 de Octubre de 2004, Punta de Tralca, Chile.
105. Felipe Aros, Soledad Gutiérrez-Oliva, Pablo Jaque, Miquel Solà, **Alejandro Toro-Labbé**: *Estudio Teórico de la Reacción de Abstracción de Hidrógeno por el Radical Hidroxilo en HCFC-21*.
4th Workshop of Computational Chemistry and Molecular Spectroscopy. 19-22 de Octubre de 2004, Punta de Tralca, Chile.

106. José Vicente Correa, Pablo Jaque, **Alejandro Toro-Labbé**: *Aproximación a la Interacción de la Histamina con su Receptor Biológico*. 4th Workshop of Computational Chemistry and Molecular Spectroscopy. 19-22 de Octubre de 2004, Punta de Tralca, Chile.
107. Jorge Martínez, **Alejandro Toro-Labbé**: *Perfiles de Energía y Fuerza Química a Partir de la Ecuación de Marcus*. 4th Workshop of Computational Chemistry and Molecular Spectroscopy. 19-22 de Octubre de 2004, Punta de Tralca, Chile.
108. María Soledad Gutiérrez-Oliva, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé**: *The Role of the Reaction Force to Characterize the Hydrogen Transfer Between Sulfur and Oxygen Atoms*. 13th Current Trends in Computational Chemistry. 12-13 de Noviembre de 2004, Jackson, Mississippi, USA.
109. Elizabeth Rincón, Pablo Jaque, **Alejandro Toro-Labbé**: *El Rol de la Transferencia Protónica 1-3 como Activante de la Migración Intramolecular de Magnesio(II) en Timina*. X Encuentro de Química Inorgánica. 5-7 de Enero de 2005, Santiago, Chile.
110. Jorge Martínez, **Alejandro Toro-Labbé**: *An Approach to the Fullerene Reactivity*. Fifth Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics. 20-26 de Julio de 2005. New Orleans, Estados Unidos.
111. Pablo Jaque, **Alejandro Toro-Labbé**: *The Formation of Neutral Copper Clusters from Experimental Binding Energies and Reactivity Descriptors*. Fifth Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics. 20-26 de Julio de 2005. New Orleans, Estados Unidos.
112. **Alejandro Toro-Labbé**, Soledad Gutiérrez-Oliva, Jaroslav Burda, Mónica C. Concha, Jane S. Murray, Peter Politzer: *The Reaction Force*. Fifth Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics. 20-26 de Julio de 2005. New Orleans, Estados Unidos.
113. **Conferencia Invitada:**
Soledad Gutiérrez-Oliva, Pablo Jaque, Felipe Bulat, **Alejandro Toro-**

- Labbé, Jane S. Murray, Peter Politzer: *Connection Between the Average Local Ionization Energy and the Fukui Function. Theory and Applications.*
11 International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics, DFT2005. 11-15 de Septiembre de 2005, Ginebra, Suiza.
114. Elizabeth Rincón, Pablo Jaque, **Alejandro Toro-Labbé**: *The Effect of Mg(II) in the 1,3 Hydrogen Transfer in Thymine.*
11 International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics, DFT2005. 11-15 de Septiembre de 2005, Ginebra, Suiza.
115. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Reaction Force: Concept and Application.* XXXI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 2005). 2-6 de Octubre de 2005, Isla Margarita, Venezuela.
116. Elizabeth Rincón, Pablo Jaque, **Alejandro Toro-Labbé**: *Efecto del Mg(II) en la Transferencia 1,3 de Hidrógeno en Timina.* XXXI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 2005). 2-6 de Octubre de 2005, Isla Margarita, Venezuela.
117. Jorge Martínez, **Alejandro Toro-Labbé**: *An Approach to Fullerene Reactivity.* XXXI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 2005). 2-6 de Octubre de 2005, Isla Margarita, Venezuela.
118. **Conferencia Invitada:**
Soledad Gutiérrez-Oliva, Bárbara Herrera and **Alejandro Toro-Labbé**: *Link between reaction force and DFT reactivity descriptors.* Frontier Applications and Developments of Density Functional Theory: A Symposium in Honor of Robert G. Parr's 85th Birthday. The 231st American Chemical Society National Meeting, Atlanta, USA. March 26-30, 2006.
119. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Hydrogen Bonds and Hydrogen Transfer Reactions from the Perspective of the Reaction Force.* VII Girona Seminar on the Nature of the Chemical Bond. Girona, España. Julio 10-13, 2006.

120. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Reaction Force. A Key Concept to Characterize Reaction Mechanisms.* Eighth Giambiagi Winter School. Buenos Aires, Argentina. Julio 24-28, 2006.
121. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Reaction Force: Concept and Applications in Organic Chemistry.* XLI Congreso Mexicano de Química. Ciudad de México, México. Septiembre 24-28, 2006.
122. Barbara Herrera, Francisco Gracia, Paulo Araya and **Alejandro Toro-Labbé:** *A DFT Study on Zirconia Oligomers and the Influence of Cu Doping.* Trends in Nanotechnology (TNT 2006). Grenoble, Francia. Septiembre 4-8, 2006.
123. **Conferencia Invitada:**
Bárbara Herrera, Jorge Martínez, **Alejandro Toro-Labbé:** *The Use of DFT in Material Sciences: Concepts and Applications.* Challenges at the Frontier of Material Sciences. Gramado, Brasil. Abril 25-28, 2007.
124. **Alejandro Toro-Labbé,** Soledad Gutiérrez-Oliva, Jane S. Murray, Peter Politzer: *Reaction Force: Concept and Applications.* Molecular Quantum Mechanics - Analytic Gradients and Beyond. An International Conference in Honor of Professor Peter Pulay. May 29 - June 3, 2007. Budapest, Hungary.
125. **Conferencia Invitada:**
Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé:** *The Electronic Flux in Chemical Reactions. Concept and Applications in Organic Chemistry.* Modeling Interactions in Biomolecules III. Praga, República Checa. Septiembre 8-13, 2007.
126. **Conferencia Invitada:**
Patricio Flores, Soledad Gutiérrez-Oliva, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé:** *The Electronic Flux in Chemical Reactions.* International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE). Corfú, Grecia. Septiembre 25-30, 2007.

127. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Understanding Catalytic Processes Through the Reaction Force and Electronic Flux Analysis*. Frontier in Material Research IV. Viña del Mar, Chile. Mayo 20-24, 2008.
128. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *The Reaction Force Analysis. Application to Catalytic Processes*. Modeling and Design of Molecular Materials (MDMM 2008). Piechowice, Polonia. Junio 23-28, 2008.
129. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Getting Insights on the Mechanism of Chemical Reactions: The Reaction Electronic Flux Concept*. International Conference of the World Association of Theoretically Oriented Chemist (WATOC 2008). Sydney, Australia. Septiembre 14-19, 2008.
130. Patricio Flores-Morales, Soledad Gutiérrez-Oliva, Eduardo Silva, **Alejandro Toro-Labbé:** *The Reaction Electronic Flux in the Schiff's Base Formation of the Maillard Reaction*. Sixth Workshop of Computational Chemistry and Molecular Spectroscopy. Punta de Tralca, Chile. October 21-24, 2008.
131. P. Araya, M.L. Cerón, F. Gracia, B. Herrera, **A. Toro-Labbé:** *Theoretical Approach for Steam Reforming of Methanol on Cu-ZrO₂*. Sixth Workshop of Computational Chemistry and Molecular Spectroscopy. Punta de Tralca, Chile. October 21-24, 2008.
132. Fernanda Duarte, **Alejandro Toro-Labbé:** *Reaction Force Analysis of the Keto-Enol Tautomerization Reaction in Thioformic Acid*. Sixth Workshop of Computational Chemistry and Molecular Spectroscopy. Punta de Tralca, Chile. October 21-24, 2008.
133. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Electronic Polarization and Transfer During Chemical Reactions*. Central Regional Meeting of the American Chemical Society (CERMACS). Cleveland, Ohio, USA. Mayo 20-23, 2009.
134. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Characterizing the Mechanism of Chemical*

- Reactions from the Perspective of Conceptual DFT.*
13th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics.
Lyon, Francia. Agosto 31-Septiembre 4, 2009.
135. María Luisa Ceron, Bárbara Herrera, Francisco Gracia, Paulo Araya, **Alejandro Toro-Labbé**: *The Mechanism of Methanol Decomposition. A Theoretical Study Based on the Reaction Force Analysis.*
13th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics.
Lyon, France. 31st August-September 4th, 2009.
136. P. Flores-Morales, S. Gutiérrez-Oliva, F. J. Luque, E. Silva, **A. Toro-Labbé**: *The Mechanism of the Schiff Base Formation between Methylglyoxal and N-Acetyl-lysine in the context of Advanced Maillard Reactions.*
13th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics.
Lyon, France. 31st August-September 4th, 2009.
137. F. De Vleeschouwer, **A. Toro-Labbé**, S. Gutiérrez-Oliva, V. Van Speybroeck, M. Waroquier, P. Geerlings, F. De Proft: *Kinetic (Ir)reversibility from Conceptual DFT based Reactivity Descriptors within the Framework of the Reaction Force Concept.*
13th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics.
Lyon, France. 31st August-September 4th, 2009.
138. V. Labet, C. Morell, A. Grand, L.A. Eriksson, **A. Toro-Labbé**: *Study of the Spontaneous Deamination of Cytosine by Computational and Conceptual DFT.*
13th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics.
Lyon, France. 31st August-September 4th, 2009.
139. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Elucidating the Mechanism of Complex Chemical Reactions through the Use of the Reaction Electronic Flux.*
Modeling Interactions in Biomolecules IV.
Hrubá Skála, República Checa. Septiembre 14-19, 2009.

140. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Characterizing the Electronic Polarization and Transfer Effects for Elucidating the Mechanism of Chemical Reactions.*
Mini-Symposium on DFT : Concepts et Applications.
Grenoble, Francia. Septiembre 7, 2009.
141. M.L. Cerón, P. Araya, F. Gracia, B. Herrera, **A. Toro-Labbé:** *Elucidating the Mechanism of Methanol Decomposition on Copper Oxide Catalytic Surface.*
Trends in Nanotechnology, TNT 2009.
Barcelona, España. Septiembre 7-11, 2009.
142. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Reaction Mechanisms as Collections of Chemical Events.*
66th South West and 62th South East Regional Meeting of the American Chemical Society. New Orleans, Estados Unidos, 30 de Noviembre 4 de Diciembre, 2010
143. S. Díaz-Acosta, S. Gutiérrez-Oliva, **A. Toro-Labbé:** *Theoretical study of the Mechanism of Formation of Amino Acetonitrile in the interstellar medium*
66th South West and 62th South East Regional Meeting of the American Chemical Society. New Orleans, Estados Unidos, 30 de Noviembre 4 de Diciembre, 2010
144. F. Duarte, **A. Toro-Labbé:** *Mechanism of H₂ activation by(Amino)-Carbenes*
66th South West and 62th South East Regional Meeting of the American Chemical Society. New Orleans, Estados Unidos, 30 de Noviembre 4 de Diciembre, 2010
145. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *New Tools for Characterizing the Mechanisms of Chemical Reactions.*
7th Workshop of Computational Chemistry and Molecular Spectroscopy.
Punta de Tralca, Chile, Octubre 19-22, 2010.

146. R. Inostroza-Rivera, B. Herrera, **A. Toro-Labbé**: *Using Sandersons Principle for Estimating The Chemical Reactivity of Hydrogen Bonded Complex*
7th Workshop of Computational Chemistry and Molecular Spectroscopy.
Punta de Tralca, Chile, Octubre 19-22, 2010.
147. M.L. Cerón, B. Herrera, P. Araya, F. Garcia, **A. Toro-Labbé**: *Influence of the Monoclinic and Tetragonal Zirconia Phases on the Water Gas Shift Reaction. A theoretical Study.*
7th Workshop of Computational Chemistry and Molecular Spectroscopy.
Punta de Tralca, Chile, Octubre 19-22, 2010.
148. Eleonora Echegaray, Paul W. Ayers, **A. Toro-Labbé**: *New Insight into the Reaction Electronic Flux.*
7th Workshop of Computational Chemistry and Molecular Spectroscopy.
Punta de Tralca, Chile, Octubre 19-22, 2010.
149. Esteban Vohringer-Martinez, **Alejandro Toro-Labbé**: *The Role of Water in the Proton Transfer Reaction Mechanism of Tryptophan.*
7th Workshop of Computational Chemistry and Molecular Spectroscopy.
Punta de Tralca, Chile, Octubre 19-22, 2010.
150. Silvia Díaz-Acosta, Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé**: *Theoretical Study of the Mechanism of Formation of Animo Acetonitrile in the Interstellar Medium.*
7th Workshop of Computational Chemistry and Molecular Spectroscopy.
Punta de Tralca, Chile, Octubre 19-22, 2010.
151. Pablo Jaque, José Vicente Correa, Frank De Proft, Paul Geerlings, **Alejandro Toro-Labbé**: *Regaining the Woodward-Hoffmann Rules for Chelotropic Reaction via Conceptual DFT.*
7th Workshop of Computational Chemistry and Molecular Spectroscopy.
Punta de Tralca, Chile, Octubre 19-22, 2010.
152. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *New Tools for Characterizing the Mechanisms of Chemical Reactions.*
XXXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Anglet, Francia, 19-24 de Septiembre 2010.

