

**HISTORIAL ACADÉMICO, DOCENTE E INVESTIGADOR**

**ANA MARÍA GRAÑA RODRÍGUEZ**

## ÍNDICE

1. Datos personales	5
2. Datos académicos	6
2.1 Títulos académicos	6
2.2 Puestos docentes desempeñados	7
2.3 Actividad docente desempeñada	8
2.3.1 Docencia en Licenciatura	
2.3.2 Docencia en Grado	
2.3.3 Docencia en Tercer Ciclo	
2.3.4 Docencia en Máster	
2.3.5 Dirección de Tesis Doctorales	
2.3.6 Dirección de Tesis de Licenciatura	
2.3.7 Dirección de trabajos para optar al DEA	
2.4 Actividad investigadora desempeñada	
2.5 Trabajos científicos : Publicaciones SCI	
2.6 Proyectos de investigación subvencionados	
2.7 Comunicaciones y ponencias presentadas a congresos	
2.8 Cursos y seminarios recibidos	
2.9 Becas, ayudas y premios recibidos (posteriores a la licenciatura)	
2.10 Otros méritos docentes o de investigación	
2.10.1 Participación en proyectos de innovación docente	
2.10.2 Participación, como asistente o ponente, en congresos orientados a la formación docente universitaria	
2.10.3 Material docente original	

- 2.10.4 Resultado de la evaluación docente
- 2.10. 5 Estancias en centros de reconocido prestigio internacional
- 2.10.6 Participación en comité organizador y científico de Congresos
- 2.11 Otros méritos
- 2.12 Cargos de gestión desempeñados
- 2.13 Diligencia de refrendo del currículum

## 1. Datos personales:

**Apellidos y nombre:** GRAÑA RODRÍGUEZ, ANA MARÍA



**Categoría actual como docente, centro, departamento y área de docencia actual:**

Catedrática de Universidad, Facultade de Química, Departamento de Química Física, Universidade de Vigo.

---

**Nº de tramos de Investigación: 4 (2013)**

**Nº de Componentes por mérito docente: 5 (2015)**

**Nº tramos de excelencia curricular Docente e investigadora Axencia de Calidade do Sistema Universitario de Galicia: 8 (2018)**

**Nº tramos por méritos de gestión Axencia de Calidade do Sistema Universitario de Galicia: 8 (2018)**

Researcher ID: K-6055-2014

Código Orcid: 000-0002-0794-2215

## **2. Datos Académicos**

### **2.1 Titulos Académicos**

#### **Licenciatura**

Licenciatura en Ciencias Químicas. Especialidad Química Fundamental. Universidade de Santiago de Compostela. Junio de 1988.

#### **Grado de Licenciada**

Grado de Licenciada en Química. Universidade de Santiago de Compostela. Noviembre 1988..

Título: “Estudio SCF MO de la tautomería cetoenólica en 7-hidroxi-1indanona”

Calificación: Sobresaliente

#### **Doctorado**

Doctora por la Universidade de Santiago de Compostela. 22 de julio de 1993.

Título: Propiedades estructurales de nucleosidos pirimidinicos derivados de tiumidina y midina. Estudio cuantico y actividad anti-VIH.

Calificación: Apto “Cum Laude”.

Dirección: Miguel Ángel Ríos Fernández.

## **2.2 Puestos docentes desempeñados**

- Desde octubre de 1988 hasta marzo de 1993:

Becaria de la Xunta de Galicia Universidade de Santiago de Compostela

- Desde marzo de 1993 hasta noviembre de 1995:

Ayudante de Universidad en la Universidade de Santiago de Compostela

- Desde noviembre de 1995 hasta octubre de 1997:

Profesora asociada T2TC en la Universidade de Vigo

- Desde octubre de 1997 hasta enero de 2000:

Profesora Titular de Univ. interina en la Universidade de Vigo

- Desde enero de 2000 hasta la actualidad:

Profesora Titular de Universidad en la Universidade de Vigo

## **2.3 Actividad docente desempeñada**

### **2.3.1 Docencia en Licenciatura**

#### **2.3.1.1 Docencia en la Licenciatura en Química (Universidade de Santiago de Compostela)**

- Curso académico 1990/91:

Licenciatura en Química: 60 horas de *Química Física General* (3º curso)

- Curso académico 1991/92:

Licenciatura en Química: 60 horas de *Termodinámica Química* (2º curso)

- Curso académico 1992/93:

Licenciatura en Química: 100 horas de *Termodinámica Química* (2º curso)

- Curso académico 1993/94:

Licenciatura en Química: 120 horas de *Termodinámica Química* (2º curso)

- Curso académico 1994/95:

Licenciatura en Química: 190 horas de *Termodinámica Química* (2º curso)

- Curso académico 1995/96:

Licenciatura en Química: 190 horas de *Técnicas Experimentales en Química Física* (2º curso)

### **2.3.1.2 Docencia en las Licenciaturas en Química y Ciencias del Mar y en la Ingeniería Técnica Industrial (Universidad de Vigo)**

- Curso académico 1995/96:

Licenciatura en Química: 180 horas de *Química Física General* (3º curso)

- Curso académico 1996/97: (1º curso)

Licenciatura en Química: 30 horas de *Química Física (Estructura de la Materia)* (4º curso)

Licenciatura en Química: 20 horas de *Cinética Química y Catálisis* (5º curso)

Licenciatura en Ciencias del Mar: 30 horas de *Procesos Químico-Físicos en Sistemas Litorales* (4º curso)

Licenciatura en Ciencias del Mar: 90 horas de *Química Marina* (1º curso)

Ingeniería Técnica Industrial: 60 horas de *Química* (1º curso)

- Curso académico 1997/98:

Licenciatura en Química: 30 horas de *Química Física (Estructura de la Materia)* (4º curso)

Licenciatura en Ciencias del Mar: 90 horas de *Procesos Químico-Físicos en Sistemas Litorales* (4º curso)

Licenciatura en Ciencias del Mar: 90 horas de *Cinética y Termodinámica en Sistemas Medioambientales* (4º curso)

Licenciatura en Ciencias del Mar: 90 horas de *Química Marina* (1º curso)

- Curso académico 1998/99:

Licenciatura en Química: 180 horas de *Química Física* (3º curso)

Licenciatura en Ciencias del Mar: 30 horas de *Cinética y Termodinámica en Sistemas Medioambientales* (4º curso)

Licenciatura en Ciencias del Mar: 30 horas de *Química Marina* (1º curso)



- Curso académico 1999/00:

Licenciatura en Química: 160 horas de *Química Física* (3° curso)

Licenciatura en Ciencias del Mar: 30 horas de *Cinética y Termodinámica en Sistemas Medioambientales* (4° curso)

Licenciatura en Ciencias del Mar: 30 horas de *Química Marina* (1° curso)

- Curso académico 2000/01:

Licenciatura en Química: 120 horas de *Química Física* (3° curso)

Licenciatura en Ciencias del Mar: 90 horas de *Cinética y Termodinámica en Sistemas Medioambientales* (4° curso)

- Curso académico 2001/02:

Licenciatura en Química: 110 horas de *Química Física* (3° curso)

Licenciatura en Química: 75 horas de *Enlace Químico y Estructura de la Materia* (1° curso)

