

Cargos actuales

- Profesor titular, Instituto de Química, Universidad de Antioquia.
- Director Grupo de Química-Física Teórica θ - ϕ τ .

Educación

- **University of Connecticut** Storrs, CT
Ph.D. in Chemistry 2005
 - Asesor: Robert K. Bohn
 - Tesis: Influence of π bonds on the structure of organic molecules
- **University of Connecticut** Storrs, CT
M. Sc. in Physics 2004
 - Asesor: H. Harvey Michels
 - Tesis: Thermophysical properties of refrigerant/lubricant mixtures
- **Florida Atlantic University** Boca Raton, FL
M. Sc. in Chemistry 1997
 - Asesor: Frank Mari
 - Tesis: Theoretical studies of the mechanism of the Wittig olefination reaction
- **Universidad de Antioquia** Medellín, Colombia
Químico 1992
 - Asesores: Jorge Mahecha y María Victoria Alzate
 - Tesis: Aplicación de los métodos variacionales y autoconsistentes en el estudio de la tabla periódica

Experiencia administrativa

- **Universidad de Antioquia** Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Director, Centro de Investigaciones, CIEN 2010 – 2012
- **Universidad de Antioquia** Instituto de Química
Director, Grupo de Química-Física Teórica 2006 – presente
- **Universidad de Antioquia** Instituto de Química
Miembro del Comité de posgrado 2008 – 2010

Publicaciones en revistas científicas

1. Elizabeth Florez, Nancy Acelas, Frank Ramírez, Cacier Hadad, Albeiro Restrepo. **Microsolvation of F^-** . *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2018**. Accepted. DOI: 10.1039/c8cp00819a
2. Emerson Rengifo, Sara Gómez, Julio Arce, Frank Weinhold, Albeiro Restrepo. **The role of hyperconjugation in the unusual conformation of thymine: a natural bond orbital analysis**. *Comp. Theor. Chem.* **2018**, 1130, 58.
3. Norberto Moreno, Cacier Hadad, Albeiro Restrepo. **Exotic species with explicit Noble metal – Noble gas – Noble metal linkages**. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2018**, 20, 5036.
4. Francisco Núñez, Xavier Solans, Albeiro Restrepo. **Mechanistic Insights into Alkane Metathesis Catalyzed by Silica Supported Tantalum Hydrides: A DFT study**. *Inorg. Chem.* **2017**, 56, 10458.
5. Paola Farfán, Andrea Echeverri, Estefanía Diaz, Juan David Tapia, Sara Gómez, Albeiro Restrepo. **Dimers of formic acid: structures, stability, and double proton transfer**. *J. Chem. Phys.* **2017**, 147, 044312.
6. Fernando Murillo, Alba Vargas-Caamal, Jose Luis Cabellos, Sudip Pan, Miguel Mora-Fonz, Alvaro Muñoz, Albeiro Restrepo, Gabriel Merino. **Does H_4SO_5 exist?** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, 19, 17088.
7. Nancy Acelas, Cacier Hadad, Albeiro Restrepo, César Ibargüen, Elizabeth Flórez. **Adsorption of nitrate and bicarbonate on Fe(hydr)oxide**. *Inorg. Chem.* **2017**, 56, 5455.
8. Sara Gómez, Jonathan Nafziger, Albeiro Restrepo, Adam Wasserman. **Partition-DFT on the water dimer**. *J. Chem. Phys.* **2017**, 146, 074106.
9. Juan Ramón Salazar, Alfredo Guevara, Rubicelia Vargas, Albeiro Restrepo, Jorge Garza. **Hydrogen bonds in methane-water clusters**. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, 18, 23508.
10. Elizabeth Florez, Gabriel Merino, Jose Luis Cabellos, Franklin Ferraro, Albeiro Restrepo, Cacier Hadad. **Structure and Bonding in WC_n ($n = 2 - 5$) clusters**. *Theor. Chem. Acc.* **2016**, 135, 216.