153. Ricardo Inostroza-Rivera, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé**: *Using Sandersons Principle for Estimating The Chemical Reactivity of Hydrogen Bonded Complex.*
XXXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Anglet, Francia, 19-24 de Septiembre 2010.
154. Silvia Díaz-Acosta, Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé**: *Theoretical study of the Mechanism of Formation of Amino Acetonitrile in the Interstellar Medium*
XXXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina Lugar, Anglet, Francia, 19-24 de Septiembre 2010.
155. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Toward a Complete Characterization of the Mechanism of Chemical Reactions.*
Physical Frameworks for Sampling Chemical Compounds. Institute for Pure and Applied Mathematics (IPAM), UCLA. Los Angeles, Estados Unidos, 16-20 de Mayo, 2011.
156. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *On the Physical Nature of Activation Processes.*
Ninth Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC 2011. Santiago de Compostela, España, 17-22 de Julio, 2011.
157. Silvia Díaz-Acosta, Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé**: *Theoretical Study of the Mechanism of Formation of Amino Acetonitrile in the Interstellar Medium. The Reaction Force Perspective.*
Ninth Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC 2011. Santiago de Compostela, España, 17-22 de Julio, 2011.
158. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *The Reaction Electronic Flux in Chemical Processes.*
Summer Talks in Santiago III. Recent Developments in Quantum Chemistry. Santiago, Chile, 9-13 de Enero, 2012.

159. M.L. Cerón, P. Araya, F. Gracia, B. Herrera, **A. Toro-Labbé**: *Study of the Dual Descriptor in the Water Shift Reaction Catalyzed by Cu Supported on ZrO₂*.
Summer Talks in Santiago III. Recent Developments in Quantum Chemistry. Santiago, Chile, 9-13 de Enero, 2012.
160. J.V. Correa, P. Jaque, P. Geerlings, **A. Toro-Labbé**: *The Electronic Activity in Chelotropic and Cycloaddition Reactions*.
Summer Talks in Santiago III. Recent Developments in Quantum Chemistry. Santiago, Chile, 9-13 de Enero, 2012.
161. Silvia Díaz-Acosta, Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé**: *The Reaction Electronic Flux Perspective of the Mechanism of Formation of Amino Acetonitrile in the Interstellar Medium*.
Summer Talks in Santiago III. Recent Developments in Quantum Chemistry. Santiago, Chile, 9-13 de Enero, 2012.
162. Fernanda Duarte, Esteban Vöhringer-Martínez, **Alejandro Toro-Labbé**: *Elucidating the Catalytic Mechanism of the Enzyme PIN1 in the cis-trans Peptide Isomerization by QM/MM Simulations*.
Summer Talks in Santiago III. Recent Developments in Quantum Chemistry. Santiago, Chile, 9-13 de Enero, 2012.
163. R. Inostroza-Rivera, B. Herrera, **A. Toro-Labbé**: *Using Additivity Scheme Based on the Dual Descriptor for Estimating Electronic Properties in the Adenine-Uracil and Guanine-Cytosine Formation Reactions*.
Summer Talks in Santiago III. Recent Developments in Quantum Chemistry. Santiago, Chile, 9-13 de Enero, 2012.
164. Karla Soto, **Alejandro Toro-Labbé**: *A Model for Hydrogen Adsorption on Graphene*.
Summer Talks in Santiago III. Recent Developments in Quantum Chemistry. Santiago, Chile, 9-13 de Enero, 2012.
165. **Conferencia Invitada**:
Soledad Gutiérrez-Oliva, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé**: *Mathematical Characterization of Chemical Reactions and Molecular Properties*.
Maths and Chemistry. Zaragoza, España, 20-22 de Junio, 2012.

166. **Conferencia Invitada:**
Fernanda Duarte, **Alejandro Toro-Labbé:** *The Mechanism of Hydrogen Activation by (Amino)Carbenes.*
VIII Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2012. Barcelona, España, 26-29 de Junio, 2012.
167. Soledad Gutiérrez-Oliva, Silvia Díaz-Acosta, Jane S. Murray, Peter Politzer, **Alejandro Toro-Labbé:** *The Remarkable Isomerization of HCN to CNH: Unusual Features Revealed by the Reaction Force and the Reaction Force Constant.*
VIII Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2012. Barcelona, España, 26-29 de Junio, 2012.
168. Bárbara Herrera, Ricardo Inostroza-Rivera, **Alejandro Toro-Labbé:** *Analysis of Reaction Electronic Flux in Proton Transfers of Formamide Derived Systems.*
VIII Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2012. Barcelona, España, 26-29 de Junio, 2012.
169. **Conferencia Invitada:**
Soledad Gutiérrez-Oliva, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé:** *Towards a Theory of Chemical Reactions and Reaction Dynamics.*
Modeling and Design of Molecular Materials 2012, Wroclaw, Poland, 10-14 de Septiembre, 2012.
170. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Towards a Theory of Chemical Reactions and Reaction Dynamics Spectroscopy.*
IV Simposio de Estructura Electronica e Dinamica Molecular (SEED-MOL), Pirenópolis, Brasil, 24-28 de Septiembre, 2012.
171. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Introducing the Reaction Electronic Flux: The Electronic Activity During Chemical Reactions.*
30° Congreso Latinoamericano de Química (CLAQ), Cancún, México, 27-31 de Octubre, 2012.
172. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Theory of Chemical Reactions.*

39° Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión latina (QUITEL2013), Granada, España, 30 de Junio - 5 de Julio de 2013.

173. **Conferencia Invitada:**

Alejandro Toro-Labbé: *Hacia una Teoría Unificada de Reacciones y Reactividad en Química Orgánica.*

XIX Simposio Nacional de Química Orgánica (SINACO), Mar del Plata, Argentina, 16-19 de Noviembre de 2013.

174. **Conferencia Invitada:**

Alejandro Toro-Labbé: *Comprehensive Analysis of the Mechanism of Chemical Reactions. The Reaction Force Perspective*

17° Simposio Brasileiro de Química Teórica (SBQT), Angra dos Reis, Brasil, 24-28 de Noviembre de 2013.

175. S. Gutiérrez-Oliva, S. Díaz-Acosta, **A. Toro-Labbé.** *The nature of energy barriers of the HCN/CNH isomerization. The reaction force perspective.* Astrochemistry of Dust, Ice and Gas: Faraday Discussion 168. Noordwijkerhout, Holanda. 7-9 de Abril de 2014.

176. Diego Cortés-Arriagada, Bárbara Loeb, **Alejandro Toro-Labbé:** *Photophysical Properties of Iridium (III) Complexes to use in Inter Conversion Energy Devices.* 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2014), Santiago, Chile, 5-10 October 2014.

177. Stefan Vogt-Geisse, **Alejandro Toro-Labbé:** *Bonding, aromaticity, and planar tetracoordinated carbons in Si_2CH_2 and Ge_2CH_2 .* 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2014), Santiago, Chile, 5-10 October 2014.

178. Rocío Durán, Bárbara Herrera, Esteban Vohringer-Martínez, **Alejandro Toro-Labbé:** *Reaction Force and Reaction Electronic Flux Analysis of Intramolecular Proton Transfers in DNA Bases.* 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2014), Santiago, Chile, 5-10 October 2014.

179. Daniela Guzmán-Angel, Ricardo Inostroza-Rivera, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé:** *Theoretical Study of the Proton Transfer in Formamide and the Role of the Water Molecule in the Reaction.* 10th

- Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2014), Santiago, Chile, 5-10 October 2014.
180. Santanab Giri, Ricardo Inostroza-Rivera, Bárbara Herrera, Alvaro S. Núñez, Fernando Lund, **Alejandro Toro-Labbé**: *The Mechanism of Menshutkin Reaction in gas and Solvent Phases from the Perspective of the Reaction Electronic Flux*. 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2014), Santiago, Chile, 5-10 October 2014.
181. Daniela Ortega-Ulloa, Soledad Gutiérrez-Oliva, Dean J. Tantillo, **Alejandro Toro-Labbé**: *Study of the Mechanism of Carbocationic Triple Shift Rearrangement*. 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2014), Santiago, Chile, 5-10 October 2014.
182. Nery Villegas-Escobar, Soledad Gutiérrez-Oliva and **Alejandro Toro-Labbé**: *The Effect of Substituents on the Energy Barrier in Diels-Alder Reactions Revisited*. 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2014), Santiago, Chile, 5-10 October 2014.
183. Silvia Díaz-Acosta, Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé**: *H₂CN/CNH Isomerization Reaction Assisted by Water: an Analysis Based on the Reaction Electronic Flux and ETS-NOCV*. 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2014), Santiago, Chile, 5-10 October 2014.
184. Alejandra Maureira, Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé**: *Theoretical Study of the Energetic Behavior on Hydrogen Activation Reaction*. 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2014), Santiago, Chile, 5-10 October 2014.
185. Diego Cortés-Arriagada, Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé**: *Adsorption of Polycyclic Aromatic Pollutants on Graphene*. 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2014), Santiago, Chile, 5-10 October 2014.

186. **Conferencia Invitada:**
Soledad Gutiérrez-Oliva, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé**: *Theory of Chemical Reaction's Dynamics*. XIXth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology, Tamsui, Taipei, Taiwan. 11-17 de Noviembre de 2014.
187. Soledad Gutiérrez-Oliva, Diego Cortés-Arriagada, Bárbara Herrera, Karla Soto, **Alejandro Toro-Labbé**. *Reaction force profile for H-chemisorption on graphene*. XIXth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology, Tamsui, Taipei, Taiwan. 11-17 de Noviembre de 2014.
188. Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro Labbé**: *The Mechanism of Hydrogenation Reactions of Amino Acids Precursors in the Interstellar Medium: An Analysis Based on the Reaction Electron Flux*. 55th Sanibel Symposium. St. Simons Island, Estados Unidos. 15 al 20 de Febrero de 2015.
189. Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé**: *Hydrogenation Reactions of Amino Acids Precursors in the Interstellar Medium. The Reaction Electronic Flux Perspective*. 13th Latin American Conference on Physical Organic Chemistry. Carlos Paz, Argentina. 17 al 21 de Mayo de 2015.
190. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Comprehensive Analysis of the Mechanism of Chemical Reactions. The Reaction Force Perspective*. 13th Latin American Conference on Physical Organic Chemistry (CLAFQO). Carlos Paz, Argentina. 17 al 21 de Mayo de 2015.
191. Hernán Gil, Soledad Gutiérrez-Oliva, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé**: *Computational Astrochemistry: Interactions and Catalysis in the Interstellar Medium*. International Summer School "Molecular Catalysts: Tools for Chemical Synthesis". University of Heidelberg. Santiago, Chile. 13 al 24 de Julio de 2015.
192. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Some Hints from Conceptual DFT to Chemical Catalysis*. International Summer School "Molecular Catalysts:

Tools for Chemical Synthesis". University of Heidelberg. Santiago, Chile. 13 al 24 de Julio de 2015.

193. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Theoretical Computational Chemistry for Catalysis*. International Summer School "Molecular Catalysts: Tools for Chemical Synthesis". University of Heidelberg. Santiago, Chile. 13 al 24 de Julio de 2015.
194. Daniela Guzmán-Angel, Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé:** *Theoretical model for the computational analysis of catalytic reactions*. International Summer School "Molecular Catalysts: Tools for Chemical Synthesis". University of Heidelberg. Santiago, Chile. 13 al 24 de Julio de 2015.
195. Nery Villegas, Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé:** *Catalytic Mechanism of H₂ Activation by a Carbenoid Aluminium Complex*. XLI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2015. Torino, Italia. 26 al 31 de Julio de 2015.
196. Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé:** *The Mechanism of Hydrogenation Reactions of Amino Acids Precursors in the Interstellar Medium*. XLI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2015. Torino, Italia. 26 al 31 de Julio de 2015.
197. Daniela Guzmán-Angel, Ricardo Inostroza-Rivera, Soledad Gutiérrez-Oliva, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé:** *Role of Water in Intramolecular Proton Transfer Reactions of Formamide and Thioformamide*. XLI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2015. Torino, Italia. 26 al 31 de Julio de 2015.
198. Diego Cortés-Arriagada, **Alejandro Toro-Labbé:** *Insights into the use of Au₁₉Cu and Au₁₉Pd Clusters for Adsorption of Trivalent Arsenic*. XLI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2015. Torino, Italia. 26 al 31 de Julio de 2015.
199. Daniela Guzmán-Angel, Ricardo Inostroza-Rivera, Soledad Gutiérrez-Oliva, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé:** *Role of Water in Intramolecular Proton Transfer Reactions of Formamide and Thioformamide*. Modeling Interactions in Biomolecules VII. Praga, República Checa. 14 al 18 de Septiembre de 2015.