Licenciatura en Química: 10 horas de *Ampliación de Química Física* (3° curso)

Licenciatura en Ciencias del Mar: 10 horas de *Cinética y Termodinámica en Sistemas Medioambientales* (4° curso)

- Curso académico 2002/03:

Licenciatura en Química: 110 horas de *Química Física* (3° curso)

Licenciatura en Química: 35 horas de *Termodinámica Química* (2° curso)

- Curso académico 2003/04:

Licenciatura en Ciencias del Mar: 30 horas de *Procesos Químico-Físicos en Sistemas Litorales* (4° curso)

Licenciatura en Ciencias del Mar: 90 horas de *Cinética y Termodinámica en Sistemas Medioambientales* (4° curso)

Ingeniería Técnica Industrial: 90 horas de *Físico-Química* (1° curso)

- Curso académico 2004/05:

Licenciatura en Química: 75 horas de *Enlace Químico y Estructura de la Materia* (1º curso)

Licenciatura en Química: 30 horas de *Ampliación de Química Física* (3º curso)

Ingeniería Técnica Industrial: 45 horas de *Físico-Química* (1º curso)

- Curso académico 2005/06:

Licenciatura en Química: 45 horas de *Química Física II* (3º curso)

Licenciatura en Ciencias del Mar: 25 horas de *Procesos Químico-Físicos en Sistemas Litorales* (4º curso)

- Curso académico 2006/07:

Licenciatura en Química: 45 horas de *Química Física II* (3º curso)

Licenciatura en Química: 15 horas de *Enlace Químico y Estructura de la Materia* (1º curso)

Licenciatura en Química: 45 horas de *Química Física Experimental* (3º curso)

- Curso académico 2007/08:

Licenciatura en Química: 60 horas de *Química Física II* (3º curso)

- Curso académico 2008/09:

Licenciatura en Química: 60 horas de *Química Física II* (3º curso)

Licenciatura en Química: 15 horas de *Enlace Químico y Estructura de la Materia* (1º curso)

- Curso académico 2009/10:

Licenciatura en Química: 37,5 horas de *Química Física II* (3º curso)

### **2.3.3 Docencia en los Grados en Química y Ciencias del Mar (Universidade de Vigo)**

- Curso académico 2012/2013:

Grado en Química: 32,5 horas de *Química I* (1º curso)

- Curso académico 2013/2014:

Grado en Química: 26 horas de *Química I* (1º curso)

- Curso académico 2015/2016:

Grado en Química: 13 horas de *Química Física II* (2º curso)

- Curso académico 2016/2017:

Grado en Química: 13 horas de *Química Física II* (2º curso)

- Curso académico 2017/2018:

Grado en Química: 84 horas de *Química Física II* (2º curso)

- Curso académico 2018/2019:

Grado en Ciencias del Mar: 79 horas de *Química II* (1º curso)

- Curso académico 2019/2020:

Grado en Ciencias del Mar: 79 horas de *Química II* (1º curso)

### **2.3.4 Docencia en Tercer Ciclo**

#### **2.3.4.1 Programa de doctorado: Química Fundamental**

- Bienio 1996/98: Curso académico 1996/97.

*Química Computacional. Métodos Semiempíricos. Aplicación a la resolución de problemas químicos: 2 créditos*

- Bienio 1996/98: Curso académico 1997/98.

*Estudio computacional de la transferencia protónica en sistemas con enlace de hidrógeno: 1 créditos*

- Bienio 1997/99: Curso académico 1997/98.

*Química Computacional. Métodos Semiempíricos. Aplicación a la resolución de problemas químicos: 2 créditos*

- Bienio 1997/99: Curso académico 1998/99.

*Estudio computacional de la transferencia protónica en sistemas con enlace de hidrógeno: 1 crédito*

- Bienio 1998/00: Curso académico 1998/99.

*Química Computacional. Teoría de átomos en moléculas I:* 1 crédito

- Bienio 1999/01: Curso académico 1999/00.

*Estudio mecanocuántico de la estructura molecular:* 4 créditos (compartidos con el profesor Ricardo Mosquera Castro).

- Bienio 2000/02: Curso académico 2000/01.

*Estudio mecanocuántico de la estructura molecular:* 3 créditos (compartidos con el profesor Ricardo Mosquera Castro).

- Bienio 2001/03: Curso académico 2001/02.

*Estudio mecanocuántico de la estructura molecular:* 4 créditos (compartidos con el profesor Ricardo Mosquera Castro).

- Bienio 2002/04: Curso académico 2002/03.

*Estudio mecanocuántico de la estructura molecular:* 4 créditos (compartidos con el profesor Ricardo Mosquera Castro).

#### **2.3.4.2 Programa de doctorado con mención de calidad: Química Teórica y Computacional.**

- Bienio 2004/06: Curso académico 2004/05.

*Análisis de la estructura electrónica:* 3 créditos (compartidos con los profesores Ricardo Mosquera Castro, Luis Carballeira Ocaña e Ignacio Pérez Juste).

#### **2.3.4.3 Programa de doctorado con mención de calidad: Química: Fundamentos y Aplicaciones**

- Bienio 2006/08: Curso académico 2006/07.

*Química Computacional:* 4 créditos (compartidos con el profesor Ricardo Mosquera Castro).

### **2.3.5 Docencia en Máster**

#### **2.3.5.1 Máster Universitario en Química Avanzada**

- Curso académico 2007/08:

*Estructura electrónica molecular:* 10 horas

*Química teórica: 19 créditos*

- Curso académico 2008/09:

*Estructura electrónica molecular: 10 horas*

*Química teórica: 19 horas*

- Curso académico 2009/10:

*Estructura electrónica molecular: 10 horas*

*Química teórica: 19 horas*

- Curso académico 2010/11:

*Estructura electrónica molecular: 9 horas*

*Química teórica: 18 horas*

- Curso académico 2011/12:

*Estructura electrónica molecular: 10 horas*

*Química teórica: 18 horas*

- Curso académico 2012/13:

*Estructura electrónica molecular: 9 horas*

*Química teórica: 18 horas*

- Curso académico 2013/14:

*Estructura electrónica molecular: 1 hora*

*Química teórica: 7 horas*

#### **2.3.5.2 Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional**

- Curso académico 2009/10:

*Estructura electrónica: 8 horas*

*Curso de nivelación (Matemáticas): 16 horas*

*Simetría en átomos, moléculas, sólidos y Mecánica Cuántica: 18 horas*

- Curso académico 2010/11:

*Estructura electrónica:* 8 horas

*Curso de nivelación (Matemáticas):* 16 horas

*Simetría en átomos, moléculas, sólidos y Mecánica Cuántica:* 18 horas

- Curso académico 2011/12:

*Estructura electrónica:* 8 horas

*Curso de nivelación (Matemáticas):* 8 horas

*Simetría en átomos, moléculas, sólidos y Mecánica Cuántica:* 25 horas

- Curso académico 2012/13:

*Estructura electrónica:* 9 horas

*Curso de nivelación (Matemáticas):* 10 horas

- Curso académico 2013/14:

*Bioquímica computacional:* 10 horas

- Curso académico 2019/20

*Laboratorio de química teórica aplicada:* 5 horas

### **2.3.6. Dirección de Tesis Doctorales**

1. **Título: Aplicaciones de la teoría AIM en la química de los compuestos oxigenados.**

Doctorando: Marcos Mandado Alonso.