11. Elizabeth Flórez, Nancy Acelas, César Ibargüen, Sukanta Mondal, Jose Luis Cabellos, Gabriel Merino, Albeiro Restrepo. **Microsolvation of NO_3^- : structural exploration and bonding analysis.** *RSC Advances*, **2016**, 6, 71913.
12. Carolina Giraldo, Sara Gómez, Frank Weinhold, Albeiro Restrepo. **Insight into the mechanism of the Michael reaction.** *ChemPhysChem*. **2016**, 17, 2022.
13. Andy Zapata, Teresa Cárcamo, Cacier Hadad, Albeiro Restrepo. **On the nature of the trimer, tetramer, and pentamer of ammonia borane.** *Theor. Chem. Acc.* **2016**, 135, 95.
14. Norberto Moreno, Franklin Ferraro, Elizabeth Flórez, Cacier Hadad, Albeiro Restrepo. **Spin–Orbit coupling effects in Au_mPt_n clusters ($m + n = 4$).** *J. Phys. Chem. A*. **2016**, 120, 1698.
15. Sukanta Mondal, Jose Luis Cabellos, Sudip Pan, Edison Osorio, Juan Jose Torres–Vega, William Tiznado, Albeiro Restrepo, Gabriel Merino. **10 π –electron arenes à la carte: Structures and Bonding of the $[\text{E}-(\text{C}_n\text{H}_n)-\text{E}]^{(n-6)}$ ($\text{E} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$ and $n = 6 - 8$) complexes.** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, 18, 11909.
16. Howard Ramírez, Albeiro Restrepo, Wilson Cardona, Stefan Junne, Peter Neubauer, Rigoberto Rios. **Inversion of the stereochemical configuration (3S, 5S)–clavaminic acid into (3R, 5R)–clavulanic acid: A computationally–assisted approach based on experimental evidence.** *Journal of Theoretical Biology*. **2016**, 395, 40.
17. Jose Luis Cabellos, Alba Vargas–Caamal, Filiberto Ortiz–Chi, Henry Rzepa, Albeiro Restrepo, Gabriel Merino. **How many water molecules does it take to dissociate HCl?** *Chemistry – A European Journal*. **2016**, 22, 2812.
18. Edison Flórez, Alejandro Maldonado, Gustavo Aucar, Jorge David, Albeiro Restrepo. **Microsolvation of Methylmercury: Structures, Energies, Bonding and NMR Constants (^{199}Hg , ^{13}C and ^{17}O).** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, 18, 1537.
19. Alba Vargas–Caamal, Sudip Pan, Filiberto Ortiz–Chi, José Luis Cabellos, Julia Contreras–García, Albeiro Restrepo, Pratim Chattaraj, Gabriel Merino. **How strong are the Metallocene–Metallocene interactions? Case of Ferrocene, Ruthenocene, and Osmocene.** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, 18, 550.
20. Sara Gómez, C. Z. Hadad, Albeiro Restrepo. **Theoretical tools to distinguish O–ylides from O–ylidic complexes in carbene–solvent interactions.** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, 17, 31917.
21. Natalia Rojas, César Ibargüen, Albeiro Restrepo. **Molecular interactions in the microsolvation of dimethylphosphate.** *Chem. Phys. Lett.* **2015**, 635, 301.
22. Mutlay, I.; Restrepo, A. **Complex reaction networks in high temperature hydrocarbon chemistry.** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, 17, 7972.
23. Cui, Z.; Ding, Y.; Cabellos, J.; Osorio, E.; Islas, R.; Restrepo, A. Merino, G. **Planar tetracoordinate carbons with a double bond in CAI_3E clusters.** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, 17, 8769.
24. Vargas–Caamal, A.; Ortiz–Chi, F.; Moreno, D.; Restrepo, A.; Merino, G.; Cabellos, J. **The rich and complex potential energy surface of the ethanol dimer.** *Theor. Chem. Acc.* **2015**, 134, 16.

