

# **CURRICULUM VITÆ**

**Alejandro C. Olivieri**



## ÍNDICE

<b>DATOS PERSONALES</b>	<b>2</b>	<b>Subsidios Recibidos</b>	<b>6</b>
		<i>Subsidios en curso</i>	6
		<i>Subsidios previos</i>	6
<b>FORMACIÓN</b>	<b>2</b>	<b>Congresos</b>	<b>7</b>
Estudios Universitarios	2	<i>Congresos Internacionales</i>	7
Tesis Doctoral	2	<i>Congresos Nacionales</i>	7
Becas Obtenidas	2	<i>Jornadas de divulgación</i>	8
Pasantías en el Exterior	2	<b>Conferencias internacionales</b>	<b>8</b>
<b>ANTECEDENTES DOCENTES</b>	<b>2</b>	<b>Colaboraciones internacionales</b>	<b>8</b>
Cargos Previos	2	<b>Sociedades Científicas</b>	<b>9</b>
Cargos Actuales	2	<b>Comités Editoriales</b>	<b>9</b>
Dictado de Asignaturas de Grado	3	<b>Referatos y Evaluaciones</b>	<b>9</b>
Dictado de Cursos de Posgrado	3	<b>Organización de Reuniones Científicas</b>	<b>9</b>
Libros Educativos	4	<b>Proyecto de Investigación Acreditado</b>	<b>9</b>
Publicaciones Educativas	4	<b>Transferencia de Conocimientos</b>	<b>9</b>
Publicaciones de Divulgación	4	<b>Cargos Administrativos y de Representación</b>	<b>10</b>
<b>ANTECEDENTES EN INVESTIGACIÓN</b>	<b>5</b>	<b>Premios y Distinciones</b>	<b>10</b>
Cargos Previos	5	<b>Otros Cargos</b>	<b>10</b>
Cargos Actuales	5	<b>LISTA DE PUBLICACIONES</b>	<b>10</b>
Dirección de Tesinas	5	Datos bibliométricos	10
Dirección de Tesis Doctorales	5	Libros	10
Dirección de Becarios	5	Libros (edición)	10
Dirección de Investigadores	6	Capítulos de libros	11
Dirección de Pasantes	6	Publicaciones de revisión	11
		Publicaciones periódicas	12

**DATOS PERSONALES**

- Nombre: Alejandro César Olivieri
- DNI.: 12522179
- Fecha de nacimiento: 28 de julio de 1958
- Nacionalidad: Argentina
- Dirección personal: 9 de Julio 2331, Rosario (S2002ORP), Argentina, TE: 54-341-4405093
- Dirección laboral: Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas, Universidad Nacional de Rosario, División Química Analítica, Instituto de Química Rosario (IQUIR-CONICET), Suipacha 531, Rosario (S2002LRK), Argentina, TE/Fax: 54-341-4372704
- Direcciones electrónicas: olivieri@iquir-conicet.gov.ar; aolivier@fbioyf.unr.edu.ar

**FORMACIÓN****Estudios Universitarios**

- Licenciado en Química Industrial, 1982, Facultad Católica de Química e Ingeniería (FCQI), Universidad Católica Argentina, Rosario.
- Doctor, 1986, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (FCBF), Universidad Nacional de Rosario (UNR).

**Tesis Doctoral**

- FCBF, UNR, 1986, Estudio de nuevos precursores quirales utilizables en la síntesis de terpenoides, Director, Manuel González Sierra.

**Becas Obtenidas**

- Beca de Iniciación, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), 1983-1985, Instituto de Química Orgánica de Síntesis (IQUIOS), FCBF, UNR, Estudio de nuevos precursores quirales utilizables en la síntesis de terpenoides, Director, Manuel González Sierra.
- Beca de Perfeccionamiento, CONICET, 1985-1986, IQUIOS, Estudio de parámetros aditivos para el cálculo de desplazamientos químicos de  $^{13}\text{C}$ . Aplicación a octahidrofenantrenos sustituidos, Director, Manuel González Sierra, y mayo de 1986-1987, Programa de Investigaciones Bioorgánicas (PRIBIOR), CONICET, Facultad de Farmacia y Bioquímica (FFB), Universidad de Buenos Aires (UBA), Resonancia Magnética Nuclear en Fase Sólida, Director, Benjamín Frydman.
- Beca externa, CONICET, 1987-1988, Departamento de Química, Universidad de Illinois en Urbana-Champaign, Urbana, Illinois, EEUU, Reacciones químicas en fase sólida, Resonancia Magnética Nuclear de sólidos y cristalografía de Rayos X, Directores, David Y. Curtin e Iain C. Paul.
- Beca de Formación Superior, CONICET, 1988-1989, Departamento de Química Analítica, FCBF, UNR, Transferencia de Protones en Fase Sólida.
- Estancia Sabática del Ministerio de Educación y Ciencias de España, noviembre 1992- abril 1993,

Instituto de Química Médica y Departamento de Química Orgánica y Biología, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Madrid, España, Transferencia de protones en fase sólida.

