

Present positions

- Full professor, Chemistry Institute, University of Antioquia.
- Head, Theoretical Chemical Physics Group θ - ϕ τ .

Education

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

Peer-reviewed publications

1. Andy Zapata, Juliana Murillo, Cacier Hadad, Albeiro Restrepo. **Understanding the nature of bonding interactions in the carbonic acid dimers.** *J. Mol. Mod.* **2019**. Accepted.
2. Sara Gómez, Yanal Oueis, Albeiro Restrepo, Adam Wasserman. **Partition potential for hydrogen bonding in formic acid dimers.** *Int. J. Quantum. Chem.* **2018**, e25814.
3. Natalia Rojas-Valencia, Isaias Lans, Marcela Manrique-Moreno, Cacier Hadad, Albeiro Restrepo. **Entropy drives the insertion of Ibuprofen into model cell membranes.** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2018**, *20*, 24869.
4. Cacier Hadad, Elizabeth Flórez, Nancy Acelas, Gabriel Merino, Albeiro Restrepo. **Microsolvation of small cations and anions.** *Intl. J. Quantum Chem.* **2018**, *119*, e25766.
5. Juan Carlos Coa, Wilson Cardona, Albeiro Restrepo. **Fe³⁺ Chelating in Quinoline-hydrazone hybrids with proven cytotoxicity, leishmanicidal, and trypanocidal activities.** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2018**, *20*, 20382.
6. Estefanía Diaz, Albeiro Restrepo, Francisco Núñez. **Reactivity of a silica-supported Mo alkylidene catalyst toward alkanes: A DFT study on the metathesis of propane.** *Organometallics.* **2018**, *37*, 2023.
7. Elizabeth Florez, Nancy Acelas, Frank Ramírez, Cacier Hadad, Albeiro Restrepo. **Microsolvation of F⁻.** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2018**, *20*, 8909.
8. 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.
9. Norberto Moreno, Cacier Hadad, Albeiro Restrepo. **Exotic species with explicit Noble metal – Noble gas – Noble metal linkages.** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2018**, *20*, 5036.
10. 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.
11. 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.
12. Fernando Murillo, Alba Vargas-Caamal, Jose Luis Cabellos, Sudip Pan, Miguel Mora-Fonz, Alvaro Muñoz, Albeiro Restrepo, Gabriel Merino. **Does H₄SO₅ exist?** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, *19*, 17088.
13. Nancy Acelas, Cacier Hadad, Albeiro Restrepo, César Ibargüen, Elizabeth Flórez. **Adsorption of nitrate and bicarbonate on Fe(hydr)oxide.** *Inorg. Chem.* **2017**, *56*, 5455.
14. Sara Gómez, Jonathan Nafziger, Albeiro Restrepo, Adam Wasserman. **Partition-DFT on the water dimer.** *J. Chem. Phys.* **2017**, *146*, 074106.
15. Juan Ramón Salazar, Alfredo Guevara, Rubicelia Vargas, Albeiro Restrepo, Jorge Garza. **Hydrogen bonds in methane-water clusters.** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, *18*, 23508.

16. 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.
17. Elizabeth Flórez, Nancy Acelas, César Ibargüen, Sukanta Mondal, Jose Luis Cabellos, Gabriel Merino, Albeiro Restrepo. **Microsolvation of NO₃⁻: structural exploration and bonding analysis.** *RSC Advances*, **2016**, *6*, 71913.
18. Carolina Giraldo, Sara Gómez, Frank Weinhold, Albeiro Restrepo. **Insight into the mechanism of the Michael reaction.** *ChemPhysChem.* **2016**, *17*, 2022.
19. 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.
20. 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.
21. 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 [E–(C_nH_n)–E]^(n–6) (E = Ca, Sr, Ba and n = 6 – 8) complexes.** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, *18*, 11909.
22. 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.
23. 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.
24. Edison Flórez, Alejandro Maldonado, Gustavo Aucar, Jorge David, Albeiro Restrepo. **Microsolvation of Methylmercury: Structures, Energies, Bonding and NMR Constants (¹⁹⁹Hg, ¹³C and ¹⁷O).** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, *18*, 1537.
25. 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.
26. 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.
27. Natalia Rojas, César Ibargüen, Albeiro Restrepo. **Molecular interactions in the microsolvation of dimethylphosphate.** *Chem. Phys. Lett.* **2015**, *635*, 301.
28. Mutlay, I.; Restrepo, A. **Complex reaction networks in high temperature hydrocarbon chemistry.** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, *17*, 7972.
29. Cui, Z.; Ding, Y.; Cabellos, J.; Osorio, E.; Islas, R.; Restrepo, A. Merino, G. **Planar tetracoordinate carbons with a double bond in CAI₃E clusters.** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, *17*, 8769.