25. Grande-Aztatzti, R.; Cabellos, J.; Islas, R.; Infante, I.; Mercero, J.; Restrepo, A.; Merino, G. **Planar pentacoordinate carbons in CBe_5^{4-} derivatives.** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, *17*, 4620.
26. Cesar Ibargüen, Doris Guerra, Cacier Hadad, Albeiro Restrepo. **Very weak interactions: structures, energies and bonding in the tetramers and pentamers of hydrogen sulfide.** *RSC Advances*, **2014**, *4*, 58217.
27. Andrea Echeverri, Norberto Moreno, Albeiro Restrepo, Cacier Hadad. **Exotic noble gas cabene-like ions.** *Chem. Phys. Lett.* **2014**, *615*, 16.
28. Cacier Hadad, Elizabeth Flórez, Gabriel Merino, José Luis Cabellos, Franklin Ferraro, Albeiro Restrepo. **Potential energy surfaces of WC_6 clusters in different spin states.** *J. Phys. Chem. A*. **2014**, *118*, 5762.
29. Andy Zapata-Escobar, Marcela Manrique-Moreno, Doris Guerra, Cacier Hadad, Albeiro Restrepo. **A combined experimental and computational study of the molecular interactions between anionic ibuprofen and water.** *J. Chem. Phys.* **2014**, *140*, 184312.
30. Doris Guerra, Jorge David, Albeiro Restrepo. **Hydrogen bonding in the binary water/ammonia complex.** *J. Comput. Meth. Sci. Eng.* **2014**, *14*, 93–102.
31. Jonathan Romero, Albeiro Restrepo, Andrés Reyes. **Solvent isotope effects on the hydration of alkaline cations: H/D secondary isotope effects on electrostatic interactions.** *Mol. Phys.* **2014**, *112*, 518.
32. Wilson Cardona, Doris Guerra, Albeiro Restrepo. **Reactivity of δ -substituted α, β -unsaturated cyclic lactones with antileishmanial activity.** *Mol. Simulat.* **2014**, *40*(6), 477.
33. Nancy Acelas, Gina Hincapié, Doris Guerra, Jorge David, Albeiro Restrepo. **Structures, energies and bonding in the water heptamer.** *J. Chem. Phys.* **2013**, *139*, 044310.
34. Cacier Hadad, Albeiro Restrepo, Samantha Jenkins, Frank Ramírez, Jorge David. **Hydrophobic meddling in small water clusters.** *Theor. Chem. Acc.* **2013**, *132*, 1376.
35. Sara L. Gómez, Doris Guerra, Jorge David, Albeiro Restrepo. **Structural Characterization of the $(\text{MeSH})_4$ Potential Energy Surface.** *J. Mol. Model.* **2013**, *19*, 2173.
36. Juan David Gonzalez, Elizabeth Florez, Jonathan Romero, Andres Reyes, Albeiro Restrepo. **Microsolvation of Mg^{2+} , Ca^{2+} : strong influence of formal charges in hydrogen bond networks.** *J. Mol. Model.* **2013**, *19*, 1763.
37. Sara L. Gómez, Doris Guerra, José López, Alejandro Toro-Labbé, Albeiro Restrepo. **A Detailed Look at the Reaction Mechanisms of Substituted Carbenes with Water.** *J. Phys. Chem. A*. **2013**, *117*, 1991.
38. Cesar Ibargüen, Marcela Manrique-Moreno, Cacier Hadad, Jorge David, Albeiro Restrepo. **Microsolvation of Dimethylphosphate: A molecular model for the interaction of cell membranes with water.** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2013**, *15*, 3203.
39. Doris Guerra, Jorge David, Albeiro Restrepo. **$(\text{H}_3\text{N} - \text{BH}_3)_4$: The Ammonia Borane Tetramer.** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2012**, *14*, 14892.
40. Diana Yepes, Steven Kirk, Samantha Jenkins, Albeiro Restrepo. **Structures, Energies and Bonding in Neutral and Charged Li Microclusters.** *J. Mol. Model.* **2012**, *18*, 4171.