200. Daniela Guzmán-Angel, Ricardo Inostroza-Rivera, Soledad Gutiérrez-Oliva, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé**: *The Catalytic Role of Water in Proton Transfer Reactions. The Case of Formamide and Thioformamide*. 32° Congreso Latinoamericano de Química - CLAQ 2016 y XXXI Jornadas Chilenas de Química. Concepción, Chile. 19 al 22 de Enero de 2016.
201. Ricardo Inostroza-Rivera, Meziane Yahia-Ouahmed, Vincent Tognetti, Laurent Joubert, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé**: *Atomic Decomposition of the Reaction Force and Reaction Electronic Flux: an Example of Proton Transfer Reactions*. 32° Congreso Latinoamericano de Química - CLAQ 2016 y XXXI Jornadas Chilenas de Química. Concepción, Chile. 19 al 22 de Enero de 2016.
202. Sebastian Miranda-Rojas, **Alejandro Toro-Labbé**, Johannes Kastner: *(R)-2-Hydroxyisocaproyl-CoA Dehydratase: Why Using Radicals as intermediates?*. 32° Congreso Latinoamericano de Química - CLAQ 2016 y XXXI Jornadas Chilenas de Química. Concepción, Chile. 19 al 22 de Enero de 2016.
203. Stefan Vogt-Geisse, Ricardo Mata, **Alejandro Toro Labbé**: *Initiation and Propagation of the Ring-opening Polymerization of Lactones Promoted by Aluminium Alkoxides*. 32° Congreso Latinoamericano de Química - CLAQ 2016 y XXXI Jornadas Chilenas de Química. Concepción, Chile. 19 al 22 de Enero de 2016.
204. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Mecanismos de Reacciones Químicas. Una Perspectiva Mecano-Cuántica*. 32° Congreso Latinoamericano de Química - CLAQ 2016 y XXXI Jornadas Chilenas de Química. Concepción, Chile. 19 al 22 de Enero de 2016.
205. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Four Concepts to Characterize the Mechanisms of Chemical Reactions*. Solvay Workshop on "Conceptual Quantum Chemistry: Present Aspects and Challenges for the Future". Bruselas, Bélgica. 4 al 8 de Abril de 2016.
206. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Some Remarks on Activation and Relax-*

ation Processes in Chemical Reactions. Modeling and Design of Molecular Materials 2016, Trzebnica, Polonia, 26 al 30 de Junio de 2016.

207. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Characterization of the Electronic Activity in Molecular Activations on Graphene and Carbonaceous Materials*. Segundo Taller Latinoamericano de Materiales de Carbono (TLMC2). Chillán, Chile. 16 al 18 de Noviembre de 2016.
208. Diego Cortes-Arriagada, **Alejandro Toro-Labbé:** *Removal of Methylated Arsenic Pollutants with Silicon Doped Graphene*. XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2016. Montevideo, Uruguay. 20 al 25 de Noviembre de 2016.
209. Francisca Cid, **Alejandro Toro-Labbé**, Soledad Gutiérrez-Oliva: *Mechanistic Study of the Formation of CH_3NH_2 as a Glycine Precursor in the Interstellar Medium. Catalytic Role of the Water-Ice*. XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2016. Montevideo, Uruguay. 20 al 25 de Noviembre de 2016.
210. Christian Robles-Silva, **Alejandro Toro-Labbé**, Soledad Gutiérrez-Oliva: *The Catalytic Effect in Isomerisation Reactions of Molecules in Interstellar Medium*. XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2016. Montevideo, Uruguay. 20 al 25 de Noviembre de 2016.
211. Cesar Barrales-Martínez, **Alejandro Toro-Labbé**, Soledad Gutiérrez-Oliva: *The Mechanism of H_2 Formation in a PAH Surface: A Reaction Force and Reaction Electronic Flux Analysis*. XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2016. Montevideo, Uruguay. 20 al 25 de Noviembre de 2016.
212. Daniela Guzmán-Angel, **Alejandro Toro-Labbé**, Soledad Gutiérrez-Oliva: *Hydrogenation and Hydration of Carbon Dioxide: A Reaction Force and Reaction Electronic Flux Analysis*. XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2016. Montevideo, Uruguay. 20 al 25 de Noviembre de 2016.
213. Daniela E. Ortega, Diego Cortés-Arriagada, Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé:** *The Catalytic Mechanism of Ethylene Polymerization with Co-Activated Methallyl Nickel (II) Complexes*. XLII

- Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2016. Montevideo, Uruguay. 20 al 25 de Noviembre de 2016.
214. Rocio Durán, **Alejandro Toro-Labbé**, Bárbara Herrera: *Theoretical study of the isomerization of transition-metal complex with azo substituent, from the perspective of the Reaction Electronic Flux and Reaction Force*. XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2016. Montevideo, Uruguay. 20 al 25 de Noviembre de 2016.
215. Nery Villegas-Escobar, Stephen Hashmi, Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé**: *Double Gold Activation of 1-Ethynyl-2-(Phenylethynyl) Benzene Toward 5-exo-dig and 6-endo-dig Cyclization Reactions*. XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 2016. Montevideo, Uruguay. 20 al 25 de Noviembre de 2016.
216. **Conferencia Invitada:**
Alejandro Toro-Labbé: *Some Remarks on Activation and Relaxation Processes in Chemical Reactions: La Merveilleuse Équation de Marcus*. XLIII Congrès des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine, CHITEL 2017. París, Francia. 3 al 7 de julio de 2017.

12. PUBLICACIONES CIENTIFICAS

12.1 Datos Bibliométricos (ISI Web of Science)

- Citaciones: 5700
- Índice h: 39

12.2 Artículos Publicados

1. “Quadrupole Moments, Dipole Quadrupole **A** and Quadrupole **C** Polarizabilities by Means of Perturbation Theory”
LL. Espinoza, **A. Toro-Labbé** and P. Fuentealba, *International Journal of Quantum Chemistry*, **16** (1979) 939–954.
2. “Application of the Theory of Symmetry of Non-Rigid Molecules to the Calculation of the Torsional Potential and Dipole Moment of Acetone-Related Molecules”
A. Toro-Labbé and J. Maruani, *International Journal of Quantum Chemistry*, **22** (1982) 115–125.
3. “Symmetry Analysis and conformational Dependence of Molecular Properties in Non-Rigid Systems”
J. Maruani and **A. Toro-Labbé**, *Studies in Physical and Theoretical Chemistry*, **23** (1983) 291–314.
4. “Symmetry Adapted Expansion of the Interaction Potential for $H_2O \cdot \cdot HF$ Complex”
A. Toro-Labbé and J. Maruani, *Molecular Physics*, **51** (1984) 323–331.
5. “Simetrías y Propiedades de Estructuras No Rígidas. Determinación de Conformaciones”
Alejandro Toro-Labbé, *Folia Chimica Theoretica Latina (FCTL, Madrid)*, **22** (1984) 71.
6. “Symmetry Adapted Fourier Series Expansions of the Conformational Dependences of Hyperfine Couplings in Organic Radicals”
Jean Maruani and **Alejandro Toro-Labbé**, *Proceedings of the Congress Ampere on Magnetic Resonance and Related Phenomena*, **22** (1984) 453.

7. "The Conformational Dependence of the Hyperfine Couplings of γ Protons in π Radicals"
A. Toro-Labbé and J. Maruani, *Journal of Magnetic Resonance*, **61** (1985) 254–261.
8. "Symmetry Analysis and Conformational Dependence of Rigid Molecules Embedded in Cristal Sites"
J. Maruani and **A. Toro-Labbé**, contribución a: *Structure and Dynamics of Molecular Systems*, Volumen II, (Reidel, Holanda), 1985, pp 35–56.
9. "Inertia Defects of Urea"
M.M. Campos-Vallette, R. Contreras, G. Díaz-Fleming and **A. Toro-Labbé**, *Journal of Molecular Structure*, **142** (1986) 91.
10. "Algunos Aspectos de las Teorías del Estado Líquido"
Alejandro Toro-Labbé, Monografía Escuela Internacional PNUD–UNESCO *Química Teórica y Espectroscopía Molecular*, 1987, pp 137–148.
11. "The Intramolecular Conversion of Monothioformic Acid. An *Ab-Initio* Study"
A. Toro-Labbé and C. Cárdenas-Lailhacar, *International Journal of Quantum Chemistry*, **32** (1987) 685–697.
12. "Theoretical Analysis of the Potential Functions Hindering the Internal Rotation of CHO–SH, CFO–SH and HO–NO"
A. Toro-Labbé, *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, **180** (1988) 209–221.
13. "Conjugate Symmetry of Molecular Systems and Determination of Their Conformations"
Jean Maruani and **Alejandro Toro-Labbé**, *Canadian Journal of Chemistry*, **66** (1988) 1948–1956.
14. "A Molecular Dynamics Study of the Thermodynamics of Liquid Ethane"
Rolf Lustig, **Alejandro Toro-Labbé** and William A. Steele, *Fluid Phase Equilibria*, **48** (1989) 1–10.
15. "Specific Heats for Simple Molecular Fluids from Molecular Dynamics Simulations"

- Alejandro Toro-Labbé**, Rolf Lustig and William A. Steele, *Molecular Physics*, **67** (1989) 1385–1399.
16. “Potenciales Torsionales en Moléculas con un Rotor: Análisis del Isomerismo Rotacional de la Serie HXNX (X=O,S)”
Gloria I. Cárdenas-Jirón y **Alejandro Toro-Labbé**, *Folia Chimica Theoretica Latina (FCTL, Madrid)* **XVII** (1989) 177–190.
17. “Theoretical Analysis of the Internal Rotation and Determination of Molecular Structures of HSSH, HSSF and FSSF”
C. Cárdenas-Lailhacar and **A. Toro-Labbé**, *Theoretica Chimica Acta*, **76** (1990) 411–422.
18. “Theoretical Analysis of Torsional Potential Functions. Application to the CXS–CXS (X=H,F) Series of Molecules”
Alejandro Toro-Labbé, *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, **207** (1990) 247–258.
19. “On the Rotational Isomerism of One Rotor Molecules. A Comparative Study of the HSSH and HXNX (X=O,S) Series of Molecules”
Gloria I. Cárdenas-Jirón, Cristián Cárdenas-Lailhacar and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, **210** (1990) 279–290.
20. “Estudio Dinámico y Espectroscópico del Trans-Dimetilglioxal. Un Estudio del Estado Fundamental y de los Primeros Estados Excitados”
Y.G. Smeyers, M.L. Senent, F.J. Peñalver, **A. Toro-Labbé** y D. C. Moule, *Folia Chimica Theoretica Latina (Madrid)*, **XIX** (1991) 99–112.
21. “Internal Rotation Spectra of HONO and HSSH”
R. Letelier, **A. Toro-Labbé** and C. Utreras-Díaz, *Spectrochimica Acta*, **A 47** (1991) 29–33.
22. “Theoretical Analysis of Torsional Potential Functions Part II. The Rotational Isomerization of Glyoxal and Related Molecules”
Charles W. Bock and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, **232** (1991) 239–247.
23. “A Semi-Analytic Approach to Thermodynamic Properties of Ethane in the Liquid Phase and in the Liquid-Gas Phase Transition Regions”

- María Paz Benavides and **Alejandro Toro-Labbé**, *Fluid Phase Equilibria*, **67** (1991) 55–64.
24. “Análisis del Efecto de la Base de Orbitales Sobre el Potencial de Torsión de HO–NO”
Gloria I. Cárdenas–Jirón y **Alejandro Toro-Labbé**. *Anales de la Real Sociedad Española de Química*, **88** (1992) 43–48.
25. “Theory of One–Dimension Rotational Isomerization: A Study of the *Cis–Trans* Isomerization of HS–NS Compared to that of HO–NO”
Gloria I. Cárdenas–Jirón, J.R. Letelier, J. Maruani and **Alejandro Toro-Labbé**, *Molecular Engineering*, **2** (1992) 17–27.
26. “Theoretical Analysis of the Internal Rotation Molecular Structures and Electronic Properties of the XSSX Series of Molecules (X=H,F,Cl)”
Gloria I. Cárdenas–Jirón, Cristián Cárdenas–Lailhacar and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, **282** (1993) 113–122.
27. “Desolvation Effects on the Dissociation Energy of Diatomic Molecules: *Ab Initio* Study of the Dissociation of Li–F in Polar Media”
J. Lahsen, **A. Toro-Labbé**, R. Contreras and A. Aizman, *Theoretica Chimica Acta*, **86** (1993) 211–217.
28. “A Theoretical Spectroscopic Study of $X^1A_g(S_0) \rightarrow A^1A_u(S_1), n \rightarrow \pi^*$ Transition in Biacetyl”
M.L. Senent, D.C. Moule, Y.G. Smeyers, **A. Toro-Labbé** and F.J. Peñalver, *Journal of Molecular Spectroscopy*, **164** (1994) 66–78.
29. “A Model Potential for the Internal Rotation of Nitrosyl Hyperfluorite. Comparative Analysis of Different Theoretical Methods”
Gloria I. Cárdenas–Jirón and **A. Toro-Labbé**, *Chemical Physics Letters*, **222** (1994) 8–14.
30. “Characterization of Rotational Isomerization Processes in Monorotor Molecules.”
Gloria I. Cárdenas–Jirón, **Alejandro Toro-Labbé**, Charles W. Bock and Jean Maruani, en *Structure and Dynamics of Non–Rigid Molecular Systems*. Y.G. Smeyers (Editor), Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, (1995) pp 97–120.