30. 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.
31. Grande–Aztatzi, 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.
32. 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.
33. Andrea Echeverri, Norberto Moreno, Albeiro Restrepo, Cacier Hadad. **Exotic noble gas cabene–like ions.** *Chem. Phys. Lett.* **2014**, *615*, 16.
34. 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.
35. 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.
36. Doris Guerra, Jorge David, Albeiro Restrepo. **Hydrogen bonding in the binary water/ammonia complex.** *J. Comput. Meth. Sci. Eng.* **2014**, *14*, 93–102.
37. 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.
38. Wilson Cardona, Doris Guerra, Albeiro Restrepo. **Reactivity of δ –substituted α, β –unsaturated cyclic lactones with antileishmanial activity.** *Mol. Simulat.* **2014**, *40*(6), 477.
39. Nancy Acelas, Gina Hincapié, Doris Guerra, Jorge David, Albeiro Restrepo. **Structures, energies and bonding in the water heptamer.** *J. Chem. Phys.* **2013**, *139*, 044310.
40. Cacier Hadad, Albeiro Restrepo, Samantha Jenkins, Frank Ramírez, Jorge David. **Hydrophobic meddling in small water clusters.** *Theor. Chem. Acc.* **2013**, *132*, 1376.
41. 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.
42. 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.
43. 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.
44. 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.
45. 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.

46. Diana Yepes, Steven Kirk, Samantha Jenkins, Albeiro Restrepo. **Structures, Energies and Bonding in Neutral and Charged Li Microclusters.** *J. Mol. Model.* **2012**, *18*, 4171.
47. 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.
48. Jorge David, Doris Guerra, Albeiro Restrepo. **Structures, Stability and Bonding in $^1\text{Au}_{10}$ clusters.** *Chem. Phys. Lett.* **2012**, *539–540*, 64.
49. Jonathan Romero, Andres Reyes, Jorge David, Albeiro Restrepo. **Understanding Microsolvation of Li^+ : Structural and Energetical Analyses.** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2011**, *13*, 15264.
50. 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.
51. Frank Ramírez, Cacier Hadad, Doris Guerra, Jorge David, Albeiro Restrepo. **Structural Studies of the Water Pentamer.** *Chem. Phys. Lett.* **2011**, *507*, 229.
52. Andrea Perez, Jorge David, Patricio Fuentealba, Albeiro Restrepo. **Octahedral Complexes of the Series of Actinides Hexafluorides AnF_6 .** *Chem. Phys. Lett.* **2011**, *507*, 57.
53. 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.
54. Juan David Ripoll, Andrei Serna, Doris Guerra, Albeiro Restrepo. **Electronic Structure Calculations on Helical Conducting Polymers.** *J. Phys. Chem. A.* **2010**, *114*, 10917.
55. 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.
56. Juliana Murillo, Jorge David, Albeiro Restrepo. **Insights into the Structure and Stability of the Carbonic Acid Dimer.** *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2010**, *12*, 10963.
57. Gina Hincapié, Nancy Acelas, Marcela Castaño, Jorge David, Albeiro Restrepo. **Structural Studies of the Water Hexamer.** *J. Phys. Chem. A.* **2010**, *114*, 7809.
58. 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.
59. Albeiro Restrepo, Gary Bent, Harvey Michels. **Solution Theory Model for Refrigerant/Lubricant Mixtures.** *AIChE Journal.* **2009**, *55(12)*, 3241–3247.
60. Jorge David, Doris Guerra, Albeiro Restrepo. **Structural Characterization of the (Methanol) $_4$ Potential Energy Surface.** *J. Phys. Chem. A.* **2009**, *113*, 10167.
61. 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.
62. Cinthia Jaramillo, Luis F. Moreno, Albeiro Restrepo. **Proton Affinities and Protonation Sites in p–Nitroaniline.** *Rev. Col. Quím.* **2009**, *38*, 149.