41. Jonathan Bimler, Stacy Broadbent, Karissa A. Utzat, Robert K. Bohn, Albeiro Restrepo, H. Harvey Michels, and Nancy S. True. **Microwave Spectrum, Molecular Structure, and Quadrupole Coupling of Vinyl Chloroformate.** *J. Mol. Struct.* **2012**, 1023, 87.
42. Jorge David, Doris Guerra, Albeiro Restrepo. **Structures, Stability and Bonding in $^1\text{Au}_{10}$ clusters.** *Chem. Phys. Lett.* **2012**, 539–540, 64.
43. Jonathan Romero, Andres Reyes, Jorge David, Albeiro Restrepo. **Understanding Microsolvation of Li^+ : Structural and Energetical Analyses.** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2011**, 13, 15264.
44. Samantha Jenkins, Albeiro Restrepo, Jorge David, Dulin Yin, Steven Kirk. **Spanning Topology Phase Diagrams of the Charge Densities of Water Isomers W_4 – W_6 .** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2011**, 13, 11644.
45. Frank Ramírez, Cacier Hadad, Doris Guerra, Jorge David, Albeiro Restrepo. **Structural Studies of the Water Pentamer.** *Chem. Phys. Lett.* **2011**, 507, 229.
46. Andrea Perez, Jorge David, Patricio Fuentealba, Albeiro Restrepo. **Octahedral Complexes of the Series of Actinides Hexafluorides AnF_6 .** *Chem. Phys. Lett.* **2011**, 507, 57.
47. Jorge David, Doris Guerra, Albeiro Restrepo. **The Jahn–Teller effect: A case of incomplete theory for d^4 complexes?** *Inorg. Chem.* **2011**, 50(4), 1480.
48. Juan David Ripoll, Andrei Serna, Doris Guerra, Albeiro Restrepo. **Electronic Structure Calculations on Helical Conducting Polymers.** *J. Phys. Chem. A.* **2010**, 114, 10917.
49. Jorge David, Doris Guerra, Cacier Hadad, Albeiro Restrepo. **Structure and Reactivity of the $^1\text{Au}_6\text{Pt}$ Clusters.** *J. Phys. Chem. A.* **2010**, 114, 10726.
50. Juliana Murillo, Jorge David, Albeiro Restrepo. **Insights into the Structure and Stability of the Carbonic Acid Dimer.** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2010**, 12, 10963.
51. Gina Hincapié, Nancy Acelas, Marcela Castaño, Jorge David, Albeiro Restrepo. **Structural Studies of the Water Hexamer.** *J. Phys. Chem. A.* **2010**, 114, 7809.
52. Cinthia Jaramillo, Doris Guerra, Luis Fernando Moreno, Albeiro Restrepo. **Competitive Substituent Effects on the Reactivity of Aromatic Rings.** *J. Phys. Chem. A.* **2010**, 114, 6033.
53. Albeiro Restrepo, Gary Bent, Harvey Michels. **Solution Theory Model for Refrigerant/Lubricant Mixtures.** *AIChE Journal.* **2009**, 55(12), 3241–3247.
54. Jorge David, Doris Guerra, Albeiro Restrepo. **Structural Characterization of the $(\text{Methanol})_4$ Potential Energy Surface.** *J. Phys. Chem. A.* **2009**, 113, 10167.
55. Juan F. Orrego, Hermínsul Cano, Albeiro Restrepo. **Quantum Mechanical Study of the Gas Phase Reactions Between a Series of Substituted Singlet Carbenes and Water.** *J. Phys. Chem. A.* **2009**, 113, 6517.
56. Cinthia Jaramillo, Luis F. Moreno, Albeiro Restrepo. **Proton Affinities and Protonation Sites in p–Nitroaniline.** *Rev. Col. Quím.* **2009**, 38, 149.
57. German Melo, Jorge David, Albeiro Restrepo. **Decomposition of the Scattering Amplitude into Surface and Shadow Components with Inclusion of Spin-Orbit Coupling.** *Phys. Rev. C.* **2008**, 78, 034611.