Universidad: Universidade de Vigo.

Dirección: Ana María Graña Rodríguez y Ricardo Antonio Mosquera Castro.

Fecha: 25/06/04.

Calificación: Sobresaliente cum Laude.

Mención Doctorado Europeo y Premio extraordinario de doctorado.

2. **Título: Estudio QTAIM de nitrilos y compuestos relacionados.**

Doctorando: José Luis López Fernández

Universidad: Universidade de Vigo.

Dirección: Ana María Graña Rodríguez y Ricardo Antonio Mosquera Castro Fecha: 04/02/16.

Calificación: Sobresaliente cum Laude.

### **2.3.7 Dirección de Tesis de Licenciatura**

**1. Título: Estudio AIM de la similaridad en alcoholes alifáticos primarios.**

Autor: Marcos Mandado Alonso.

Universidad: Universidade de Vigo.

Facultad de Ciencias.

Dirección: Ana María Graña Rodríguez y Ricardo Mosquera Castro

Fecha: 18/09/00.

Calificación: Sobresaliente.

**2. Título: Estudio QTAIM del efecto Z en centros sp<sup>2</sup>.**

Autor: David Ferro Costas.

Universidad: Universidade de Vigo.

Facultad de Química.

Dirección: Ana María Graña Rodríguez y Ricardo Mosquera Castro.

Fecha: 18/03/11

Calificación: Sobresaliente

### **2.3.8 Dirección de trabajos para optar al Diploma de Estudios Avanzados**

**1. Título: Síntesis , caracterización estructural y reactividad de hidruro y halohidruros de metales de transición.**

Autor: Antonio Vila Vilariño.

Universidad: Universidade de Vigo.

Programa: Química Fundamental.

Bienio: 2001/03.

Dirección: Ana María Graña Rodríguez y Ricardo Mosquera Castro

Calificación: Apto.

## 2.4 Actividad investigadora desempeñada

- Etapa predoctoral: *Química Teórica y Computacional*.  
Institución: Universidade de Santiago de Compostela.  
Supervisor: Miguel Ángel Ríos Fernández.  
Centro: Facultad de Química.  
Departamento: Química Física.  
Período: 1988-1993.
- Etapa postdoctoral: *Química Teórica y Computacional*.  
Institución: Universidade de Santiago de Compostela.  
Centro: Facultad de Química.  
Departamento: Química Física.  
Período: 1993-1995.
- Etapa postdoctoral: *Química Teórica y Computacional*.  
Institución: University of California at Berkeley.  
Centro: Department of Chemistry.  
Supervisor: Martin Head-Gordon.  
Período: Febrero –Agosto 1994.
- *Química Teórica y Computacional*.  
Institución: Universidade de Vigo (Campus de Ourense).  
Centro: Facultad de Ciencias.  
Departamento: Química Física.  
Período: Noviembre 1995-Septiembre 1996.



- ***Química Teórica y Computacional.***

Institución: Universidade de Vigo (Campus de Vigo)

Centro: Facultad de Química.

Departamento: Química Física.

Período: Septiembre 1996-

## **2.5 Publicaciones (A: Artículo SCI, CL: Capítulo de libro)**

1. A: Graña AM, Rios MA, Rodriguez J (1991) Ab initio study of the structure and tautomerism in 7-hydroxy-1-indanone. *J Mol Struct THEOCHEM* 226:303–306 .  
[https://doi.org/10.1016/0166-1280\(91\)85009-V](https://doi.org/10.1016/0166-1280(91)85009-V)
2. A: Graña, A. M., Ríos, M. A. & Rodríguez, J. SCF-MO STUDY OF THE INTRAMOLECULAR PROTON-TRANSFER IN 7-HYDROXY-1-INDANONE. *An. Quim.* **87**, 812- (1991).
3. A: Estévez, C. M., Graña, A. M., Ríos, M. A. & Rodríguez, J. Ab initio study of the molecular structure of linear furocoumarins and pyrrolocoumarins. *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **231**, 163–168 (1991).
4. A: Graña, A. M., Ríos, M. A. & Rodríguez, J. Ab initio study of the structure and tautomerism of internally hydrogen-bonded aromatic carbonyls: Salicylaldehyde and o-hydroxyacetophenone. *Struct. Chem.* **2**, 575–580 (1991).
5. A: Estévez, C. M., Graña, A. M. & Ríos, M. A. A semiempirical AM1 conformational study of 3'-substituted deoxythymidines. *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **288**, 207–214 (1993).
6. A: Graña, A. M., Pereiras, A. J. & Ríos, M. A. Semiempirical (AM1) and ab initio calculations of 2-X-adenine (X = H, F, Cl) and  $\beta$ -D-1-amino-2,3-didehydro-1,2,3-trideoxyribofuranose. *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **280**, 211–222 (1993).
7. A: Lee, T. J., Head-Gordon, M. & Grana, A. M. Ab Initio Calculations of Singlet and Triplet Excited States of Chlorine Nitrate and Nitric Acid. *J. Phys. Chem.* (1995) doi:10.1021/J100011A015.

8. A: Head-Gordon, M., White, C. A., Maurice, D. & Grana, A. M. Analysis of Electronic Transitions as the Difference of Electron Attachment and Detachment Densities. *J. Phys. Chem.* **99**, 14261–14270 (1995).
9. A: Graña, A. M. & Ríos, M. A. Correlation between the anti-HIV activity and electrostatic properties of 3'-substituted deoxythymidines. *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **334**, 37–43 (1995).
10. A: Graña, A. M. & Mosquera, R. A. Atomic and bond properties in functionalized esters and amides. *J. Comput. Chem.* **20**, 1444–1454 (1999).
11. A: Graña, A. M. & Mosquera, R. A. The transferability of the carbonyl group in aldehydes and ketones. *J. Chem. Phys.* **110**, 6606–6616 (1999).
12. A: Graña, A. M. & Mosquera, R. A. Effect of protonation on the atomic and bond properties of the carbonyl group in aldehydes and ketones. *Chem. Phys.* **243**, 17–26 (1999).
13. A: Graña, A. M. Structure and tautomerism of 7-azaindole in the ground and excited states. *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **466**, 145–153 (1999).
14. A: de Melo Moreno, R. R., Graña, A. M. & Mosquera, R. A. Evolution of the atomic and bond properties of hydrogen peroxide during internal rotation. *Struct. Chem.* **11**, 9–13 (2000).
15. A: Graña, A. M. & Mosquera, R. A. Transferability in aldehydes and ketones. II. Alkyl chains. *J. Chem. Phys.* **113**, 1492–1500 (2000).
16. A: Graña, A. M. & Mosquera, R. A. The evolution of the atomic and bond properties during internal rotation of the hydrazine molecule. *J. Mol. Struct.* **556**, 69–76 (2000).
17. A: Mosquera, R. A., Grana, A. M. & Mandado, M. An AIM study on the effects of position isomery in long-chain alkanols. *Theochem-Journal Mol. Struct.* **572**, 223–233 (2001).
18. A: Mandado, M., Graña, A. M. & Mosquera, R. A. Approximate transferability in alkanols. *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **584**, 221–234 (2002).
19. A: López, J. L., Mandado, M., Graña, A. M. & Mosquera, R. A. Approximate transferability in alkanenitriles. *Int. J. Quantum Chem.* **86**, 190–198 (2002).