63. 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.
64. 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.
65. Jorge David, Patricio Fuentealba, Albeiro Restrepo. **Relativistic Effects on the Hexafluorides of Group 10 Metals.** *Chem. Phys. Lett.* **2008**, *457*, 42.
66. Jhon F. Pérez, Cacier Hadad, Albeiro Restrepo. **Structural Studies of the Water Tetramer.** *Intl. J. Quantum Chem.* **2008**, *108*, 1653.
67. 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.
68. Sol M. Mejía, Juan F. Espinal, Albeiro Restrepo, Fanor Mondragón. **Molecular Interactions of (Ethanol)₂-Water Heterotrimers.** *J. Phys. Chem. A.* **2007**, *111*, 8250.
69. Albeiro Restrepo and Robert Bohn. **Alkyl Chains With CN and CCH Substituents Prefer Gauche Conformations.** *J. Mol. Struct.* **2007**, *833*, 189.
70. Karissa Utzat, Albeiro Restrepo, Robert Bohn, Harvey Michels. **Conformational Studies of Benzyl Alcohol and Benzyl Fluoride.** *Intl. J. of Quantum Chem.* **2004**, *100*, 964.
71. 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.
72. 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.
73. 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.
74. Albeiro Restrepo, Herminsul 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.
75. 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.
76. Albeiro Restrepo, Carlos Gonzalez, Frank Mari, Manuel Marquez. **Optimizadores Moleculares.** *Quimica: Actualidad y Futuro.* **1995**, *5*, 101.

1. Mesías Orozco–Ic, Albeiro Restrepo, Alvaro Muñoz–Castro, Gabriel Merino. **Molecular Helmholtz Coils.**
2. Yuly Chamorro, Alejandro Maldonado, Edison Flórez, Gustavo Aucar, Albeiro Restrepo. **Relativistic and correlation effects on the geometries, dipole moments, and NMR parameters in metal halides**
3. Sandra Llano, Sara Gomez, Julián Londoño, Albeiro Restrepo. **Antioxidant activity in curcuminoids.**
4. Alba Vargas–Caamal, Eugenia Dzib, Filiberto Ortiz–Chi, Albeiro Restrepo, Gabriel Merino. **Acid dissociation in $(HX)_n (H_2O)_n$ clusters ($X=F, Cl, Br, I; n = 2, 3$)**
5. Paola Farfán, Sara Gómez, Albeiro Restrepo. **On the origins of stereoselectivity in the Wittig reaction.**

In preparation

1. Alba Vargas–Caamal, Jose Luis Cabellos, Filiberto Ortiz–Chi, Sukanta Mondal, Albeiro Restrepo, Gabriel Merino. **How many water molecules does it take to dissociate H–X acids? ($X=F, Cl, Br, I$)**
2. Sara Gómez, Albeiro Restrepo. **Hydrophobicity**
3. Sara Gómez, Albeiro Restrepo. **Endohedral complexes of noble gas dimers inside C_{70}**
4. Paola Farfán, Sara Gómez, Albeiro Restrepo. **Mechanistic studies of the Wittig reaction**
5. Yuly Chamorro, Alejandro Maldonado, Gustavo Aucar, Edison Florez, Albeiro Restrepo. **Relativistic effects on the microsolvation of heavy halides**
6. Natalia Rojas–Valencia, Adrian Roitberg, Isaias Lans, Marcela Manrique, Cacier Hadad, Albeiro Restrepo. **Influence of pH in the transport of Ibuprofene through model cell membranes**
7. Sara Gómez, Albeiro Restrepo. **Dissecting reaction mechanisms.**