31. "Possible Explanations for the Volcano-Shaped Plots for the Electrocatalytic Reduction of O₂ on Electrodes Modified with N-4 Macrocycles"
José H. Zagal, Jorge Pavéz, María Jesús Aguirre, Luis Basáez, L. Padilla-Campos and **Alejandro Toro-Labbé**, in *Oxygen Electrochemistry*. F.C. Anson, R.R. Adzic and K. Kinoshita (Editors). The Electrochemical Soc. Soft Bond Symposium Series, (1995) pp 89-100.
32. "A Model Potential for the Internal Rotation of Neighboring Rings of Bithiophene and Bipyrrole"
Luis Padilla-Campos and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, **330** (1995) 223-229.
33. "Hardness Profile and Activation Hardness for Rotational Isomerization Processes. 1. Application to Nitrous Acid and Hydrogen Persulfide"
Gloria I. Cárdenas-Jirón, Joaquín Lahsen and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Physical Chemistry*, **99** (1995) 5325-5330.
34. "Hardness Profile and Activation Hardness for Rotational Isomerization Processes. 2. The Maximum Hardness Principle"
Gloria I. Cárdenas-Jirón and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Physical Chemistry*, **99** (1995) 12730-12738.
35. "Le Modèle de la Syntopie et l'Etat de Transition des Réactions Chimiques: Fonctions d'Appartenance et Coefficients de Brønsted pour L'Isomérisation Cis-Trans"
Jean Maruani et **Alejandro Toro-Labbé**, *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences (Paris)*, **t 323 Série II b**, (1996) 609-615.
36. "Fragment Chemistry of the Hydrogen Thioperoxide Molecule. Energy, Chemical Potential and Hardness"
Gloria I. Cárdenas-Jirón and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, **390** (1997) 79-89.
37. "Theoretical Study of the Diffusion of Alkali Metals on a Cu(111) Surface"
Luis Padilla-Campos and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, **390** (1997) 183-192.

38. "Relations Between Potential Energy, Electronic Chemical Potential and Hardness Profiles"
Gloria I. Cárdenas–Jirón, Soledad Gutiérrez–Oliva, Junia Melin and **Alejandro Toro–Labbé**, *Journal of Physical Chemistry A*, **101** (1997) 4621–4627.
39. "Theoretical Investigation of the Adsorption of Alkali–Metals on a Cu(111) Surface. Model Potentials"
Luis Padilla–Campos, **Alejandro Toro–Labbé** and Jean Maruani, *Surface Science*, **385** (1997) 24–36.
40. "Monte Carlo Simulations of the Adsorption of Potassium on a Cu(111) Surface"
Luis Padilla–Campos and **Alejandro Toro–Labbé**, *Journal of Chemical Physics*, **108** (1998) 6458–6465.
41. "Dynamical and Spectroscopic Study of Internal Rotation in Formic, Thiolformic, Thionformic and Dithioformic Acids"
Yves G. Smeyers, María Villa, Gloria I. Cárdenas–Jirón and **Alejandro Toro–Labbé**, *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, **426** (1998) 155–163.
42. "The Harmonic Oscillator Tensor Approach to the Eigenspectra of Multiple–Well Molecular Potentials II. Periodic Potentials"
P.Palting, J.R.Letelier and **A. Toro–Labbé**, *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, **432** (1998) 1–7.
43. "The Internal Rotation of Hydrogen Thioperoxide: Energy, Chemical Potential and Hardness Profiles."
Gloria I. Cárdenas–Jirón, J.R. Letelier and **Alejandro Toro–Labbé**, *The Journal of Physical Chemistry A*, **102** (1998) 7864–7871.
44. "Comparative Study of the Electrocatalytic Activity of Cobalt Phthalocyanine and Cobald Naphthalocyanine for the Reduction of Oxygen and the Oxydation of Hydrazine"
Mauricio Isaacs, María Jesús Aguirre, **Alejandro Toro–Labbé**, Juan Costamagna, Maritza Páez and José Zagal, *Electrochimica Acta*, **43** (1998) 1821–1827.

45. "Extended Huckel Orbital Forces in Molecules"
J.R. Letelier and **A. Toro-Labbé**, *Boletín de la Sociedad Chilena de Química*, **44** (1999) 87–98.
46. "Energy, Chemical Potential and Hardness Profiles for the Rotational Isomerization of HOOH, HSOH and HSSH."
Soledad Gutiérrez-Oliva, Jorge Ricardo Letelier and **Alejandro Toro-Labbé**, *Molecular Physics*, **96** (1999) 61–70.
47. "Characterization of Chemical Reactions from the Profiles of Energy, Chemical Potential and Hardness"
Alejandro Toro-Labbé, *The Journal of Physical Chemistry A*, **103** (1999) 4398–4403.
48. "The Hammond Postulate and the Principle of Maximum Hardness in Some Intramolecular Rearrangement Reactions"
Miquel Solá and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Physical Chemistry A*, **103** (1999) 8847–8852.
49. "Validity of the Minimum Polarizability Principle in Molecular Vibrations and Internal Rotations: An Ab Initio SCF Study"
P.K. Chattaraj, P. Fuentealba, P. Jaque and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Physical Chemistry A*, **103** (1999) 9307–9312.
50. "HSAB Analysis of Charge Transfer in the Gas Phase Acid–Base Equilibria of Alkyl–Substituted Alcohols"
Patricia Pérez, **Alejandro Toro-Labbé** and Renato Contreras, *Journal of Physical Chemistry A*, **103** (1999) 11246–11249.
51. "Extended Huckel Orbital Forces and Jahn–teller Distortions in Molecules"
J.R. Letelier, **A. Toro-Labbé** and Y.N. Chiu, *Journal of Chinese Chemical Society*, **46** (1999) 333–339.
52. "A Theoretical Procedure to Determine Interaction Energies in Complex Systems. Application to the Oxygen–Iron Tetraazaporphyrin Interaction."
María Jesús Aguirre, Gloria I. Cárdenas–Jirón, **Alejandro Toro-Labbé** and José Zagal, *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, **493** (1999) 219–224.

53. "A Molecular Model Potential Study of the Gap HOMO–LUMO in a Low–Dimensional Crystal"
J.R. Letelier, **A. Toro–Labbé** and Y.N. Chiu, *International Journal of Modern Physics C*, **10** (1999) 115–130.
54. "Theoretical Study of the Double Proton Transfer in the CHX–XH ... CHX–XH (X=O,S) Complexes."
Pablo Jaque and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Physical Chemistry A*, **104** (2000),995–1003.
55. "Characterization of Keto–Enol Tautomerism of Acetyl Derivatives from Energy, Chemical Potential and Hardness"
Patricia Pérez and **Alejandro Toro-Labbé**. *Journal of Physical Chemistry A*, **104** (2000), 1557–1562.
56. "Global and Local Analysis of the Gas Phase Acidity of Haloacetic Acids."
Patricia Pérez, **Alejandro Toro–Labbé** and Renato Contreras, *Journal of Physical Chemistry A*, **104** (2000) 5882–5887.
57. "Using Sanderson's Principle to Estimate Global Electronic Properties and Bond Energies of Hydrogen Bonded Complexes."
Soledad Gutiérrez–Oliva, Pablo Jaque and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Physical Chemistry A*, **104** (2000) 8955–8964.
58. "Characterization of Elementary Chemical Reactions from Bifurcation Theory"
Juan Margalef-Roig, Salvador Miret-Artés and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Physical Chemistry A*, **104** (2000) 11589–11592.
59. "A Semiquantitative Description of Electrostatic and Polarization Substituent Effects. Gas Phase Acid–Base Equilibria as Test Cases"
Patricia Pérez, **Alejandro Toro–Labbé** and Renato Contreras, *Journal of Physical Chemistry A*, **104** (2000) 11993–11998.
60. "Theoretical Analysis of Some Substituted Imine–Enamine Tautomerism"
Patricia Pérez and **Alejandro Toro-Labbé**. *Theoretical Chemistry Accounts*, **105** (2001) 422–430.

61. “Ab Initio SCF and DFT Studies on Solvent Effects on Intramolecular Rearrangements Reactions.”
Pratim K. Chattaraj, Patricia Pérez, Jenny Zevallos and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Physical Chemistry A*, **104** (2001) 4272–4283.
62. “Solvent Effects on Electrophilicity”
Patricia Pérez, **Alejandro Toro-Labbé** and Renato Contreras, *Journal of the American Chemical Society*, **123** (2001) 5527–5531.
63. “Theoretical Study of the Internal Rotation of Cubylcubane and Cubylcubane Difluoride”
Bárbara Herrera and **Alejandro Toro-Labbé**, *Chemical Physics Letters*, **344** (2001) 193–199.
64. “A Theoretical Study of the Rotational Isomerization of Glyoxal and Halogen Derivatives”
Felipe Bulat and **Alejandro Toro-Labbé**, *Chemical Physics Letters*, **354**(2002) 508–517.
65. “Theoretical Study of the $\text{trans-N}_2\text{H}_2 \rightarrow \text{cis-N}_2\text{H}_2$ and $\text{F}_2\text{S}_2 \rightarrow \text{FSSF}$ Reactions in Gas and Solution Phases”
Pratim K. Chattaraj, Patricia Pérez, Jenny Zevallos and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, **580**(2002) 171–182.
66. “Theoretical Study of the Intramolecular Proton Transfer Reactions in Some Thiooxalic Acid Derivatives”
Eduardo Chamorro, **Alejandro Toro-Labbé** and Patricio Fuentealba, *Journal of Physical Chemistry A*, **106**(2002)3891–3898.
67. “Estimating Molecular Electronic Chemical Potential and Hardness from Fragments’ Addition Schemes”
Santanu Sengupta and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Physical Chemistry A*, **106**(2002) 4443–4446.
68. “Comparison Between Experimental and Theoretical Scales of Electrophilicity in Benzhydryl Cations”
Patricia Pérez, **Alejandro Toro-Labbé**, Arie Aizman and Renato Contreras, *Journal of Organic Chemistry*, **67**(2002) 4747–4752.