20. A: Mandado, M., Mosquera, R. A. & Grana, A. M. On the effects of electron correlation and conformational changes on the distortion of the charge distribution in alkyl chains. *Chem. Phys. Lett.* **355**, 529–537 (2002).
21. A: Vila, A., Graña, A. M. & Mosquera, R. A. Electron density characterisation of intermolecular interactions in the formaldehyde dimer and trimer. *Chem. Phys.* **281**, 11–22 (2002).
22. A: Mandado, M., Vila, A., Graña, A. M., Mosquera, R. A. & Cioslowski, J. Transferability of energies of atoms in organic molecules. *Chem. Phys. Lett.* **371**, 739–743 (2003).
23. A: Quiñónez, P. B., Vila, A., Graña, A. M. & Mosquera, R. A. AIM study on the influence of fluorine atoms on the alkyl chain. *Chem. Phys.* **287**, 227–236 (2003).
24. A: Mandado, M., Graña, A. M. & Mosquera, R. A. On the structures of the methanol trimer and their cooperative effects. *Chem. Phys. Lett.* **381**, 22–29 (2003).
25. A: Mandado, M., Mosquera, R. A. & Graña, A. M. AIM interpretation of the acidity of phenol derivatives. *Chem. Phys. Lett.* **386**, 454–459 (2004).
26. A: Pérez-Juste, I., Graña, A. M., Carballeira, L. & Mosquera, R. A. Theoretical study of the electronic structure of C<sub>n</sub>S(n=1-6) thiocumulenes. *J. Chem. Phys.* **121**, 10447–10455 (2004).
27. A: Mandado, M., Graña, A. M. & Mosquera, R. A. AIM charge density study of simple natural phenolic antioxidants. *Chem. Phys. Lett.* **400**, 169–174 (2004).
28. A: Mandado, M., Graña, A. M. & Mosquera, R. A. Do 1,2-ethanediol and 1,2-dihydroxybenzene present intramolecular hydrogen bond? *Phys. Chem. Chem. Phys.* **6**, 4391–4396 (2004).
29. A: Mandado, M., Mosquera, R. A., Graña, A. M. & Van Alsenoy, C. Charge density analysis of some processes involving intramolecular hydrogen transfer. *Tetrahedron* **61**, 819–829 (2005).
30. A: Graña, A. M., Hermida-Ramón, J. M. & Mosquera, R. A. QTAIM interpretation of the basicity of substituted anilines. *Chem. Phys. Lett.* **412**, 106–109 (2005).

31. A: Hermida-Ramón, J. M., Graña, A. M. & Estévez, C. M. Structural study of methane hydrate. *Struct. Chem.* **18**, 649–652 (2007).
32. A: Hermida-Ramón, J. M. & Grana, A. M. Blue-shifting hydrogen bond in the benzene-benzene and benzene-naphthalene complexes. *J. Comput. Chem.* **28**, 540–546 (2007).
33. A: Mandado, M., Graña, A. M. & Perez-Juste, I. Aromaticity in spin-polarized systems: Can rings be simultaneously alpha aromatic and beta antiaromatic? *J. Chem. Phys.* **129**, 164114(1)-164114(7) (2008).
34. A: Mosquera, R. A., Graña, A. M. & López, J. L. Electron Density Analysis on the Protonation of Nitriles. *J. Phys. Chem. A* (2009) doi:10.1021/JP811023X.
35. A: Mandado, M. *et al.* How Does Aromaticity Rule the Thermodynamic Stability of Hydroporphyrins? *Chem. - A Eur. J.* **17**, 3274–3286 (2011).
36. A: Ferro-Costas, D., Otero, N., Graña, A. M. & Mosquera, R. A. A QTAIM-based energy partitioning for understanding the physical origin of conformational preferences: Application to the Z effect in O=C-X-R and related units. *J. Comput. Chem.* **33**, 2533–2543 (2012).
37. A: Lorenzo, I. & Graña, A. M. Stacking and hydrogen bond interactions between adenine and gallic acid. *J. Mol. Model.* **19**, 5293–5299 (2013).
38. A: Ramos-Berdullas, N., Graña, A. M. & Mandado, M. Study of electron transport in polybenzenoid chains covalently attached to gold atoms through unsaturated methylene linkers. *Theor. Chem. Acc.* **134**, (2015).
39. A: Núñez-Montenegro, A., Argibay-Otero, S., Carballo, R., Graña, A. & Vázquez-López, E. M. Supramolecular Synthesis and Experimental and Theoretical Studies of Cocrystal Systems Based on Resorcinol-Thiosemicarbazones and N,N'-Divergent Dipyrindines. *Cryst. Growth Des.* **17**, 3338–3349 (2017).
40. A: Pino-Cuevas, A., Graña, A., Abram, U., Carballo, R. & Vázquez-López, E. M. Structural study of mono-, di- and tetranuclear complexes of the  $\{\text{Re}(\text{CO})_3\}^+$  fragment with thiosemicarbazone/thiosemicarbazonate ligands containing benzothiazole or benzoxazole groups. *CrystEngComm* **20**, 4781–4792 (2018).

41. **A:** López-Fernández, J. L., Mosquera, R. A. & Graña, A. M. Do one-step mechanisms always involve simultaneous evolution of electron density? QTAIM/IQA analysis of the Curtius rearrangement. *Int. J. Quantum Chem.* (2020) doi:10.1002/qua.26170.
42. **A:** Hermida-Ramón, J. M. & Graña, A. M. Theoretical study of the complexes of light-gated corannulene tweezers with fullerene. *Struct. Chem.* (2020) doi:10.1007/s11224-020-01502-2.
43. **A:** Álvarez-Pazos, N., Bravo, J., Graña, A. M. & García-Fontán, S. Rhenium(I) carbonyl complexes bearing the alkenylphosphinite ligand Ph<sub>2</sub>POCH<sub>2</sub>CH=CH<sub>2</sub>. *Polyhedron* (2020) doi:10.1016/j.poly.2019.114288.
44. **A:** Álvarez-Pazos, N., Bravo, J., Graña, A. M. & García-Fontán, S. Allenylidene and diazoalkane complexes of a half-sandwich mixed phosphine – phosphinite ruthenium fragment *Inorg. Chim. Acta* (2021) doi:10.1016/j.ica.2011.1240277.
45. **CL:** Mosquera, R. A., Graña, A. M. Properties and transferability in molecules containing carbonyl compounds. *Recent Res. Dev. Chem. Physics, Vol 2, 23-36* (2001).
46. **CL:** Mandado, M., Mosquera, R. A., Graña, A. M. AIM study of n-alkanols. *Recent Res. Dev. Chem. Physics, Vol 3, Pt 1 3, 149–164* (2002).
47. **CL:** Mosquera, R. A., González-Moa, M. J., Graña, A. M., Mandado, M., Vila, A. Exploring basic chemical concepts with the Quantum Theory of Atoms in Molecules (QTAIM). *Horizons in World Physics, Vol 252, 165-213* (2007).
48. **CL:** Mosquera, R. A., González Moa, M. J., Estévez, L., Mandado, M. & Graña, A. M. *An Electron Density-Based Approach to the Origin of Stacking Interactions. Quantum Biochemistry* (2010). doi:10.1002/9783527629213.ch11.