Other publications

1. Albeiro Restrepo. **Influence of π Bonds on the Structure of Organic Molecules.** A Thesis submitted to the Faculty of The College of Science in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Doctor of Philosophy. University of Connecticut, 2005.
2. Albeiro Restrepo. **Theoretical Studies of the Mechanism of the Wittig Olefination Reaction.** A Thesis submitted to the Faculty of The College of Science in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Master of Science. Florida Atlantic University, 1997.
3. Albeiro Restrepo. **Manual de Laboratorio de Química Inorgánica.** Edited by Corporación Universitaria Lasallista, Medellín, Colombia, 1994.

4. Albeiro Restrepo. **Aplicación de los Métodos Variacionales y Autoconsistentes en el Estudio de la Tabla Periódica.** A thesis submitted to The College of Sciences in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Chemist. Universidad de Antioquia, 1992.

Committees

1. Scientific Committee, *VII Encuentro Nacional de Químicos Teóricos y Computacionales (VII-ENQTC)*, *IV Escuela Colombiana de Teoría y Computación en las Ciencias Moleculares (IV-ECTCCM)*, Barranquilla, Colombia, Septiembre 2018.
2. Scientific Committee, *VI Encuentro Nacional de Químicos Teóricos y Computacionales (VI-ENQTC)*, *III Escuela Colombiana de Teoría y Computación en las Ciencias Moleculares (III-ECTCCM)*, Bogotá, Colombia, Septiembre 2016.
3. President of the Scientific Committee, *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, April 27 – 30, 2014.
4. President of the Organizing Committee, *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, April 27 – 30, 2014.
5. Organizing committee, *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, April 28 – May 1, 2012.
6. Scientific Advisory Board, *1st International Conference of Computation for Science and Technology (ICCST-I)*, Chiang Mai, Thailand, August 4 – 6, 2010.
7. Scientific committee, *III Encuentro Nacional de Químicos Teóricos y Computacionales (IIIENQTC)*, San Gil, Santander, Colombia, April 30 – May 2, 2010.
8. Organizing committee, *XXXV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL XXXV)*, San Andrés, Colombia, September 2009.
9. Scientific committee, *II Encuentro Nacional de Químicos Teóricos y Computacionales (IIENQTC)*, Calarcá, Quindío, Colombia, May 2008.
10. Organizing committee, *II Encuentro Nacional de Químicos Teóricos y Computacionales (IIENQTC)*, Calarcá, Quindío, Colombia, May 2008.

Reviewer for the following journals

1. Nature Communications
2. Langmuir
3. ChemPhysChem
4. Journal of Computational Chemistry

5. Journal of Chemical Physics
6. RSC Advances
7. Journal of Physical Chemistry
8. Theoretical Chemistry Accounts
9. Chemical Physics
10. Chemical Physics Letters
11. Journal of Molecular Modeling
12. International Journal of Quantum Chemistry
13. Journal of Molecular Structure
14. International Journal of Molecular Sciences
15. Zeitschrift für Naturforschung A
16. Journal of Cluster Science
17. Physica B
18. Revista Mexicana de Física
19. Revista Colombiana de Química
20. Ion
21. Revista de Ciencias – Univalle

Reviewer for the following funding Agencies

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
7. Comisión Nacional de Investigación Científica y Tecnológica, CONICYT, Chile.