69. "Characterization of Neutral Copper Clusters Through Density Functional Theory Reactivity Descriptors".
Pablo Jaque and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Chemical Physics*, **117** (2002) 3208-3219.
70. "Characterization of Chemical Reactions Through Classical Concepts and DFT Descriptors"
Soledad Gutiérrez-Oliva, Pablo Jaque and **Alejandro Toro-Labbé**, in *Reviews in Modern Quantum Chemistry: A Celebration of the Contributions of Robert G. Parr*. K.D. Sen (Editor), World Scientific 2002, Ch. 32, pp 966-991.
71. "Torsional Vibration and Internal Rotation in $(X-Y_n)_2$ Molecules. The Huckel-Mobius LCVW"
Jorge R. Letelier, **Alejandro Toro-Labbé** and Y.N. Chiu, *Boletín de la Sociedad Chilena de Química*, **47** (2002) 325-333.
72. "Internal Rotation of Disilane and Related Molecules: a Density Functional Study".
Felipe Valencia, Aldo H. Romero, Miguel Kiwi, Ricardo Ramírez and **Alejandro Toro-Labbé**, *Chemical Physics Letters*, **371** (2003) 267-275.
73. "Density Functional Theory Study of the $Si_2H_{6-x}F_x$ Series of Molecules".
Felipe Valencia, Aldo H. Romero, Miguel Kiwi, Ricardo Ramírez and **Alejandro Toro-Labbé**, *Chemical Physics Letters*, **372** (2003) 815-824.
74. "An Extension of the Hammond Postulate. Structural Effects on the Classification of Chemical Reactions."
Felipe Bulat and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Physical Chemistry A*, **107** (2003) 3987-3994.
75. "Theoretical Study of the Internal Rotation of the Hydroxylic Group of the Enol Form of Guanine"
Jean Cadet, André Grand, Christophe Morell, J.R. Letelier, J.L. Moncada and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Physical Chemistry A*, **107** (2003) 5334-5341.

76. "The Torsional Stability Around a Single Bond Analyzed by Extended Huckel Orbital Forces"
Federico Eisner, Jorge R. Letelier and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Chinese Chemical Society*, 50(2003)1-6.
77. "Towards Understanding the Molecular Internal Rotations and Vibrations and Chemical Reactions Through the Profiles of Reactivity and Selectivity Indices: An Ab Initio SCF and DFT Study"
P.K. Chattaraj, S. Gutiérrez-Oliva, P. Jaque and **Alejandro Toro-Labbé**, *Molecular Physics*, **101** (2003) 2841-2853.
78. "Relations Among Several Nuclear and Electronic Density Functional Reactivity Indexes"
Miquel Torrent-Sucarrat, Josep M. Luis, Miquel Durán, **Alejandro Toro-Labbé** and Miquel Solà, *Journal of Chemical Physics*, **119** (2003) 9393-9400.
79. "A Theoretical Analysis of the Khon-Sham and Hartree-Fock Orbitals and their Use in the Determination of Electronic Properties"
Jenny Zevallos and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Chilean Chemical Society*, **48** (2003) 39-47.
80. "Extended Huckel Orbital Forces"
Federico Eisner, María del Carmen González, Jorge Ricardo Letelier and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of the Chilean Chemical Society*, **48** (2003) 105-113.
81. "The Torsional Problem of Oxalyl Chloride: A Challenge for Theoretical Methods"
Soledad Gutiérrez-Oliva and **Alejandro Toro-Labbé**, *Chemical Physics Letters*, **383** (2004) 435-440.
82. "Condensation of Frontier Molecular Orbitals Fukui Functions."
Felipe A. Bulat, Eduardo Chamorro, Patricio Fuentealba and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Physical Chemistry A*, **108** (2004) 342-349.
83. "The Formation of Neutral Copper Clusters From Experimental Binding Energies and Reactivity Descriptors"

- Pablo Jaque and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Physical Chemistry B*, **108** (2004) 2568-2574.
84. “Theoretical Study of the $\text{HXNY} \rightarrow \text{XNYH}$ (X,Y=O,S) Intramolecular Proton Transfer Reactions”
Bárbara Herrera and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Physical Chemistry A*, **108** (2004) 1830-1836.
85. “Synthesis of Dihydronaphthofurandiones and Dihydrofuroquinolinediones with Trypanocidal Activity and Analysis of their Stereoelectronic Properties.”
Ricardo A. Tapia, Cristian Salas, Antonio Morello, Juan Diego Mayab and **Alejandro Toro-Labbé**, *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, **12** (2004) 2451-2458.
86. “Energy and Chemical Force Profiles from the Marcus Equation”
Jorge Martínez and **Alejandro Toro-Labbé**, *Chemical Physics Letters*, 392(2004)132-139.
87. “Analysis of two Intramolecular Proton Transfer Processes in Terms of the Reaction Force”
Alejandro Toro-Labbé, Soledad Gutiérrez-Oliva, Mónica C. Concha, Jane S. Murray, and Peter Politzer, *Journal of Chemical Physics*, **121** (2004) 4570-4576.
88. “The Role of the Reaction Force to Characterize Local Specific Interactions that Activate the Intramolecular Proton Transfers in DNA Basis”
Bárbara Herrera and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Chemical Physics*, **121** (2004) 7096-7102.
89. “Intramolecular Interactions along the Reaction Path of Keto-Enol Tautomerism: Fukui Functions as Local Softnesses and Charges as Local Hardnesses”
Alexandre Hocquet, **Alejandro Toro-Labbé** and Henry Chermette, *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, **686** (2004) 213-218.
90. “Ab initio study of cubyl chains and networks”
F. Valencia, A.H. Romero, M. Kiwi, R. Ramirez, and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Chemical Physics*, **121**(2004)9172-9177.

91. "Reactivity of *trans* and *cis* Phenyldiazene Induced by the Internal Rotation of the Phenyl Group."
Jenny Zevallos Jorge R. Letelier and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Physical Chemistry A*, **108** (2004) 10186-10193.
92. "Conformational Effects on Glycine Ionization Energies and Dyson Orbitals"
Bárbara Herrera, O. Dolgounitcheva, V. G. Zakrzewski, **Alejandro Toro-Labbé** and J. V. Ortiz, *Journal of Physical Chemistry A*, **108** (2004) 11703-11708.
93. "New Dual Descriptor for Chemical Reactivity"
Christophe Morell, André Grand and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Physical Chemistry A*, **109** (2005) 205-212.
94. "Polycubanes linked with C₂, N₂ NO and NS: From Insulating to Metallic Behavior"
F. Valencia, A.H. Romero, M. Kiwi, R. Ramirez, and **Alejandro Toro-Labbé**, *Physical Review B*, **71** (2005) 033410(1-4).
95. "On the Mechanism of Hydrogen Transfer in the HSCH(O)⇌(S)CHOH and HSNO ⇌ SNOH Reactions"
Soledad Gutiérrez-Oliva, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé**, Henry Chermette, *Journal of Physical Chemistry A*, **109** (2005) 1748-1751.
96. "Connection Between the Average Local Ionization Energy and the Fukui Function"
Alejandro Toro-Labbé, Pablo Jaque, Jane S. Murray and Peter Politzer, *Chemical Physics Letters*, 407(2005) 143-145.
97. "The Role of Intramolecular Hydrogen Bonds vs. Other weak Interactions on the Conformation of hyponitrous acid and its mono- and Dithio-Derivatives"
Jenny Zevallos, **Alejandro Toro-Labbé**, Otilia Mó and Manuel Yáñez, *Structural Chemistry*, **16**(2005)295-303.
98. "DFT Hyperpolarizabilities of Push-Pull π -Conjugated Systems. Treatment of Exact Exchange and Role of Correlation"
Felipe A. Bulat, **Alejandro Toro-Labbé**, Benoît Champagne, Bernard

- Kirtman and Weitao Yang, *Journal of Chemical Physics*, **123**(2005) 0143191-7.
99. “The Reaction Force: Three Key Points Along an Intrinsic Reaction Coordinate.”
Peter Politzer, **Alejandro Toro-Labbé**, Soledad Gutiérrez-Oliva, Bárbara Herrera, Pablo Jaque, Mónica C. Concha and Jane S. Murray, *Journal of Chemical Sciences*, **117** (2005) 467-472.
100. “Photophysics and Photochemistry Studies of Nalidixic Acid”
P. Pavéz, **A. Toro-Labbé** and M.V. Encinas, *Photochemistry and Photobiology*, **82**(2006)254-261.
101. “Molecular Structure and Bonding of Copper Cluster Monocarbonyls Cu_nCO ($n=1,9$)”
Albert Poater, Miquel Durán, Pablo Jaque, **Alejandro Toro-Labbé** and Miquel Solà, *Journal of Physical Chemistry B*, **110**(2006)6526-6536.
102. “Bridging the Gap Between the Topological and Orbital Description of Hydrogen Bonding: The Case of Formic Acid Dimer and its Sulfur Derivatives”
Soledad Gutiérrez-Oliva, Laurent Joubert, Carlo Adamo, Felipe A. Bulat, José H. Zagal and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Physical Chemistry A*, **110**(2006) 5102-5107.
103. “Theoretical Support for Using the $\Delta f(r)$ Descriptor”
Christophe Morell, André Grand, Alejandro Toro-Labbé, *Chemical Physics Letters*, **425**(2006)342-346.
104. “Gas-Phase Structures, Rotational Barriers and Conformational Properties of Hydroxyl and Mercapto Derivatives of Cyclohexa-2,5-Dienone and -Dienthione”
Miquel Torrent-Sucarrat, Miquel Solà and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Physical Chemistry A*, **110** (2006) 8901-8911.
105. “Reaction Force Analysis of the Effect of Mg(II) on the 1,3 Intramolecular Hydrogen Transfer in Thymine”
Elizabeth Rincón, Pablo Jaque, **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal Physical Chemistry A*, **110** (2006) 9478-9485.

106. "The Linear Combination of Vibrational Wave Functions (LCVW) Method in a Morse-Gaussian Double Well Molecular Potential". Jorge Ricardo Letelier D., **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Mathematical Chemistry*, **39**(2006)485-494.
107. "A Theoretical Study of Conducting Oligomeric Systems: The Conceptual DFT Perspective" José Luis Moncada and **Alejandro Toro-Labbé**, *Chemical Physics Letters*, **429**(2006)161-165.
108. "Cubane Oligomers: A Density Functional Theory Study" Bárbara Herrera, Felipe Valencia, Aldo H. Romero, Miguel Kiwi, Ricardo Ramírez and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, **769** (2006) 183-187.
109. "Using the Reactivity-Selectivity Descriptor $\Delta f(r)$ in Organic Chemistry" Christophe Morell, André Grand, Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé**, in Alejandro Toro-Labbé (Editor): *Theoretical Aspects of Chemical Reactivity*. Chapter 7, pp. 101-117. Elsevier 2007.
110. "Reaction Force and Electron Localization Function Analysis of the Metal Chelation Process in Mg(II)-Thymine Complex." Elizabeth Rincón, **Alejandro Toro-Labbé**, *Chemical Physics Letters*, **438** (2007) 93-98.
111. "Reaction Force Decomposition of Activation Barriers to Elucidate Solvent Effects" Jaroslav V. Burda, Alejandro Toro-Labbé, Soledad Gutiérrez-Oliva, Jane S. Murray and Peter Politzer, *Journal of Physical Chemistry A*, **111** (2007) 2455-2457.
112. "A Noteworthy Feature of Bond Dissociation/Formation Reactions" Peter Politzer, Jane S. Murray, P. Lane, **Alejandro Toro-Labbé**, *International Journal of Quantum Chemistry*, **107** (2007) 2153-2157.
113. "Phenolysis and Benzenethiolysis Reactions of Carbonyl and Thiocarbonyl Compounds from the Perspective of the HSAB Principle" Paulina Pavéz, Bárbara Herrera, Enrique A. Castro, José G. Santos and

- Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, **811** (2007) 91-96.
114. “Effect of Ni(II), Cu(II) and Zn(II) Association on the *keto-enol* Tautomerism of Thymine in the Gas Phase”
Elizabeth Rincón, Manuel Yáñez, **Alejandro Toro-Labbé**, Otilia Mó, *Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP)*, **9** (2007) 2531-2537.
115. “Characterization of the Reactive Conformations of Protonated Histamine through the Reaction Force Analysis and the Dual Descriptor of Chemical Reactivity”
José Vicente Correa, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, **817** (2007) 111-118.
116. “The Role of Reaction Force and Chemical Potential in Characterizing the Mechanism of Double Proton Transfer in the Adenine-Uracil Complex”.
Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Physical Chemistry A*, **111** (2007) 5921-5926.
117. “Multiphilic Descriptor for Chemical Reactivity and Selectivity ”.
J. Padmanabhan, R. Parthasarathi, M. Elango, V. Subramanian, B. S. Krishnamoorthy, S. Gutierrez-Oliva, **A. Toro-Labbé**, D. R. Roy, and P. K. Chattaraj, *Journal of Physical Chemistry A*, **111** (2007) 9130 - 9138.
118. “Structure and medium effects on the photochemical behavior of non-fluorinated quinolone antibiotics”
Paulina Pavéz, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé** and María Victoria Encinas, *Photochemistry and Photobiology*, **83** (2007) 511-519.
119. “QSAR model for ethylene polymerisation catalysed by supported bis(imino) pyridine iron complexes.”
Victor L. Cruz, Jorge Martínez, Javier Martínez-Salazar, Javier Ramos, M. L. Reyes, **Alejandro Toro-Labbé** and Soledad Gutiérrez-Oliva, *Polymer*, **48** (2007) 7672-7678.
120. “The Electronic Flux in Chemical Reactions. Insights on the Mechanism of the Maillard Reaction.”
Patricio Flores, Soledad Gutiérrez-Oliva, Bárbara Herrera, Eduardo