## **2.7 Proyectos de investigación subvencionados**

1. **Título:** Transferencia protónica intramolecular. Análisis estructural desde los puntos de vista estático y dinámico.

Entidad financiadora: DGICYT.

Periodo: 1995-1997.

Investigador principal: Miguel Ángel Ríos Fernández.

2. **Título:** Estudio teórico de las reacciones químicas esenciales en la producción de moléculas complejas en medios de interés astrofísico: química del azufre.

Entidad financiadora: DGICyT PB98-1085.

Financiación: 26925 €.

Periodo: 30/12/99-30/12/2001.

Investigador principal: Jesús Ramón Flores Rodríguez.

Número de investigadores participantes: 6.

2. **Título:** Estudio teórico de los cumulenos de interés astrofísico: estructura y espectros electrónicos y dinámica de las reacciones de formación.

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología BFM2001-3303.

Financiación: 34558 €.

Periodo: 28/12/2001-22/05/2005.

Investigador principal: Jesús Ramón Flores Rodríguez.

Número de investigadores participantes: 6.

3. **Título:** Insuficiencia del modelo de resonancia para la explicación de procesos químicos básicos.

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología CTQ2006-15500.

Financiación: 54450 €.

Periodo: 01/10/2006-30/09/2009.

Investigador principal: Ricardo Antonio Mosquera Castro.

Número de investigadores participantes: 9.

4. **Título:** Estudio computacional de complejos antocianina-copigmento: Estructura molecular y electrónica y actividad antioxidante.

Entidad financiadora: Ministerio de educación e ciencia CTQ2010-21500.

Financiación: 73810 €.

Periodo: 01/01/2011-31/12/2013.

Investigador principal: Ricardo Antonio Mosquera Castro.

5. **Título:** Radiofármacos basado en complejos metálicos para la obtención de imágenes del receptor de estrógeno y acumulaciones de betaamiloide.

Entidad financiadora: Ministerio de economía y competitividad CTQ2015-70901-R.

Financiación: 89540 €.

Periodo: 01/01/2016-30/09/2019.

Investigador principal: Ezequiel Manuel Vázquez López.

6. **Título:** Estudio teórico de la reacciones químicas esenciales en la producción de moléculas complejas en medios de interés astrofísico: Química del azufre.

Entidad financiadora: Xunta de Galicia (PGIDT99PXI30102B).

Financiación: 516287€.

Periodo: 26/08/1999-25/08/2001.

Investigador principal: Jesús Ramón Flores Rodríguez.

Número de investigadores participantes: 6.

7. **Título:** Estudio teórico de la reacciones químicas esenciales en la producción de moléculas complejas en medios de interés astrofísico: Química del azufre.

Entidad financiadora: Xunta de Galicia (PGIDT00PXI30104PN).

Financiación: 5974 €.

Periodo: 26/08/2000-25/08/2002.

Investigador principal: Jesús Ramón Flores Rodríguez.

Número de investigadores participantes: 6.

8. **Título:** Estudio teórico de las reacciones químicas generadoras de moléculas complejas en el medio interestelar.

Entidad financiadora: Xunta de Galicia (PGIDT05PXIB31402PR).

Financiación: 41800 €.

Periodo: 14/07/2005-13/07/2008.

Investigador principal: Jesús Ramón Flores Rodríguez.

Número de investigadores participantes: 7.

9. **Título:** Estudio teórico de la estructura y procesos de formación de heterocumulenos en medios de interés astrofísico.

Entidad financiadora: Xunta de Galicia (PGIDT01PXI30108PR).

Financiación: 20975 €.

Periodo: 01/01/2001 - 31/12/2003.

Investigador principal: Ricardo Antonio Mosquera Castro.

10. **Título:** Estudio teórico de la estructura y procesos de formación de moléculas complejas de interés astrofísico.

Entidad financiadora: Xunta de Galicia (PGIDT02PXC30107PN).

Financiación: 15551 €.

Periodo: 01/01/2002 - 31/12/2005.

Investigador principal: Ricardo Antonio Mosquera Castro.

11. **Título:** Diseño estructural de pinzas moleculares.

Entidad financiadora: Xunta de Galicia (PGIDT06TMT31401PR).

Financiación: 60973 €.

Periodo: 24/11/2006 - 23/11/2009.

Investigador principal: Carlos Manuel Estévez Valcárcel.

12. **Título:** Diseño de circuitos eléctricos unimoleculares.

Entidad financiadora: Xunta de Galicia (10TMT314014PR).

Financiación: 48358 €.

Periodo: 01/08/2010 - 01/10/2013.

Investigador principal: Marcos Mandado Alonso.

13. **Título:** Contratos programa con grupos de investigación de referencia.



Entidad financiadora: Xunta de Galicia (C217122F64102).

Financiación: 48000 €.

Periodo: 23/07/2002 - 01/08/2005.

Investigador principal: Luis Carballeira Ocaña.

14. **Título:** Efecto anómérico: reinterpretación con la teoría cuántica de átomos en moléculas y otros medios de análisis de la densidad electrónica.

Entidad financiadora: Xunta de Galicia (INCITE08PXIB314224PR).

Financiación: 46126 €.

Periodo: 01/01/2008 - 31/10/2011.

Investigador principal: Ricardo Antonio Mosquera Castro.

15. **Título:** Consolidación y estructuración de unidades de investigación competitivas- Nueva adjudicación.

Entidad financiadora: Xunta de Galicia (INCITE08ENA314104ES).

Financiación: 28000 €.

Periodo: 01/01/2008 - 31/10/2008.

Investigador principal: Ricardo Antonio Mosquera Castro.

16. **Título:** Consolidación y estructuración de unidades de investigación competitivas- Renovación.

Entidad financiadora: Xunta de Galicia (INCITE09E1R314091ES).

Financiación: 25200 €.

Periodo: 01/01/2009 - 16/12/2009.

Investigador principal: Ricardo Antonio Mosquera Castro.

17. **Título:** Consolidación y estructuración de unidades de investigación competitivas.

Entidad financiadora: Xunta de Galicia (IN845B-2010/036).

Financiación: 17640 €.

Periodo: 01/01/2010 - 21/12/2010.

Investigador principal: Ricardo Antonio Mosquera Castro.

18. **Título:** Ayudas para la consolidación y estructuración de Grupos de Referencia Competitiva.

Entidad financiadora: Xunta de Galicia (GRC2015/017).

Financiación: 198000 €.

Periodo: 01/01/2015 - 30/11/2018.

Investigador principal: Ricardo Antonio Mosquera Castro.

19. **Título:** Ayudas para la consolidación y estructuración de Grupos de Referencia Competitiva.

Entidad financiadora: Xunta de Galicia (ED431C2019/24).

Financiación: 190000 €.

Periodo: 01/01/2019 - 31/12/2022.

Investigador principal: Ana María Graña Rodríguez.

20. **Título:** Contrato-programa con grupos de referencia.