58. Jhon F. Pérez, Elizabeth Florez, Cacier Hadad, Patricio Fuentealba, Albeiro Restrepo. **Stochastic Search of the Quantum Conformational Space of Small Lithium and Bimetallic Lithium-Sodium Clusters.** *J. Phys. Chem. A.* **2008**, *112*, 5749.
59. Jorge David, Patricio Fuentealba, Albeiro Restrepo. **Relativistic Effects on the Hexafluorides of Group 10 Metals.** *Chem. Phys. Lett.* **2008**, *457*, 42.
60. Jhon F. Pérez, Cacier Hadad, Albeiro Restrepo. **Structural Studies of the Water Tetramer.** *Intl. J. Quantum Chem.* **2008**, *108*, 1653.
61. Jorge David and Albeiro Restrepo. **Relativistic Effects on the Nuclear Magnetic Shielding in the MF (M = Cu, Ag, Au) Series.** *Phys. Rev. A.* **2007**, *76*, 052511.
62. Sol M. Mejía, Juan F. Espinal, Albeiro Restrepo, Fanor Mondragón. **Molecular Interactions of (Ethanol)₂–Water Heterotrimers.** *J. Phys. Chem. A.* **2007**, *111*, 8250.
63. Albeiro Restrepo and Robert Bohn. **Alkyl Chains With CN and CCH Substituents Prefer Gauche Conformations.** *J. Mol. Struct.* **2007**, *833*, 189.
64. Karissa Utzat, Albeiro Restrepo, Robert Bohn, Harvey Michels. **Conformational Studies of Benzyl Alcohol and Benzyl Fluoride.** *Intl. J. of Quantum Chem.* **2004**, *100*, 964.
65. Manuel Marquez, Frank Mari, Carlos Gonzalez, Albeiro Restrepo. **Ab Initio Study of the Reactions Between a Series of Substituted Singlet Nitrenium Ions and Water.** *J. Phys. Chem. A.* **1999**, *103*, 6191. The corrected list of authors for this paper, with my name on it can be found at *J. Phys. Chem. A.* **2000**, *104*, 8154.
66. Albeiro Restrepo, Carlos Gonzalez, Frank Mari. **Comparative Ab initio Treatment (Hartree–Fock, Density Functional Theory, MP2 and Quadratic Configuration Interactions) of the Cycloaddition of Phosphorus Ylides with Formaldehyde in the Gas Phase.** *J. Phys. Chem. A.* **1998**, *102*, 6993.
67. Carlos Gonzalez, Albeiro Restrepo, Manuel Marquez, Kenneth Wiberg, Michael de Rosa. **Ab Initio Study of the Solvent Effects on the Singlet-Triplet Gap of Nitrenium Ions and Carbenes.** *J. Phys. Chem. A.* **1998**, *102*, 2732.
68. Albeiro Restrepo, Hermínsul Cano, Frank Mari, Carlos Gonzalez. **Theoretical Study of the Mechanism of the Wittig Reaction: Ab Initio and MNDO–PM3 Treatment of the Reaction of Unstabilized, Semistabilized and Stabilized Ylides with Acetaldehyde.** *Het. Chem.* **1997**, *8*, 557.
69. Carlos Gonzalez, Albeiro Restrepo, Manuel Marquez, Kenneth Wiberg. **Ab Initio Study of the Ylide–like Intermediate Methylenoxonium in the Reaction Between Singlet Methylene and Water.** *J. Am. Chem. Soc.* **1996**, *118*, 5408.
70. Albeiro Restrepo, Carlos Gonzalez, Frank Mari, Manuel Marquez. **Optimizadores Moleculares.** *Química: Actualidad y Futuro.* **1995**, *5*, 101.

Manuscritos sometidos a evaluación

1. Andy Zapata, Juliana Murillo, Cacier Hadad, Albeiro Restrepo. **Understanding the nature of bonding interactions in the carbonic acid dimers**
2. Natalia Rojas–Valencia, Isaias Lans, Marcela Manrique–Moreno, Cacier Hadad, Albeiro Restrepo. **Entropy drives the insertion of Ibuprofen into cell membranes**
3. Estefanía Díaz, Albeiro Restrepo, Francisco Núñez. **Reactivity of a silica–supported Mo alkylidene catalyst toward alkanes: A DFT study on the metathesis of propane**
4. Cacier Hadad, Elizabeth Flórez, Nancy Acelas, Gabriel Merino, Albeiro Restrepo. **Microsolvation of small cations and anions**

Conferencias

Más de 50 ponencias en eventos nacionales e internacionales, un buen número de ellas como conferencista invitado.

Proyectos de investigación

Participación en más de 10 proyectos de investigación, debidamente registrados ante el SUI, financiados tanto por la Universidad de Antioquia como por entidades externas.

Participación en más de 20 proyectos conjuntos no formalizados ante la Universidad, que han conducido a la formación de estudiantes de pre y posgrado y a la publicación de una buena cantidad de artículos científicos en colaboración con grupos colombianos y con grupos de China, Estados Unidos, México, España, Chile, Turquía, Inglaterra, Alemania, Francia, India, Perú, Holanda, Argentina.