- Silva, **Alejandro Toro-Labbé**, *Computational Methods in Science and Engineering*. **AIP963** (2007)345-349.
121. “A New Perspective on Chemical and Physical Processes: The Reaction Force”
Alejandro Toro-Labbé, Soledad Gutiérrez-Oliva, Jane S. Murray and Peter Politzer, *Molecular Physics*, **105** (2007) 2619-2625.
122. “On the Nature of the Active Site in bis(imino)Pyridyl Iron, a Catalyst for Olefin Polymerization”
Jorge Martínez, Víctor Cruz, Javier Ramos, Soledad Gutiérrez-Oliva, Javier Martínez-Salazar and **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Physical Chemistry C*, **112** (2008) 5023-5028.
123. “Reaction Force Constant and Projected Force Constants of Vibrational Modes Along the Path of an Intramolecular Proton Transfer Reaction”
Pablo Jaque, **Alejandro Toro-Labbé**, Peter Politzer, Paul Geerlings. *Chemical Physics Letters*, **456** (2008) 135-140.
124. “Theoretical Study of Cytosine Deamination from the Perspective of the Reaction Force Analysis”
Vanessa Labet, Christophe Morell, André Grand, **Alejandro Toro-Labbé**. *Journal of Physical Chemistry A*, **112** (2008) 11487-11494.
125. “The Reaction Electronic Flux: A New Concept to Get Insights Into Reaction Mechanisms. Study of Model Symmetric Nucleophilic Substitutions”
Eleonora Echegaray, **Alejandro Toro-Labbé**. *Journal of Physical Chemistry A*, **112** (2008) 11801-11807.
126. “Rationalization of Diels-Alder Reactions Through the Use of the Dual Reactivity Descriptor $\Delta f(r)$ ”
C. Morell, P.W. Ayers, S. Gutiérrez-Oliva, **A. Toro-Labbé**. *Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP)*, 10 (2008) 7239-7246.
127. “Reversibility from DFT-Based Reactivity Indices: Intramolecular Side Reactions in the Polymerization of Poly(vinyl chloride)”
Freija De Vleeschouwer, **Alejandro Toro-Labbé**, Soledad Gutiérrez-Oliva, Veronique Van Speybroeck, Michel Waroquier, Paul Geerlings,

- Frank De Proft. *Journal of Physical Chemistry A*, **113** (2009) 7899-7908.
128. “The Mechanism of Double Proton Transfer in Dimers of Uracil and 2-Thiouracil. The Reaction Force Perspective”
Al Mokhtar Lamsabhi, Otilia Mó, Soledad Gutiérrez-Oliva, Patricia Pérez, **Alejandro Toro-Labbé**, Manuel Yáñez. *Journal of Computational Chemistry*, **30** (2009) 389-398.
129. “Theoretical Study of the Regioselectivity of [2+2] Photocycloadditions Reactions of Acrolein with Olefins”
Pablo Jaque, **Alejandro Toro-Labbé**, Paul Geerlings, Frank De Proft. *Journal of Physical Chemistry A*, **113** (2009) 332-344.
130. “Analyzing Kullback Liebler Information Profiles: An Indication of their Chemical Relevance”
Alex Borgoo.a, Pablo Jaque, **Alejandro Toro-Labbé**, Christian Van Alsenoy, Paul Geerlings. *Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP)*, **11** (2009) 476-482.
131. “The Impact of Cu Atoms on the Reactivity of ZrO₂ Oligomers”
Barbara Herrera, Francisco Gracia, Paulo Araya, **Alejandro Toro-Labbé**. *Journal of Molecular Modelling*, **15** (2009) 405-410.
132. “Analysis of Diatomic Bond Dissociation and Formation in Terms of the Reaction Force and the Position-Dependent Reaction Force Constant”
Jane S. Murray, **Alejandro Toro-Labbé**, Tim Clark, Peter Politzer. *Journal of Molecular Modelling*, **15** (2009) 701-706.
133. “The Reaction Force and the Transition Region of a Reaction”
Alejandro Toro-Labbé, Soledad Gutiérrez-Oliva, Jane S. Murray, Peter Politzer. *Journal of Molecular Modelling*, **15** (2009) 707-710.
134. “The Reaction Force. A Scalar Property to Characterize Reaction Mechanisms”
Jorge Martínez, **Alejandro Toro-Labbé**. *Journal of Mathematical Chemistry*, **45** (2009) 911-927.
135. “Nucleophilicity and Electrophilicity of Silylenes from a Molecular Electrostatic Potential and Dual Descriptor Perspectives”

- José V. Correa, Pablo Jaque, Julianna Oláh, **Alejandro Toro-Labbé**, Paul Geerlings. *Chemical Physics Letters*, **470** (2009) 180-186.
136. “The Reaction Force: A Rigorously-Defined Approach to Analyzing Chemical and Physical Processes”
Alejandro Toro-Labbé, Soledad Gutiérrez-Oliva, Peter Politzer, Jane S. Murray. Contribution to *Theory of Chemical Reactivity. A Density Functional View*, Edited by Pratim K. Chattaraj, Taylor and Francis 2009, Chapter 21, pp 293-302.
137. “Reaction Force Analysis of Solvent Effects in the Addition of HCl to Propene.”
Jaroslav V. Burda, Jane S. Murray, **Alejandro Toro-Labbé**, Soledad Gutiérrez-Oliva, Peter Politzer. *Journal of Physical Chemistry A*, **113** (2009) 6500-6503.
138. “The Mechanism of the Interstellar Isomerization Reaction $\text{HOC}^+ \rightarrow \text{HCO}^+$ Catalyzed by H_2 . New Insights from the Reaction Electronic Flux”
Stefan Vogt-Geisse, **Alejandro Toro-Labbé**, *Journal of Chemical Physics*, **130** (2009) 244308.
139. “Insights into the Maillard Reaction. The Mechanism of the Schiff Base Formation from the Reaction Force Perspective.”
Patricio Flores-Morales, Soledad Gutiérrez-Oliva, Eduardo Silva, **Alejandro Toro-Labbé**. *Molecular Physics*, **107** (2009) 1587-1596.
140. “Designing 3-D Molecular Stars.”
William Tiznado, Nancy Perez-Peralta, Rafael Islas, **Alejandro Toro-Labbé**, Jesús Ugalde, Gabriel Merino, *Journal of the American Chemical Society*, **131** (2009) 9426-9431.
141. “Gold-copolymer Nanoparticles: Poly(e-caprolactone)/poly(N-vinyl-2-pyrrolidone) Biodegradable Triblock Copolymer as Stabilizer and Reductant”
Angel Leiva, César Saldías, Caterina Quezada, **Alejandro Toro-Labbé**, Francisco J. Espinoza-Beltrán, Marcela Urzúa, Ligia Gargallo, Deodato Radic: *European Polymer Journal* **45** (2009) 3035-3042.

142. “An Electrostatic Interaction Correction for Improved Crystal Density Prediction.”
Peter Politzer, Jorge Martínez, Jane S. Murray, Monica C. Concha, **Alejandro Toro-Labbé**, *Molecular Physics* **107** (2009) 2095-2101.
143. “Theoretical Study on a Multi-Center Model Based on Different Metal Oxidation States for the Bis(imino)pyridine iron Catalysts in Ethylene Polymerization.”
V́ctor L. Cruz, Javier Ramos, Javier Martínez-Salazar, Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé**, *Organometallics*, **28** (2009) 5889-5895.
144. “Reaction Electronic Flux: A New Descriptor of the Electronic Activity Taking Place During a Chemical Reaction. Application to the Characterization of the Mechanism of the Schiff’s Base Formation in the Maillard Reaction”.
Patricio Flores-Morales, Soledad Gutierrez-Oliva, Eduardo Silva, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, **943** (2010) 121-126.
145. “Is an Elementary Reaction Step Really Elementary? Theoretical Decomposition of Asynchronous Concerted Mechanisms”
Vanessa Labert, Christophe Morell, André Grand, **Alejandro Toro-Labbé**: *Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP)*, **12** (2010) 4142-4151.
146. “Identification of Pseudodiatom Behavior in Polyatomic Bond Dissociation: Reaction Force Analysis”
Jane S. Murray, **Alejandro Toro-Labbé**, Soledad Gutiérrez-Oliva, Peter Politzer: *Journal of Chemical Physics*, **132** (2010) 154308.
147. “The Catalytic Effect of Water on the Keto-Enol Tautomerization Reaction of Thioformic Acid”
Fernanda Duarte, **Alejandro Toro-Labbé**: *Molecular Physics*, **108** (2010) 1375-1384.
148. “Regaining the Woodward-Hoffmann Rules for Chelotropic Reactions via Conceptual DFT.”
Pablo Jaque, José V. Correa, Frank De Proft, **Alejandro Toro-Labbé**, Paul Geerlings: *Canadian Journal of Chemistry*, **88** (2010) 858-865.

149. "Regioselectivity of Radical Additions to Substituted Alkenes: Insight from Conceptual Density Functional Theory."
Freija De Vleeschouwer, Pablo Jaque-Olmedo, Paul Geerlings, **Alejandro Toro-Labbé**, Frank De Proft: *Journal of Organic Chemistry*, **75** (2010) 4964-4974.
150. "The Role of Water in the Proton Transfer Reaction Mechanism in Tryptophan"
Esteban Vöhringer-Martínez, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Computational Chemistry*, **31** (2010) 2642-2649.
151. "Quantitative Analysis of Molecular Surfaces: Areas, Volumes, Electrostatic Potentials and Average Local Ionization Energies".
Felipe A. Bulat, **Alejandro Toro-Labbé**, Tore Brinck, Jane S. Murray, Peter Politzer: *Journal of Molecular Modeling*, **16** (2010) 1679-1691.
152. "Amino Acids at Water-Vapor Interfaces: Surface Activity and Orientational Ordering"
Esteban Vöhringer-Martínez, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Physical Chemistry B*, **114** (2010) 13005-13010.
153. "Reaction Force and Its Link to Diabatic Analysis: A Unifying Approach to Analyzing Chemical Reactions"
Peter Politzer, Jeffrey R. Reimers, Jane S. Murray, Alejandro Toro-Labbé: *Journal of Physical Chemistry Letters*, **1** (2010) 2858-2862.
154. "Enhanced reactivity of Lys182 explains the limited efficacy of biogenic amines in preventing the inactivation of Glucose-6-Phosphate Dehydrogenase by Methylglyoxal".
Patricio Flores-Morales, Claudio Diema, Marta Vilaseca, Joan Estelrich, F. Javier Luque, Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé**, Eduardo Silva: *Bioorganic & Medicinal Chemistry* **19** (2011) 1613-1622.
155. "Characterizing the Mechanism of the Double Proton Transfer in the Formamide Dimer."
Jacqueline C. Hargis, Esteban Vöhringer-Martínez, H. Lee Woodcock, **Alejandro Toro-Labbé**, Henry F. Schaefer III: *Journal of Physical Chemistry A*, **115** (2011) 2650-2657.

156. "Insights on the Mechanism of Proton Transfer Reactions in Amino Acids."
Fernanda Duarte, Esteban Vohringer-Martinez, **Alejandro Toro-Labbé**: *Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP)*, **13** (2011) 7773-7782.
157. "Regard Unifié sur la Réactivité des Molécules et les Réactions en Chimie"
Alejandro Toro-Labbé: *Techniques de l'Ingénieur*, (2011) AF6230, 1-11.
158. "The mechanism of H₂ Activation by (Amino)Carbenes"
Fernanda Duarte, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Physical Chemistry A*, **115** (2011) 3050-3059.
159. "The Mechanics of Charge-Shift Bonds: A Perspective from the Electronic Stress Tensor."
Samantha Jenkins, Steven R. Kirk, Alfredo Guevara-García, Paul W. Ayers, Eleonora Echegaray, **Alejandro Toro-Labbé**. *Chemical Physics Letters*, **510** (2011) 18-20.
160. "Pointing the Way to the Products? Comparison of the Stress Tensor and the Second-Derivative Tensor of the Electron Density."
Alfredo Guevara-García, Eleonora Echegaray, **Alejandro Toro-Labbé**, Samantha Jenkins, Steven R. Kirk, Paul W. Ayers. *Journal of Chemical Physics*, **134** (2011) 234106 (1-9).
161. "The Mean Reaction Force: A Method to Study the Influence of the Environment on Reaction Mechanisms"
Esteban Vöhringer-Martínez, **Alejandro Toro-Labbé**. *Journal of Chemical Physics*, **135** (2011) 064505 (1-8).
162. "The Mechanism of Methanol Decomposition by CuO. A Theoretical Study Based on the Reaction Force and Reaction Electronic Flux Analysis"
M.L. Cerón, B. Herrera, P. Araya, F. Gracia, **A. Toro-Labbé**: *Journal of Molecular Modeling*, **17** (2011) 1625-1633.
163. "The reaction electronic flux in chemical reactions"
M.L. Cerón, E. Echegaray, S. Gutiérrez-Oliva, B. Herrera, **A. Toro-Labbé**: *Science China: Chemistry*, **54** (2011) 1982-1988.