Degrees earned under Dr. Restrepo's advice

1. Natalia Rojas, Ph. D. in Chemistry, Universidad de Antioquia, 2018. Dissertation title: **Insertion of Ibuprofen into a Lipid Bilayer in Aqueous Environments.**

Cotutors: Prof. Cacier Hadad, Prof. Marcela Manrique.

2. Estefanía Díaz, M. Sc. in Chemistry, Universidad de Antioquia, 2018. Dissertation title: **Metátesis de propano catalizada por un complejo de molibdeno soportado: Un estudio DFT.**

Principal advisor: Prof. Francisco Núñez.

3. Paola Farfán, M. Sc. in Chemistry, Universidad de Antioquia, 2018. Dissertation title: **Descripción detallada del mecanismo de la reacción de Wittig.**

Cotutor: Prof. Sara Gómez.

4. Andy Zapata, M. Sc. in Chemistry, Universidad de Antioquia, 2017. Dissertation title: **Estudio de las interacciones intermoleculares de los boranos de amoníaco.**

Cotutor: Prof. Cacier Hadad.

5. Sara Gómez, M. Sc. in Chemistry, Universidad de Antioquia, 2015. Dissertation title: **Solvatación Específica de Carbenos Singlete.**

Cotutor: Prof. Cacier Hadad.

6. César Ibargüen, M. Sc. in Chemistry, Universidad de Antioquia, 2015. Dissertation title: **Estructuras, Energía y Enlazamiento en los Tetrámeros y Pentámeros de Sulfuro de Hidrógeno.**

7. Edison Florez, M. Sc. in Chemistry, Universidad de Antioquia, 2015. Dissertation title: **Efectos Relativistas en el Proceso de Microsolvatación del Metilmercurio.**

Cotutors: Prof. Alejandro Maldonado, Gustavo Aucar, Jorge David.

8. Andrea Echeverri, Chemist. Universidad de Antioquia, 2015. Dissertation titl: **Diseño y estudio teórico de la especie exótica carbeno de dikriptón.**

Principal advisor: Prof. Cacier Hadad.

9. Norberto Moreno, M. Sc. in Chemistry. Universidad de Antioquia, 2014. Dissertation title: **Química de Especies Inertes: Nuevas Especies de Metales Nobles y Gases Nobles.**

Principal advisor: Prof. Cacier Hadad.

10. Carolina Giraldo, Chemist. Universidad de Antioquia, 2014. Dissertation title: **Análisis Detallado del Mecanismo de la Reacción de Michael.**

Principal advisor: Prof. Sara Gómez.

11. Sara Gómez, Chemist. Universidad de Antioquia, 2013. Dissertation title: **Estudio de los Mecanismos de las Reacciones Entre Carbenos Sustituídos y Agua.**

Cotutor Prof. Doris Guerra.

12. Andrei Serna, M. Sc. in Chemistry. Universidad de Antioquia, 2012. Dissertation title: **Cálculo de Propiedades Moleculares Conductoras Estáticas en Polímeros Helicoidales de Pirrol, Furano y Tiofeno en Función de su Tamaño.**

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

Cotutors Prof. Marcela Manrique, Prof. Doris Guerra, Prof. Cacier Hadad.

14. Norberto Moreno, Chemist. Universidad de Antioquia, 2012. Dissertation title: **Caracterización de las Superficies de Energía Potencial de Clusters Au_mPt_n , ($n + m = 4$) Considerando el Efecto del Acoplamiento Spin–Orbita.**

Cotutors Prof. Elizabeth Florez, Prof. Cacier Hadad.

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

Cotutors Prof. Marcela Manrique, Prof. Cacier Hadad.

16. Edison Florez, Chemist. Universidad de Antioquia, 2012. Dissertation title: **Efectos Relativistas en las Geometrías Moleculares de la Serie XH_4^+ ($X = C, Si, Ge, Sn$).**

Cotutor Prof. Jorge David.