Commités

1. **Miembro, Comité Científico**, *VII Encuentro Nacional de Químicos Teóricos y Computacionales (IVENQTC)*, *IV Escuela Colombiana de Teoría y Computación en las Ciencias Moleculares (IV-ECTCCM)*, a realizarse en Barranquilla, Colombia, Septiembre 20 – 23, 2018.
2. **Miembro, Comité Científico**, *VI Encuentro Nacional de Químicos Teóricos y Computacionales (IVENQTC)*, *III Escuela Colombiana de Teoría y Computación en las Ciencias Moleculares (III-ECTCCM)*, Bogotá, Colombia, Septiembre 20 – 23, 2016.
3. **Presidente del Comité Científico**, *V Encuentro Nacional de Químicos Teóricos y Computacionales (V-ENQTC)*, *II Escuela Colombiana de Teoría y Computación en las Ciencias Moleculares (II-ECTCCM)*, Guatapé, Colombia, Abril 27 – 30, 2014.
4. **Presidente del Comité Organizador**, *V Encuentro Nacional de Químicos Teóricos y Computacionales (V-ENQTC)*, *II Escuela Colombiana de Teoría y Computación en las Ciencias Moleculares (II-ECTCCM)*, Guatapé, Colombia, Abril 27 – 30, 2014.

5. **Miembro, Comité Científico**, *IV Encuentro Nacional de Químicos Teóricos y Computacionales (IVENQTC)*, *I Escuela Colombiana de Teoría y Computación en las Ciencias Moleculares (I-ECTCCM)*, Santiago de Cali, Colombia, Abril 28 – May 1, 2012.
6. **Scientific Advisory Board**, *1st International Conference of Computation for Science and Technology (ICCST-I)*, Chiang Mai, Thailand, Agosto 4 – 6, 2010.
7. **Miembro, Comité Científico**, *III Encuentro Nacional de Químicos Teóricos y Computacionales (IIENQTC)*, San Gil, Santander, Colombia, Abril 30 – May 2, 2010.
8. **Miembro, Comité Organizador**, *XXXV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL XXXV)*, San Andrés, Colombia, Septiembre 2009.
9. **Miembro, Comité Científico**, *II Encuentro Nacional de Químicos Teóricos y Computacionales (IIENQTC)*, Calarcá, Quindío, Colombia, Mayo 2008.
10. **Miembro, Comité Organizador**, *II Encuentro Nacional de Químicos Teóricos y Computacionales (IIENQTC)*, Calarcá, Quindío, Colombia, May 2008.

Evaluador para las siguientes revistas

1. Nature Communications
2. Langmuir
3. Journal of Computational Chemistry
4. Journal of Chemical Physics
5. RSC Advances
6. Journal of Physical Chemistry
7. Theoretical Chemistry Accounts
8. Chemical Physics
9. Chemical Physics Letters
10. Journal of Molecular Modeling
11. International Journal of Quantum Chemistry
12. Journal of Molecular Structure
13. International Journal of Molecular Sciences
14. Zeitschrift für Naturforschung A
15. Journal of Cluster Science
16. Physica B
17. Revista Mexicana de Física
18. Revista Colombiana de Química

19. Ion
20. Revista de Ciencias – Univalle

Evaluador de proyectos científicos para las siguientes entidades

1. Colciencias
2. Universidad de Antioquia
3. Universidad de Córdoba (Colombia)
4. Banco de la Republica (Colombia)
5. Austrian Science Fund
6. Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica, Argentina

Trabajos y tesis de investigación dirigidos y co-dirigidos

1. Natalia Rojas. Ph. D. en Química (a defender en 2018), Universidad de Antioquia. Título de la disertación (tentativo): **Interacción de Antiinflamatorios No Esteroidales (AINES) con Fosfolípidos de Membrana**

Cotutores: Profesores Marcela Manrique, Cacier Hadad.

2. Paola Farfán. M. Sc. en Química (a defender en 2018), Universidad de Antioquia. Título de la disertación: **Descripción detallada del Mecanismo de la Reacción de Wittig**

Cotutora: Profesora Sara Gómez.

3. Estefanía Díaz. M. Sc. en Química (a defender en 2018), Universidad de Antioquia. Título de la disertación: **Metátesis de Propano Catalizada por un Complejo de Molibdeno Soportado: Un Estudio DFT**

Asesor principal: Profesor Francisco Núñez.