164. "Electronic Stress as a Guiding Force for Chemical Bonding."
Alfredo Guevara-García, Paul W. Ayers, Samantha Jenkins, Steven R. Kirk, Eleonora Echegaray, **Alejandro Toro-Labbé**. *Topics in Current Chemistry (Electronic Effects in Organic Chemistry)*; B. Kirchner, Editor. (2011) 1-22.
165. "Electronic Activity in Chelotropic and Cycloaddition Reactions".
José V. Correa, Pablo Jaque, Paul Geerlings, **Alejandro Toro-Labbé**: *International Journal of Quantum Chemistry*, **112** (2012) 2142-2153.
166. "Applying Sanderson Rules to the Formation Reaction of Hydrogen-Bonded Dimers."
Ricardo Inostroza-Rivera, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé**. *Computational and Theoretical Chemistry*, **990** (2012) 222-226.
167. "The Woodward Hoffmann rules regained by Conceptual Density Functional Theory"
Paul Geerlings; Paul Ayers; **A. Toro-Labbé**; Pratim Chattaraj; Frank De Proft: *Accounts of Chemical Research* **45** (2012) 683-695; DOI: 10.1021/ar200192t.
168. "A Relation Between Different Scales of Electrophilicity: Are the Scales Consistent Along a Chemical Reaction?"
Christophe Morell, Bárbara Herrera, Soledad Gutiérrez-Oliva, María Luisa Céron, André Grand, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Physical Chemistry A*, **116** (2012) 7074-7081.
169. "Understanding the physics and chemistry of reaction mechanisms from atomic contributions: A reaction force perspective"
Esteban Vöhringer-Martínez, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Physical Chemistry A*, **116** (2012) 7419-7423.
170. "Understanding Chemical Binding Using the Berlin Function and the Reaction Force"
Debajit Chakraborty; Carlos Cárdenas; Eleonora Echegaray; Alejandro Toro-Labbé; Paul Ayers: *Chemical Physics Letters*, **539-540** (2012) 168-171.
171. "Perspectives on the Reaction Force"
Peter Politzer, **Alejandro Toro-Labbé**, Soledad Gutiérrez-Oliva, Jane S. Murray: *Advances in Quantum Chemistry*, **64** (2012) 190-209.

172. “Mechanisms of formation of hemiacetals. Intrinsic reactivity analysis”
Luis Miguel Azofra, Ibon Alkorta, José Elguero, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Physical Chemistry A*, **116** (2012) 8250-8259. (DOI jp304495f).
173. “Elucidating the Catalytic Role of Mg(II) in the Intramolecular Proton Transfer Reaction in Thymine”
Stefan Vogt-Geisse, Soledad Gutiérrez-Oliva, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of the Mexican Chemical Society*, **56** (2012) 346-350.
174. “Insights into the Mechanism of a SN2 Reaction from the Reaction Force and the Reaction Electronic Flux.”
Santanab Giri, Eleonora Echegaray, Paul W. Ayers, Alvaro S. Núñez, Fernando Lund, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Physical Chemistry A*, **116** (2012) 10015-10026. (DOI:10.1021/jp3076707).
175. “The Mechanism of Ethylene Polymerization Reaction Catalyzed by Group IVB Metallocenes. A Rational Analysis Through the Use of Reaction Force.”
Jorge Martínez-Araya, Raúl Quijada, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Physical Chemistry C*, **116** (2012), 21318-21325. (DOI:10.1021/jp302702h).
176. “How Does Pin1 Catalyze the Cis-Trans Prolyl Peptide Bond Isomerization? A QM/MM and Mean Reaction Force Study”
Esteban Vöhringer-Martinez, Fernanda Duarte, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Physical Chemistry B*, **116** (2012)12972-12979. (DOI:10.1021/jp307946h).
177. “Can Star-like C₆Li₆ be Treated as a Potential H₂ Storage Material?”
Santanab Giri, Fernando Lund, Alvaro S. Núñez, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Physical Chemistry C*, **117** (2013) 5544-5551.
178. “A Detailed Look at the Reaction Mechanisms of Substituted 2 Carbenes with Water”
Sara Gómez, Doris Guerra, José G. López, **Alejandro Toro-Labbé**, Albeiro Restrepo: *Journal of Physical Chemistry A*, **117** (2013) 1991-1999.

179. “Fine Structure in the Transition Region: Reaction Force Analyses of Water-Assisted Proton Transfers”
Diana Yepes, Jane S. Murray, Juan C. Santos, **Alejandro Toro-Labbé**, Peter Politzer, Pablo Jaque: *Journal of Molecular Modeling*, **19** (2013) 2689-2697.
180. “In Pursuit of Negative Fukui Functions: Examples Where the Highest Occupied Molecular Orbital Fails to Dominate the Chemical Reactivity”
Eleonora Echegaray, Carlos Cárdenas, Sandra Rabi, Nataly Rabi, Sungmin Lee, Farnaz Heidar Zadeh, James S. M. Anderson, **Alejandro Toro-Labbé**, Paul W. Ayers: *Journal of Molecular Modeling*, **19** (2013) 2779-2783.
181. “Influence of the Monoclinic and Tetragonal Zirconia Phases on the Water Gas Shift Reaction. A Theoretical Study.”
María Luisa Cerón, Bárbara Herrera, Paulo Araya, Francisco Gracia, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Molecular Modeling*, **19** (2013) 2885-2891.
182. “Is hyper-hardness More Chemically Relevant than Expected?”
Christophe Morell, André Grand, **Alejandro Toro-Labbé**, Henry Chermette: *Journal of Molecular Modeling*, **19** (2013) 2893-2900.
183. “Modeling the Mechanism of Glycosylation Reactions Between Ethanol, 1,2-Ethenediol and Methoxymethanol”
Luis Miguel Azofra, Ibon Alkorta, **Alejandro Toro-Labbé**, José Elguero: *Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP)*, **15** (2013) 14026-14036.
184. “Fine Structure in the Transition Region: Reaction Force Analyses of Water-Assisted Proton Transfers”
Diana Yepes, Jane S. Murray, Juan C. Santos, **Alejandro Toro-Labbé**, Peter Politzer, Pablo Jaque: *Journal of Molecular Modeling*, **19** (2013) 2689-2697.
185. “Revisiting the Seemingly Straightforward Hydrogen Cyanide/Hydrogen Isocyanide Isomerisation”
Soledad Gutiérrez-Oliva, Silvia Díaz, **Alejandro Toro-Labbé**, Pat

- Lane, Jane S. Murray, Peter Politzer: *Molecular Physics* **112** (2013) 349-354. DOI 10.1080/00268976.2013.819452
186. “Mechanism of Chemical Reactions in Four Concepts”
María Luisa Cerón, Soledad Gutiérrez-Oliva, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé** in *Concepts and Methods in Modern Theoretical Chemistry: Statistical Mechanics*. CRC Press, Taylor and Francis. Boca Ratón, 2013. pp 253-267.
187. “Using the Reaction Force and the Reaction Electronic Flux on the Proton Transfer of Formamide Derived Systems”
Ricardo Inostroza-Rivera, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé**: *Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP)*, **16**, (2014) 14489-14495.
188. “The mechanism of Menshutkin Reaction in Gas and Solvent Phases from the Perspective of Reaction Electronic Flux ”
Santanab Giri, Ricardo Inostroza-Rivera, Bárbara Herrera, Alvaro S. Núñez, Fernando Lund, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Molecular Modeling*, **20** (2014) 2353.
189. “Polarizability of Neutral Copper Clusters ”
Pablo Jaque, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Molecular Modeling*, **20** (2014) 2410.
190. “The mechanism of chemisorption of hydrogen atom on graphene: Insights from the reaction force and reaction electronic flux”
Diego Cortés-Arriagada, a) Soledad Gutiérrez-Oliva, Bárbara Herrera, Karla Soto, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Chemical Physics*, 141 (2014) 134701
191. “In Pursuit of Negative Fukui Functions: Molecules with Very Small Band Gaps”
Eleonora Echegaray, Sandra Rabi, Carlos Cárdenas, Fernaz Heidar Zadeh, Nataly Rabi, Sungmin Lee, James S.M. Anderson, **Alejandro Toro-Labbé**, Paul W. Ayers: *Journal of Molecular Modeling*, **20** (2014) 2162.
192. “A Computational and Conceptual DFT Study on the Mechanism of Hydrogen Activation by Novel Frustrated Lewis Pairs”
Patricia Pérez, Diana Yepes, Pablo Jaque, Eduardo Chamorro, Luis R.

- Domingo, Rene S. Rojas, **Alejandro Toro-Labbé**: *Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP)*, **17** (2015) 10715-10725.
193. “A Detailed Analysis of the Mechanism of a Carbocationic Triple Shift Rearrangement”
Daniela E. Ortega, Soledad Gutiérrez-Oliva, Dean J. Tantillo, **Alejandro Toro-Labbé**: *Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP)*, **17** (2015) 9771-9779.
194. “A Family of Ir(III) Complexes with High Nonlinear Optical Response and Their Potential Use in Light-Emitting Devices”.
Iván González, Diego Cortés-Arriagada, Paulina Dreyse, Luis Sanhueza-Vega, Isabelle Ledoux-Rak, Daniel Andrade, Iván Brito, **Alejandro Toro-Labbé**, Marco Soto-Arriaza, Stefano Caramori, Bárbara Loeb: *European Journal of Inorganic Chemistry*, (2015) 4946-4955.
195. “Atomic Decomposition of Conceptual DFT Descriptors: The Example of Proton Transfer Reactions”
Ricardo Inostroza-Rivera, Meziane Yahia-Ouahmed, Vincent Tognetti, Laurent Joubert, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé**: *Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP)*, **17** (2015) 17797-17808.
196. “Binding of Trivalent Arsenic onto the Tetrahedral Au₂₀ and Au₁₉Pt Clusters: Implications in Adsorption and Sensing”.
Diego Cortés-Arriagada, María Paz Oyarzun, Luis Sanhueza, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Physical Chemistry A*, **119** (2015) 6909-6918
197. “Catalytic Mechanism of H₂ Activation by a Carbenoid Aluminium Complex”
Nery Villegas-Escobar, Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Physical Chemistry C*, **119** (2015) 26598-26604.
198. “Effects of the Ionization in the Tautomerism of Uracil: A Reaction Electronic Flux Perspective”.
Al Mokhtar Lamsabhi, Soledad Gutiérrez-Oliva, Otilia Mó, **Alejandro Toro-Labbé** and Manuel Yáñez: *Journal of Computational Chemistry*, **36** (2015) 2135-2145.

199. “Improving As(III) adsorption on graphene based surfaces: impact of chemical doping”
Diego Cortés-Arriagada, **Alejandro Toro-Labbé**: *Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP)*, **17** (2015) 12056-12064.
200. “Insights on the Chemical Meanings of the Reaction Electronic Flux”.
Christophe Morell, Vincent Tognetti, Emmanuelle Bignon, Elise Dumont, Noemi Hernandez-Haro, Barbara Herrera, André Grand, Soledad Gutiérrez-Oliva, Laurent Joubert, **Alejandro Toro-Labbé**, Henry Chermette: *Theoretical Chemistry Accounts*, **134** (2015) 1-7.
201. “Mechanistic Insights into the Dehalogenation Reaction of Fluoro Acetate/Fluoro Acetic Acid”
Sebastián Miranda-Rojas, **Alejandro Toro-Labbé**: *The Journal of Chemical Physics*, **142** (2015) 194301.
202. “Reaction Electronic Flux as a Fluctuation of Relative Interatomic Electronic Populations”
Jorge Ignacio Martínez-Araya, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Physical Chemistry C*, **119** (2015) 3040-3049.
203. “The Performance of Methallyl Nickel Complexes and Boron Adducts in the Catalytic Activation of Ethylene”.
Oleksandra S. Trofymchuk, Daniela E. Ortega, Soledad Gutiérrez-Oliva, René S. Rojas, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Molecular Modeling*, **21** (2015) 227.
204. “About the Electronic and Photophysical Properties of Iridium(III)-Pyrazino[2,3-f][1,10]-Phenanthroline Based Complexes for use in Electroluminescent Devices”.
Diego Cortes-Arriagada, Luis Sanhueza, Ivan González, Paulina Dreyse, **Alejandro Toro-Labbé**: *Physical Chemistry Chemical Physics*, **18** (2016) 726-734
205. “New Cyclometalated Ir(III) Complexes with Bulky Ligands with Potential Applications in LEC Devices: Experimental and Theoretical Studies of their Photophysical Properties”.
Paulina Dreyse, Ivan González, Diego Cortes-Arriagada, Oscar Ramírez, Ignacio Salas, Andrea González, **Alejandro Toro-Labbé**, Bárbara Loeb: *New Journal of Chemistry*, **40** (2016) 6253-6263.