Entidad financiadora: Universidade de Vigo (05VI-1A03).

Financiación: 49500 €.

Periodo: 19/07/2005 - 31/12/2008.

Investigador principal: Ana María Graña Rodríguez.

21. **Título:** Contrato-programa con grupos de referencia.

Entidad financiadora: Universidade de Vigo (08VIA11).

Financiación: 49500 €.

Periodo: 01/11/2005 - 31/12/2008.

Investigador principal: Ricardo Antonio Mosquera Castro.

22. **Título:** Contrato-programa con grupos de investigación.

Entidad financiadora: Universidade de Vigo (12VI17).

Financiación: 49500 €.

Periodo: 01/01/2013 - 31/12/2013.

Investigador principal: Ricardo Antonio Mosquera Castro.

## **2.7 Comunicaciones y ponencias presentadas a congresos**

1. A.M. Graña, M.A. Ríos, J. Rodríguez-Otero. Tautomería ceto-enólica en 7-hidroxi-1-indanona. Estudio mecanocuántico. 11º Encontro Anual da Sociedade Portuguesa de Química. Lisboa. 1988. Comunicación Oral.
2. C. M. Estévez, A.M. Graña, M.A. Ríos, J. Rodríguez. Estudio ab initio de la estructura del ácido salicílico. 23 Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química. Salamanca. 1990. Póster.
3. C. M. Estévez, A.M. Graña, M.A. Ríos, J. Rodríguez. Análisis estructural ab initio de las furanocumarinas lineales psoralen y pseudopsoralen y las pirrolocumarinas análogas. 23 Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química. Salamanca. 1990. Póster.
4. C. M. Estévez, A.M. Graña, M.A. Ríos, J. Rodríguez. Análisis estructural ab initio de las furanocumarinas angulares. 23 Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química. Salamanca. 1990. Póster.
5. Ana M. Graña, C. M. Estévez, Antonio Pereiras, M.A. Ríos y J. Rodríguez. Estudio conformacional AM1 de timidina, 3'-azido-3'-desoxitimidina (AZT) y 3'-Fluor-3'-desoxitimidina. 12º Encontro Anual da Sociedade Portuguesa de Química. Coimbra. 1991. Póster.
6. C. M. Estévez, Ana M. Graña y M.A. Ríos. Estudio AM1 de las barreras de rotación del 8-metoxipsoraleno, 5-metoxipsoraleno y 5,8-dimetoxipsoraleno. 12º Encontro Anual da Sociedade Portuguesa de Química. Coimbra. 1991. Póster.
7. Jesús Rodríguez, Ana M. Graña, Antonio Pereiras y M.A. Ríos. Estudio ab initio de algunos didesoxinucleósidos 2',3'-insaturados inhibidores del HIV (AIDS). 12º Encontro Anual da Sociedade Portuguesa de Química. Coimbra. 1991. Póster.
8. Ana M. Graña, C. M. Estévez, M.A. Ríos y J. Rodríguez. Estudio AM1 de la estructura de citidina y varios 3'-derivados. 13º Encontro Anual da Sociedade Portuguesa de Química. Lisboa. 1992. Póster.

9. J. Rodríguez, C. M. Estévez, Ana M. Graña y M.A. Ríos. Estudio MNDO-PM3 de compuestos con enlace de hidrógeno intramolecular. 13º Encontro Anual da Sociedade Portuguesa de Química. Lisboa. 1992. Póster.
10. C. M. Estévez, Ana M. Graña, M.A. Ríos y J. Rodríguez. Estudio semiempírico AM1 del angelicín y varios metilangelicinos. 13º Encontro Anual da Sociedade Portuguesa de Química. Lisboa. 1992. Póster.
11. Ana M. Graña, C. M. Estévez, M.A. Ríos y J. Rodríguez. MEP calculations in thymidine derivatives. 1º Encontro de Química Física. Soc. Portuguesa de Química. Lisboa. 1993. Póster.
12. J. Rodríguez, C. M. Estévez, Ana M. Graña y M.A. Ríos. Semiempirical calculations of systems containing intramolecular hydrogen bonds O-H---O. Further verification of a modified MNDO method. 1º Encontro de Química Física. Soc. Portuguesa de Química. Lisboa. 1993. Póster.
13. C. M. Estévez, Ana M. Graña, J. Rodríguez y M.A. Ríos. A semiempirical AM1 study of the electronic structure of various linear and angular furocoumarins. 1º Encontro de Química Física. Soc. Portuguesa de Química. Lisboa. 1993. Póster.
14. C. M. Estévez, Ana M. Graña, M.A. Ríos y J. Rodríguez. Estudio ab initio de la estructura y tautomería de carbonilos aromáticos con enlace de hidrógeno intramolecular. XIX CICTPEL. Roma. 1990. Póster.
15. C. M. Estévez, Ana M. Graña, M.A. Ríos y J. Rodríguez. Estudio ab initio del efecto de la sustitución en el enlace de hidrógeno intramolecular del malonaldehído. XIX CICTPEL. Roma. 1990. Póster.
16. A.J. Pereiras, Ana M. Graña, M.A. Ríos y L. Vázquez. Semiempirical and ab initio calculations on beta-D-amino-2,3-didehydro-1,2,3-trideoxyribofuranose. 24 Annual Quantum Theory Conference .Guernsey (UK). 1991. Póster.
17. C.M. Estévez, A.M. Graña, M.A. Ríos, J. Rodríguez. Ab initio study of the molecular structure of 5- and 8-metoxipsoralen. VIIth International Congress on Quantum Chemistry. Menton (France). 1991. Póster.

18. C.M. Estévez, A.M. Graña, M.A. Ríos, J. Rodríguez. Structure of hydrogen maleate and hydrogen phthalate anions by ab initio calculations. VIIth International Congress on Quantum Chemistry. Menton (France). 1991. Póster.
19. C.M. Estévez, A.M. Graña, M.A. Ríos, J. Rodríguez. Semiempirical and ab initio calculations of the molecular structure of thymidine. VIIth International Congress on Quantum Chemistry. Menton (France). 1991. Póster.
20. M. Head-Gordon, A.M. Graña, D. Maurice, M. Oumi, C.A. White. Analysis of electronic transitions as the difference between electron attachment and detachment densities. *Molecular Quantum Mechanics: methods and Applications*. Cambridge (UK). 1995. Comunicación oral.
21. A.M. Graña. Estudio da tautomerización de 7-azaindol nos estado fundamental e excitado. XXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Cáceres. 1996. Póster.
22. R. A. Mosquera, A.M. Graña. Evolución das propiedades atómicas en sistemas carbonílicos II. Sistemas liñais e cíclicos de catro membros. XXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Cáceres. 1996. Póster.
23. A.M. Graña, R. A. Mosquera. Effect of protonation on the atomic and bond properties of the carbonyl group in aldehydes and ketones. Electronic computational chemistry conference. Red internet. Univ. Northern Illinois University. 1998. Póster.
24. A.M. Graña, R. A. Mosquera. Effect of protonation on the atomic and bond properties of the carbonyl group in aldehydes and ketones. Electronic computational chemistry conference. Red internet. Univ. Northern Illinois University. 1998. Póster.
25. R. R. de Melo Moreno, Y. Ibáñez, A.M. Graña, R.A. Mosquera. Evolution of the atomic and bond properties of hydrogen peroxide during internal rotation. Electronic computational chemistry conference. Red internet. Univ. Northern Illinois University. 1998. Póster.
26. J.L. López, M. Mandado, A. M. Graña, R.A. Mosquera. Approximate transferability in alkanenitriles. International Conference on Electronic Structure: Principles and Applications. Donostia. 2000. Póster.