4. Andy Zapata, M. Sc. en Química, Universidad de Antioquia, 2017. Título de la disertación: **Estudio de las interacciones intermoleculares de los boranos de amoníaco.**

Cotutor: Profesor Cacier Hadad.

5. Sara Gómez, M. Sc. en Química, Universidad de Antioquia, 2015. Título de la disertación: **Solvatación Específica de Carbenos Singlete.**

Cotutor: Profesor Cacier Hadad.

6. César Ibargüen, M. Sc. en Química, Universidad de Antioquia, 2015. Título de la disertación: **Estructuras, Energía y Enlazamiento en los Tetrámeros y Pentámeros de Sulfuro de Hidrógeno.**

7. Edison Florez, M. Sc. en Química, Universidad de Antioquia, 2015. Título de la disertación: **Efectos Relativistas en el Proceso de Microsolvatación del Metilmercurio.**

Cotutores: Profesores Alejandro Maldonado (Argentina), Gustavo Aucar (Argentina), Jorge David (Eafit).

8. Andrea Echeverri, Química. Universidad de Antioquia, 2015. Título de la disertación: **Diseño y estudio teórico de la especie exótica carbeno de dikriptón.**

Asesor principal: Profesor Cacier Hadad.

9. Norberto Moreno, M. Sc. en Química. Universidad de Antioquia, 2014. Título de la disertación: **Química de Especies Inertes: Nuevas Especies de Metales Nobles y Gases Nobles.**

Asesor principal: Profesor Cacier Hadad.

10. Carolina Giraldo, Química. Universidad de Antioquia, 2014. Título de la disertación: **Análisis Detallado del Mecanismo de la Reacción de Michael.**

Asesora principal: Profesora Sara Gómez.

11. Sara Gómez, Química. Universidad de Antioquia, 2013. Título de la disertación: **Estudio de los Mecanismos de las Reacciones Entre Carbenos Sustituídos y Agua.**

Cotutora Profesora Doris Guerra.

12. Andrei Serna, M. Sc. en Química. Universidad de Antioquia, 2012. Título de la disertación: **Cálculo de Propiedades Moleculares Conductoras Estáticas en Polímeros Helicoidales de Pirrol, Furano y Tiofeno en Función de su Tamaño.**

13. Andy Zapata, Químico. Universidad de Antioquia, 2012. Título de la disertación: **Caracterización Estructural y de la Densidad Electrónica de las Interacción del Ibuprofeno Aniónico con Una, Dos y Tres Moléculas de Agua.**

Cotutores: Profesores Marcela Manrique, Doris Guerra, Cacier Hadad.

14. Norberto Moreno, Químico. Universidad de Antioquia, 2012. Título de la disertación: **Caracterización de las Superficies de Energía Potencial de Clusters Au_mPt_n , ($n + m = 4$) Considerando el Efecto del Acoplamiento Spin-Órbita.**

Cotutores: Profesores Elizabeth Florez, Cacier Hadad.

15. Cesar Ibargüen, Químico. Universidad de Antioquia, 2012. Título de la disertación: **Microsolvatación del Dimetilphosphato: Un Modelo Molecular para la Interacción de Membranas Celulares con Agua.**

Cotutores: Profesores Marcela Manrique, Cacier Hadad.

16. Edison Florez, Químico. Universidad de Antioquia, 2012. Título de la disertación: **Efectos Relativistas en las Geometrías Moleculares de la Serie XH_4^+ ($\text{X} = \text{C}, \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}$).**

Cotutor, Profesor Jorge David.

17. Cinthia Jaramillo, Química, Universidad de Antioquia, 2012. Título de la disertación: **Efecto de los Sustituyentes en la Reactividad de Anillo Aromático.**
18. Andrea Pérez Villa, Química. Universidad de Antioquia, 2011. Título de la disertación: **Complejos Octaédricos de la Serie de Hexafluoruros de Actínidos AnF_6 .**

Cotutor, Profesor Jorge David.