206. "Synthesis of New Phosphorescent Imidoyl-Indazol and Phosphine Mixed Ligand Cu(I) Complexes-Structural Characterization and Photo-physical Properties".
Alan Cabrera, Ivan González, Diego Cortes-Arriagada, Mirco Natali, Heinz Berke, Constantin Daniliuc, María Belen Camarada, **Alejandro Toro-Labbé**, René Rojas, Cristian Salas: *RSC Advances*, **6** (2016) 5141-5153.
207. "The Effect of the Environment on the Methyl Transfer Reaction Mechanism Between Trimethylsulfonium and Phenolate".
David Sáez, Stefan Vogt-Geisse, Ricardo Inostroza-Rivera, Tomas Kubar, Marcus Elstner, **Alejandro Toro-Labbé**, Esteban Vohringer-Martinez: *Physical Chemistry Chemical Physics*, **18** (2016) 24033-24042.
208. "Reaction Electronic Flux and its Role in DNA Intramolecular Proton Transfers".
Rocío Durán, Esteban Vohringer-Martinez, **Alejandro Toro-Labbé**, Bárbara Herrera: *Journal of Molecular Modeling*, **22** (2016) 145.
209. "A Theoretical Investigation of the Removal of Methylated Arsenic Pollutants with Silicon Doped Graphene".
Diego Cortes-Arriagada, **Alejandro Toro-Labbé**: *RSC Advances*, **6** (2016) 28500-28511.
210. "Role of Water in Intramolecular Proton Transfer Reactions of Formamide and Thioformamide".
Daniela Guzman-Angel, Ricardo Inostroza-Rivera, Soledad Gutiérrez-Oliva, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé**: *Theoretical Chemistry Accounts*, **135** (2016) 37:1-10.
211. "Insights Into the use of Au₁₉Cu and Au₁₉Pd Clusters for Adsorption of Trivalent Arsenic".
Diego Cortes-Arriagada, **Alejandro Toro-Labbé**: *Theoretical Chemistry Accounts*, **135** (2016) 52:1-13.
212. "The Catalytic Effect of the NH₃ Base on the Chemical Events in the Caryolene-Forming Carbocation Cascade".
Daniela E. Ortega, Quynh Nhu N. Nguyen, Dean J. Tantillo, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Computational Chemistry*, **37** (2016) 1068-1081.

213. “Chemical Potential and Reaction Electronic Flux in Symmetry Controlled Reactions”.
Stefan Vogt-Geisse, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Computational Chemistry*, **37** (2016) 1794-1800.
214. “Symmetry-Adapted Reaction Electronic Flux in Cycloaddition Reactions”.
Nery Villegas-Escobar, Stefan Vogt-Geisse, Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé**: *Theoretical Chemistry Accounts*, **135** (2016) 191.
215. “Aluminum and Iron Doped Graphene for Adsorption of Methylated Arsenic Pollutants”.
Diego Cortes-Arriagada, **Alejandro Toro-Labbé**: *Applied Surface Science*, **386** (2016) 84-95.
216. “Adsorption/Desorption Process of Formaldehyde onto Iron Doped Graphene: A Theoretical Exploration from Density Functional Theory Calculations”.
Diego Cortes-Arriagada, Nery Villegas-Escobar, Sebastian Miranda-Rojas **Alejandro Toro Labbé**: *Physical Chemistry Chemical Physics*, **19** (2017) 4179 - 4189.



217. “High Level Potential Energy Surface and Mechanism of Al(CH₃)₂OCH₃-Promoted Lactone Polymerization: Initiation And Propagation”.
Stefan Vogt-Geisse, Ricardo A. Mata, **Alejandro Toro-Labbé**: *Physical Chemistry Chemical Physics*, **19** (2017) 8989 - 8999.

218. “Study of Antiradical Mechanisms with Dihydroxybenzenes using Reaction Force and Reaction Electronic Flux.”
Cristina Ortega-Moo, Rocío Durán, Bárbara Herrera, Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé**, Rubicelia Vargas: *Physical Chemistry Chemical Physics*, **19** (2017) 14512 - 14519.
219. “Insights into the Mechanism of Ground and Excited State Double Proton Transfer Reaction in Formic Acid Dimer.”
Santanab Giri, Rakesh Parida, Madhurima Jana, Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Physical Chemistry A*, **121** (2017) 9531 - 9543.
220. “The influence of the metal cations and microhydration on the reaction trajectory of the $N_3 \leftrightarrow O_2$ thymine proton transfer: Quantum mechanical study.”
Filip Sebesta, Mateusz Z. Brela, Silvia Díaz, Sebastian Miranda-Rojas, Jane S. Murray, Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé**, Artur Michalak, Jaroslav V. Burda: *Journal of Computational Chemistry*, **38** (2017) 2680 - 2692.
221. “Double Gold Activation of 1-Ethynyl-2-(Phenylethynyl)Benzene Toward 5-exo-dig and 6-endo-dig Cyclization Reactions.”
Nery Villegas-Escobar, Mie Hojer Larsen, Soledad Gutiérrez-Oliva, A. Stephen K. Hashmi, **Alejandro Toro-Labbé**: *Chemistry A European Journal*, **23** (2017) 13360 - 13368.



222. “ETS-NOCV Decomposition of the Reaction Force: TheHCN/CNH Isomerization Reaction Assisted by Water.”

- Silvia Díaz, Mateusz Z. Brela, Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé**, Artur Michalak: *Journal of Computational Chemistry*, **38** (2017) 2076 - 2087.
223. “Theoretical Analysis of C-F Bond Cleavage Mediated by Cob[I]alamin-based Structures.”
D. Cortés-Arriagada, **A. Toro-Labbé**, J.R. Mora, L. Rincón, R. Mereau F.J. Torres: *Journal of Molecular Modeling*, **23** (2017) 264.
224. “The Role of CO-Activation and Ligand Functionalization in Neutral Methallyl Nickel(II) Catalysts for Ethylene Oligomerization and Polymerization.”
Daniela E. Ortega, Diego Cortés-Arriagada, Oleksandra S. Trofymchuk, Diana Yepes, Soledad Gutiérrez-Oliva, René S. Rojas, **Alejandro Toro-Labbé**: *Chemistry A European Journal*, **23** (2017) 10167 - 10176.
225. “Oxidized and Si-doped Graphene: Emerging Adsorbents for Removal of Dioxane.”
Diego Cortés-Arriagada, Sebastián Miranda-Rojas, Daniela E. Ortega, **Alejandro Toro-Labbé**: *Physical Chemistry Chemical Physics*, **19** (2017) 17587 - 17597.
226. “Why Low Valent Lead(II) Hydride Complex Would be a Better Catalyst for CO₂ Activation than Its 14 Group Analogues?.”
N. Villegas-Escobar, D.E. Ortega, D. Cortés-Arriagada, R. Durán, D. Yepes, S. Gutiérrez-Oliva, **A. Toro-Labbé**: *Journal of Physical Chemistry C*, **121** (2017) 12127 - 12135.
227. “Unraveling the Nature of the Catalytic Power of Fluoroacetate Dehalogenase.”
Sebastián Miranda-Rojas, Israel Fernández, Johannes Kaestner, **Alejandro Toro-Labbé**, Fernando Mendizábal: *ChemCatChem* **10** (2018) 1052 - 1063.
228. “B(C₆F₅)₃ Promotes the catalytic activation of [N,S]-ferrocenyl nickel complexes in ethylene oligomerization.”
Bárbara Rodríguez, Diego Cortés-Arriagada, Elvia P. Sánchez-Rodríguez, R. Alfredo Toscano, M. Carmen Ortega-Alfaro, José G. López-Cortés,

- Alejandro Toro-Labbé, René S. Rojas: Applied Catalysis A, General **550** (2018) 228 - 235.
229. “An extension of the Marcus equation: the Marcus potential energy function.”
Soledad Gutiérrez-Oliva, Bárbara Herrera, **Alejandro Toro-Labbé**: Journal of Molecular Modeling, **24** (2018) 4.
230. “Reaction Electronic Flux Perspective on the Mechanism of the Zimmerman Di- π -methane Rearrangement.”
Ricardo A. Matute, Patricia Pérez, Eduardo Chamorro, Nery Villegas-Escobar, Diego Cortés-Arriagada, Bárbara Herrera, Soledad Gutiérrez-Oliva, **Alejandro Toro-Labbé**: *Journal of Organic Chemistry*, **83** (2018) 5969 - 5974.



12.3 Artículos Sometidos y En Prensa

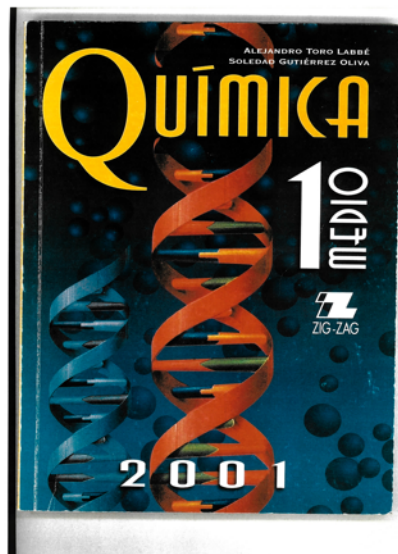
231. “Hydrogenation and Hydration of Carbon Dioxide: A Reaction Force and Reaction Electronic Flux Analysis”.
Daniela Guzmán-Angel, Soledad Gutiérrez-Oliva, Alejandro Toro-Labbé: *Journal of Molecular Modeling*, (2018) in press.

232. “In Search of the Role of the Axial Ligand on the Bio-Inspired Electrocatalytic Action of Iron Phthalocyanine for the Reduction of Molecular Oxygen”.

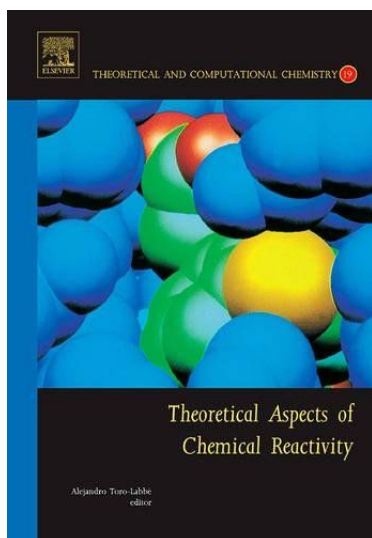
Ingrid Ponce, Rubén Oñate, José H. Zagal, Ana Pizarro, Juan Silva, Marcos Caroli Rezende, Marcos Flores, Diego Cortés-Arriagada, **Alejandro Toro-Labbé**, Luis M. Campos, Latha Venkataraman: *Journal of the American Chemical Society*, (2018) submitted.

13. LIBROS y OTRAS PUBLICACIONES

1. Alejandro Toro-Labbé, Soledad Gutiérrez-Oliva: Química 1° Medio. Texto escolar aprobado por el Ministerio de Educación de Chile. Editorial Zig-Zag, Santiago. Primera Edición: 2001; Segunda Edición Revisada: 2003.
2. Alejandro Toro-Labbé, Soledad Gutiérrez-Oliva: Química 2° Medio. Texto escolar aprobado por el Ministerio de Educación de Chile. Editorial Zig-Zag, Santiago. Primera Edición: 2002; Segunda Edición Revisada: 2003.



3. Alejandro Toro-Labbé (Editor): *Theoretical Aspects of Chemical Reactivity*. Volume 19 of the Series *Theoretical and Computational Chemistry*. Elsevier, Amsterdam, 2006.



4. Alejandro Toro-Labbé: Prefacio del Libro *Las Aguas Minerales de Chile* de Ludwig Darapsky G. (1857-1916). Biblioteca Fundamentos de la Construcción de Chile. Cámara Chilena de la Construcción; Pontificia Universidad Católica de Chile; Dirección de Bibliotecas, Archivos y Museos, 2011.