27. M. Mandado, A.M. Graña, A. Vila, M.J. González-Moa. AIM study of n-alkanols. Electronic Structure and Chemical Reactivity. Barcelona. 2001. Póster.
28. A.M. Graña, M.J. González-Moa, J.-L. López, A. Vila. A topological electron density study on médium size thiocumulenones. Electronic Structure and Chemical Reactivity. Barcelona. 2001. Póster.
29. M. Mandado, M.J. González Moa, A.M. Graña, R.A. Mosquera. An electron charge density on polyfunctionalised phenols. ESPA2002. Sevilla. 2002. Póster.
30. M.J. González Moa, M. Mandado, A. Vila, J.M. Hermida-Ramón, A.M. Graña, R.A. Mosquera. Aplicabilidad de las formas resonantes en el estudio de compuestos pirimidínicos. XIII Congreso Nacional Sociedad Española de Química Terapéutica. Santiago de Compostela. 2003. Póster.
31. M. Mandado, A.M. Graña, R.A. Mosquera. Do 1,2-ethanediol and 1,2-dihydroxybenzene present intramolecular hydrogen bond? ESPA 2004. Valladolid. 2004. Póster.
32. M. Mandado, A.M. Graña, R.A. Mosquera. Charge density análisis of some processes with intramolecular hydrogen transfer. ESPA 2004. Valladolid. 2004. Póster.
33. A.M. Graña, M. Mandado, K. Tersago, F. Blockhuys and C. Van Alsenoy. Insight into the conformational stability of Z configurations in sulphurimides and thioylimides: A topological and multicenter analysis. ESPA 2006. Santiago de Compostela. 2006. Póster.
34. A.M. Graña. On the electronic origin of strain energy:qtain study of perfluoroalkanes. ESPA 2006. Santiago de Compostela. 2006. Póster.
35. R. A. Mosquera, A. Vila, A.M. Graña. On the Shortcomings of the Stereoelectronic Interpretation of the Anomeric Effect. XIX IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry. Santiago de Compostela. 2008. Póster.
36. J.L. López, R. A. Mosquera, A.M. Graña. Electron density analysis on the protonation of nitriles. XIX IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry. Santiago de Compostela. 2008. Póster.
37. L. Pita, A.M. Graña, R.A. Mosquera. Topological electron density analysis on activating and deactivating effects in pyridine rings. XIX IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry. Santiago de Compostela. 2008. Póster.

38. L. Estévez, N. Otero, A. M. Graña, R. A. Mosquera. Structural Trends in Anthocyanidins. ESPA 2008. Palma de Mallorca. 2008. Póster.
39. L. Estévez, N. Otero, A. M. Graña, R. A. Mosquera. QTAIM analysis on the genesis of the anomeric effect involving sulfur and phosphorus. ESPA 2008. Palma de Mallorca. 2008. Póster.
40. Laura Estévez, Nicolás Otero, Luisa Pita and Ana M. Graña. Electron density analysis of catechol complexes. IBER 2009. Santiago de Compostela. 2009. Póster.
41. Antonio Vila, Keiamars Eskandari, Ana M. Graña and Ricardo A. Mosquera. QTAIM analysis of the anomeric effect in aminomethanol and 2-aminotetrahydropyran. IBER 2009. Santiago de Compostela. 2009. Póster.
42. Jonathan De Roo, Ricardo A. Mosquera<sup>2</sup>, Ana M. Graña, Patrick Bultinck, Nicolás Otero. QTAIM study of the reversed anomeric effect . ESPA 2010. Oviedo. 2010. Póster.
43. Isidro Lorenzo, Nicolás Otero-Martínez, Laura Estévez and Ana M. Graña. Stacking interactions between thymine and gallic acid. Zing Congress Nucleic Acids. México. 2010. Póster.
44. A.M. Graña, L. Estévez, N. Otero, R.A. Mosquera. Electron density analysis of methane···benzene complex by means of qtaim. Comparing CCSD, M05-2X and MPW1B95 approaches. Ninth triennial congress of the world association of theoretical and computational chemists WATOC 2011. Santiago de Compostela. 2011. Póster.
45. Isidro Lorenzo, Nicolás Otero, Laura Estévez And Ana Graña. Factors of stabilization of dimers of gallic acid with thymine and adenine. Ninth triennial congress of the world association of theoretical and computational chemists WATOC 2011. Santiago de Compostela. 2011. Póster.

## **2.8 Cursos y seminarios**

### **2.8.1 Cursos de formación impartidos**

1. Relatora en el curso: VII Jornadas de comunicación entre la Universidad de Vigo y los centros de enseñanza de Galicia. Organizado por la Universidad de Vigo. Duración: 25 h. 25-26/4/2006.
2. Relatora en el curso: VIII Jornadas de comunicación entre la Universidad de Vigo y los

centros de enseñanza no universitaria de Galicia. Organizado por la Universidad de Vigo.

Duración: 22 h. 8-9/3/2007.

3. Colaboradora en la organización de las 7<sup>as</sup> Jornadas Universitarias de empleo Galicia-Norte de Portugal. Organizadas por la Universidad de Vigo. Duración: 30 horas. 18-19/2/2008.

### **2.8.2 Cursos de formación docente recibidos**

1. Jornada de formación para el EEES organizada por ACSUG. Duración: 5h. 10/12/ 2004.
2. La evaluación en la Enseñanza universitaria. Organizado por la Universidad de Vigo. Duración : 12h. 19-21/4/2005.
3. Innovación educativa en clave de convergencia europea: experiencias piloto en la Universidad de Valencia”. Organizado por la Facultad de Química de la Universidad de Vigo. Duración : 8h. 2-3/3/2006.
4. Internacionalización y cooperación en las titulaciones en el EEES. Organizado por la Universidad de Vigo. Duración : 6h. 4/7/2007.
5. Jornada de formación “Evaluación en el EEES”. Duración: 8h. 31/01/2007.
6. La planificación docente en el marcos del EEES: del proyecto formativo de la titulación al diseño de las guías docentes de las materias. Organizado por la Universidad de Vigo. Duración : 10h. 30-31/1/2008.
7. Jornada “Reconocimiento y transferencia de créditos en las titulaciones adaptadas al EEES”. Organizado por la Universidad de Vigo. 27/1/2009.
8. XIV Foro de Almagro: La acreditación nacional e internacional de los estudios oficiales. Organizado por la Universidad de Castilla-La Mancha. 12 horas. 20-21-11-2014.
9. Xornada programa Acredita Plus. Organizada por ACSUG. 4h. 11/12/2014.

### **2.9 Becas (posteriores a la licenciatura)**

1. **Beca de Tercer Ciclo** de la Xunta de Galicia de Octubre de 1988 a Septiembre de 1990.
2. **Beca Predoctoral** de la Xunta de Galicia de Octubre de 1990 a Marzo de 1993.