19. Diana Yepes, Química. Universidad de Antioquia, 2009. Dissertation title: **Caracterización Estructural y Electrónica de Microclusters de Li, Na y K.**
20. Juan David Ripoll, Químico. Universidad de Antioquia. 2007. Título de la disertación: **Estructura Tridimensional y Propiedades Conductoras en Oligómeros de Pirrol, Furano y Tiofeno.**

Jurado de tesis

1. Wilver Muriel. M. Sc. en Física. Universidad Nacional de Colombia sede Medellín, 2017. Título de la disertación: **Estudio de los procesos fotofísicos y fotoquímicos de la 1- y 2-salicilideneantrilamina por medio de metodologías computacionales del estado electrónicamente excitado.**
2. Laura Pedraza. M. Sc. en Química. Universidad Nacional De Colombia sede Bogotá, 2016. Título de la disertación: **Análisis de la unión de positrones a moléculas empleando el método del orbital molecular para cualquier tipo de partícula (APMO).**
3. Andrés Escorcia. Ph. D. en Química. Universidad Industrial de Santander, 2015. Título de la disertación: **Enantioselective and Chemoselective Acylation of (*R,S*)-Propranolol Catalyzed by *Candida antarctica* Lipase B: A Theoretical and Experimental Approach.**
4. Jorge Ceballos. M. Sc. en Física. Universidad de Antioquia, 2014. Título de la disertación: **Caracterización Conformacional del Péptido ABRI.**
5. César Luna Cáceres, M. Sc. en Química, Universidad Industrial de Santander, 2012. Título de la disertación: **Desarrollo de una metodología eficiente para el cálculo de propiedades magnéticas moleculares.**
6. Mario Alberto Barón Rodríguez, Ph. D. en Química, Universidad Industrial de Santander, 2012. Título de la disertación: **Bases moleculares del cambio conformacional y aglomeración de la β -2-microglobulina. Efecto del Cu^{2+} como mediador en la formación de fibras amiloides.**
7. Juan Fernando Orrego, Ph. D. en Química, Universidad de Antioquia, 2010. Título de la disertación: **Caracterización Molecular de Algunas Reacciones de Oxidación de Hidrocarburos Aromáticos con Oxígeno Atómico.**
8. Geovanna Tafurt García, Ph. D. en Química. Universidad Industrial de Santander, 2008. Título de la disertación: **Estudios Teórico y Experimental Para Evaluar la Relación Actividad Antioxidante – Estructura de Anilinas Sintéticas y la Alquilación Intramolecular de FriedelCrafts de Orto-Alil-N-Bencilanilinas.**

9. Jhon Fredy Pérez, M. Sc. en Química, Universidad de Antioquia, 2007. Título de la disertación: **Átomo de Hooke: Correlación Electrónica e Interacción con Pulsos Laser.**
10. Elizabeth Florez, Ph. D. en Química, Universidad de Antioquia, 2006. Título de la disertación: **Caracterización Electrónica y Reactividad Química de Nanoestructuras Formadas por Átomos y Clusters Metálicos Depositados Sobre una Vacancia de Oxígeno en la Superficie del Óxido de Magnesio.**

Autoría de programas científicos

1. **Diatom.** Calculates electronic structure of diatomic molecules at the HF, MPn, CI and CC levels. Authors: Harvey Michels, Albeiro Restrepo. Owner: Prof. Harvey Michels, Physics Department, University of Connecticut.
2. **Nisc.** Non Ideal Solution Code. Calculates thermophysical properties (solubility, viscosity, heat capacity, density, enthalpy, entropy, free energy among others) of Refrigerant/Lubricant mixtures. Authors: Harvey Michels, Gary Bent, Albeiro Restrepo. Owner: United Technologies, Hartford, Connecticut.
3. **Ascec.** Annealing Simulado Con Energía Cuántica. Generates candidate structures for local minima in the Potential Energy Surfaces of atomic and molecular clusters. Authors: Jhon F. Perez and Albeiro Restrepo; contributions from Cesar Pérez. Owner: Grupo de Química-Física Teórica, Instituto de Química, Universidad de Antioquia.

Composiciones musicales

Con ocasión de la visita a la Universidad de Antioquia del Profesor Roald Hoffmann, ganador del Premio Nobel de Química, se compusieron cuatro piezas sobre sus poemas (Flat stones beg to be recycled, Tsunami, Lava, Enough already). Las composiciones fueron estrenadas en el Teatro Camilo Torres, de las cuales existe registro en Youtube.