17. Cinthia Jaramillo, Chemist, Universidad de Antioquia, 2012. Dissertation title: **Efecto de los Sustituyentes en la Reactividad de Anillo Aromático.**

18. Andrea Pérez Villa, Chemist. Universidad de Antioquia, 2011. Dissertation title: **Complejos Octahedrales de la Serie de Hexafluoruros de Actínidos AnF_6 .**

Cotutor Prof. Jorge David.

19. Diana Yepes, Chemist. Universidad de Antioquia, 2009. Dissertation title: **Caracterización Estructural y Electrónica de Microclusters de Li, Na y K.**

20. Juan David Ripoll, Chemist. Universidad de Antioquia. 2007. Dissertation title: **Estructura Tridimensional y Propiedades Conductoras en Oligómeros de Pirrol, Furano y Tiofeno.**

Thesis juror

1. Alba Vargas–Caamal. Ph. D. in Chemistry. Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, CINVESTAV, Unidad Mérida, México, 2018. Dissertation title: **Systematic Exploration of the Potential Energy Surfaces of Molecular Clusters.**

2. William Quintero. M. Sc. in Chemistry. Universidad Nacional de Colombia sede Bogotá, 2018. Dissertation title: **Estudio teórico del confinamiento de gases nobles en fullerenos.**

3. Ana Escorcía. M. Sc. in Chemistry. Universidad Industrial de Santander, 2018. Dissertation title: **Descriptores de reactividad química y predicción de mutagenicidad de acrilatos: análisis quimiotopológico.**

4. Wilver Muriel. M. Sc. in Physics. Universidad Nacional de Colombia sede Medellín, 2017. Dissertation title: **Estudio de los procesos fotofísicos y fotoquímicos de la 1- y 2-salicilideneantrilamina por medio de metodologías computacionales del estado electrónicamente excitado.**
5. Laura Pedraza. M. Sc. in Chemistry. Universidad Nacional De Colombia sede Bogotá, 2016. Dissertation title: **Análisis de la unión de positrones a moléculas empleando el método del orbital molecular para cualquier tipo de partícula (APMO).**
6. Andrés Escorcia. Ph. D. in Chemistry. Universidad Industrial de Santander, 2015. Dissertation title: **Enantioselective and Chemoselective Acylation of (*R,S*)-Propranolol Catalyzed by *Candida atarctica* Lipase B: A Theoretical and Experimental Approach.**
7. Jorge Ceballos. M. Sc. in Physics. Universidad de Antioquia, 2014. Dissertation title: **Caracterización Conformacional del Péptido ABRI.**
8. César Luna Cáceres, M. Sc. in Chemistry, Universidad Industrial de Santander, 2012. Dissertation title: **Desarrollo de una metodología eficiente para el cálculo de propiedades magnéticas moleculares.**
9. Mario Alberto Barón Rodríguez, Ph. D. in Chemistry, Universidad Industrial de Santander, 2012. Dissertation title: **Bases moleculares del cambio conformacional y aglomeración de la β -2-microglobulina. Efecto del Cu^{2+} como mediador en la formación de fibras amiloides.**
10. Juan Fernando Orrego, Ph. D. in Chemical Sciences, Universidad de antioquia, 2010. Dissertation title: **Caracterización Molecular de Algunas Reacciones de Oxidación de Hidrocarburos Aromáticos con Oxígeno Atómico.**
11. Geovanna Tafurt García, Ph. D. in Chemistry. Universidad Industrial de Santander, 2008. Dissertation title: **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.**
12. Jhon Fredy Pérez, M. Sc. in Chemical Sciences, Universidad de Antioquia, 2007. Dissertation title: **Atomo de Hooke: Correlación Electrónica e Interacción con Pulsos Laser.**
13. Elizabeth Florez, Ph. D. in Chemical Sciences, Universidad de Antioquia, 2006. Dissertation title: **Caracterización Electrónica y Reactividad Química de Nanoestructuras Formadas por Atomos y Clusters Metálicos Depositados Sobre una Vacancia de Oxígeno en la Superficie del Oxido de Magnesio.**

Computer programs

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.