3. **Beca de movilidad “Bolsas para estadias en centros de investigación de fóra de Galicia”**. Conselleria de Educación e Ordenación Universitaria. Xunta de Galicia. 1993.

## **2.10. Otros méritos docentes o de investigación**

### **2.10.1 Participación en proyectos de innovación docente**

1. Proyecto piloto de adaptación al EEES en la Universidade de Vigo.

### **2.10.2 Participación, como ponente, en congresos orientados a la formación docente universitaria**

1. Besada Morais *et al.* *plan Piloto de adptación al EEES de la titulación de Química en la Universidad de Vigo*. I Reunión de Innovación Docente en Química, INDOQUIM 2006, Granada. Comunicación oral.
2. Graña, Ana M. *Guía docente de la asignatura Química Física II* II Reunión de Innovación Docente en Química, INDOQUIM 2007, Vigo. Póster.
3. Graña, Ana M.; Carballo, R.; Rodríguez-Seoane, P. *Iniciativas para el acercamiento a estudiantes de secundaria desde la Facultad de Química*. II Reunión de Innovación Docente en Química, INDOQUIM 2008, Cádiz. Póster.
4. Graña, Ana M.; Pérez-Juste, I; Mosquera, R.A. *Utilización de la entrevista personal como un elemento de evaluación de las enseñanzas de laboratorio*. II Reunión de Innovación Docente en Química, INDOQUIM 2008, Cádiz. Comunicación oral.
5. Ana M. Graña, Jose M. Hermida-Ramón, M. Mandado, R. A. Mosquera and A. Peña-Gallego. *Using “Flipped Classroom“ strategies to teach undergraduate courses of Quantum Chemistry. Application to a modified Hückel method including a partial overlap*. Edulearn 2020. Palma, 2020. Comunicación virtual.
6. Sonia Losada-Barreiro, Carlos Bravo-Díaz, Ángeles Peña-Gallego, Ricardo A. Mosquera, Ana M. Graña. *A visual thinking, evidence-based, kinetic laboratory experiment: determining the rate law for the bleaching of crystal violet dye by hydroxide ions*. Edulearn 2020. Palma, 2020. Comunicación virtual.

### **2.10.3. Elaboración de material docente**

Elaboración de material docente para diversas asignaturas en el campus virtual de la Universidade de Vigo.

#### **2.10.4 Resultado de la evaluación docente**

1. Encuestas de evaluación docente realizadas por los alumnos. Desde el curso 1995/96 hasta 2018/19. Promedio 4.0/5.
2. Valoración de la Actividad Docente del Profesorado (VAD). Cursos 2004-05 hasta 2013-14.
3. Docencia (evaluación Anual): de los curso 2014-15, 2015-16 y 2016-17: Farovable

#### **2.10.5 Estancias en centros de reconocido prestigio internacional**

1. **Centro:** Department of Chemistry. University of California at Berkeley.

Localidad: Berkeley.

País: Italia

Año: Febrero 94- Agosto 94.

Duración: 6 meses.

#### **2.10.6. Participación en el comité organizador y científico de Congresos**

1. Participación en el Comité Organizador de II Reunión de Innovación Docente en Química, INDOQUIM 2007. Vigo, 2007.
2. Participación en el Comité Organizador del 1st International Vigo Meeting on Advanced Computational Chemistry (IViMACC). Vigo, 2017.
3. Participación en el Comité Organizador del 2nd International Vigo Meeting on Advanced Computational Chemistry (IViMACC). Vigo, 2019.
4. Participación en el Comité Organizador del 12<sup>th</sup> Congress on Electronic Structure Principles and Applications (ESPA 2020). Pospuesto a Junio 2021 debido al estado de alarma por COVID19.
5. Participación en el Comité Científico del 12<sup>th</sup> Congress on Electronic Structure Principles and Applications (ESPA 2020). Pospuesto a Junio 2021 debido al estado de alarma por COVID19.

### **2.11 Cargos de gestión desempeñados**

1. Secretaria del departamento de Química Física de la Universidad de Vigo durante el curso 2001/2002.
2. Secretaria de la Facultad de Química de la Universidad de Vigo desde Noviembre de 2004 hasta noviembre de 2007.
3. Vicedecana de la Facultad de Química desde Noviembre de 2007 hasta Julio de 2010.
4. Comisionada para coordinación interna (categoría de vicerrectora) desde Julio de 2010 hasta el 28 de abril de 2014.
5. Vicerrectora de organización académica y profesorado desde el 29 de abril de 2014 hasta el 7 de junio de 2018.
6. Miembro del Claustro Universitario de la universidad de Vigo desde Julio de 2006 hasta el 7 de junio de 2018.
7. Miembro del Consejo de Gobierno de la universidad de Vigo desde Julio de 2006 hasta el 7 de junio de 2018.
8. Secretaria del departamento de Química Física de la Universidad de Vigo desde el 30 de octubre de 2019 hasta el momento actual.

### **2.12 Otros méritos**

1. Participación en el Forum Orienta organizado por la Facultad de Química. Universidade de Vigo 8-13 de Abril de 2008. Vigo.
2. Coordinadora en el proceso de planificación y realización de encuestas de evaluación docente. Facultad de Química. Facultad de Química. Universidad de Vigo. Curso: 04/05 a 09/10.
3. Miembro de la Comisión de calidad de la Facultad de Química de la Universidad de Vigo desde el curso 05/06 hasta el curso 09/10.

4. Coordinadora Sócrates-Erasmus de la Facultad de Química de la Universidad de Vigo desde Enero de 2005 hasta Julio de 2010 (responsabilidad no asociada a otros cargos).
5. Tutora del Convenio Erasmus con el Departamento de Química de la Universidad de Gante desde 2005 hasta la actualidad.
6. Coordinadora SICUE de la Facultad de Química de la Universidad de Vigo desde Enero de 2005 hasta Julio de 2010 (responsabilidad no asociada a otros cargos).
7. Coordinadora de tercer curso de la Licenciatura en Química de la Universidad de Vigo desde el curso 07/08 hasta el curso 09/10.
8. Miembro del tribunal de concesión premios extraordinarios de doctorado 2010/11 Universidad de Vigo.
9. Tutora del Plan de Acción Tutorial (PAT). Grado en Ciencias del Mar. Universidad de Vigo. Cursos: 2018/19 hasta actualidad.
10. Revisora de manuscritos para las siguientes revistas científicas: J. Comput.Chem., Chem. Phys.Lett., Journal of Chemical Theory and Computation, J. Mol. Model., J. Phys. Chem.
11. Participante en el Grupo de Trabajo que elaboró la "Estrategia de recursos humanos para el personal investigador" (The Human Resources Strategy for Researchers - HRS4R) de la Universidad de Vigo, que fue sometida a evaluación por EURAXESS en noviembre de 2016 y que resultó en la obtención del sello "HR Excellence in research" por la Universidad de Vigo con fecha 31 de maio de 2017.

### **19. Diligencia de refrendo del currículum**

La abajo firmante se responsabiliza de la veracidad de los datos en el presente curriculum, comprometiéndose a aportar, en su caso, las pruebas documentales que le sean requeridas.

Vigo, a 22 de abril de 2021.

Ana M. Graña