**Pasantías en el Exterior**

- Departamento de Química, Universidad de Durham, Inglaterra, convenio CONICET-Royal Society y convenio Fundación Antorchas-British Council. Contraparte: Robin K. Harris. Julio-agosto de 1991, Julio de 1993, Agosto de 1997.
- Departamento de Química Orgánica y Biología (UNED) de Madrid, España, convenio de cooperación. Contraparte: Rosa M. Claramunt. Junio de 1995.
- Departamento de Química Inorgánica, Química Física y Química de los Materiales de la Universidad de Turín, Italia, convenio con la Universidad de Turín. Contraparte: Roberto Gobetto. Junio de 1995.
- Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Universidad de Extremadura, España, convenio de cooperación. Contraparte: Arsenio Muñoz de la Peña. Julio de 1997, Febrero de 2000, Enero de 2003, Julio de 2006, Julio de 2010, Octubre de 2014.
- Departamento de Química, Laboratorio de Química Analítica, Universidad Estatal de Dakota del Norte, Estados Unidos, convenio de cooperación. Contraparte: Andrés Campiglia. Julio de 2001.
- Instituto de Análisis y Diagnóstico Ambiental, CSIC, Barcelona, España. Contraparte: Romá Tauler. Agosto de 2008.
- Departamento de Química, Virginia Commonwealth University, Richmond, Virginia, EEUU. Contraparte: Sarah Rutan. Marzo de 2013.

**ANTECEDENTES DOCENTES****Cargos Previos**

- FCQI, Química Analítica Cualitativa, Ayudante no diplomado, 1980-1982, Profesor Asistente, 1982-1983, Profesor Asistente, 1984-1985.
- FCBF, Química General e Inorgánica, Jefe de Trabajos Prácticos DS, 1985-1987.
- FCBF, Departamento de Química Analítica, Área Química Analítica General, Profesor Asociado DE, interino, 1989, Profesor Asociado DE ordinario, 1990-1997, Profesor Titular DE interino, 1997-2001.
- Categorías en el Programa de Incentivos a docentes investigadores: B (1994-1996) y A (1997-1998).

**Cargos Actuales**

- Profesor Titular DE ordinario, FCBF, Departamento de Química Analítica, Área Química Analítica General (2001-).

- Categoría en el Programa de Incentivos a docentes investigadores: 1 (1999-).
- **Dictado de Asignaturas de Grado**
- Química Analítica para Bioquímica, Farmacia, Licenciatura en Química, Licenciatura en Biotecnología y Profesorado en Química, FCBF, UNR (2000-2008).
- Química Analítica I y Química Analítica II para Bioquímica, Farmacia, Licenciatura en Química, Licenciatura en Biotecnología y Profesorado en Química, FCBF, UNR: 1989-1999 y 2009-.
- Análisis Industrial para Licenciatura en Química, FCBF, UNR (1999-).
- Asignaturas electivas (Química Analítica IV, Espectroscopía Avanzada, RMN Avanzada, Química Analítica Superior) para Licenciatura en Química, FCBF, UNR (1993-).
- **Dictado de Cursos de Posgrado**
- Diversos cursos de posgrado en la FCBF, UNR (1990-).
- Tópicos de Espectroscopía Orgánica e Inorgánica, Análisis Instrumental e Introducción a la programación en MATLAB, asignaturas del Doctorado en Ciencias Químicas, FCBF, UNR (1997-).
- Resonancia Magnética Nuclear, Escuela Latinoamericana de Biofísica, La Plata, noviembre de 1987.
- Resonancia Magnética de Imágenes, Fundación Villavicencio, Rosario, julio de 1991.
- Resonancia Magnética Nuclear de Sólidos, Sociedad Argentina de Investigadores en Química Orgánica, Córdoba, abril de 1995.
- Métodos de Investigación Fitoquímica, Asociación de Universidades Grupo Montevideo, Rosario, julio de 1997.
- Aplicaciones de la Resonancia Magnética (NMR-EPR) a Sistemas Biológicos. Opción B: NMR, Buenos Aires, septiembre de 1997.
- Curso de Química Analítica Básica, Programa de Actualización para Profesores de Profesorado, Ministerio de Educación y Justicia de la Nación, Contrato No. 150/97, Rosario, FCBF, UNR, 1998-1999.
- Espectroscopía Orgánica e Inorgánica, Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas (FBCB), Universidad Nacional del Litoral (UNL), abril-julio de 2000.
- Espectroscopía de luminiscencia, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis, agosto de 2003.
- Tópicos de Quimiometría. Parte I, Asociación Argentina de Químicos Analíticos, curso electrónico, setiembre-noviembre de 2004.
- Quimiometría, Universidad de Concepción, Chile, junio de 2005.
- Actualización en técnicas analíticas, FCByF, UNR, empresa Siderar SA, 2006.
- Tópicos de química analítica, Bolsa de Comercio de Rosario, 2006.
- Quimiometría, Maestría en Química Analítica, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis, 2006-.
- Métodos luminiscentes, Universidad de la Patagonia San Juan Bosco, 12 al 16 de marzo de 2007.
- Quimiometría: métodos de calibración uni- y multivariada, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, La Plata, abril de 2009.
- Quimiometría: métodos de calibración uni- y multivariada, Instituto de Química, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Chile, septiembre de 2010.
- Quimiometría: métodos de calibración uni- y multivariada, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, febrero de 2011.
- Calibración multivariada de segundo orden, III Workshop de Quimiometría, Salvador de Bahía, Brasil, abril de 2012.
- Calibración multivariada de segundo orden, Congreso Uruguayo de Química Analítica, Montevideo, Uruguay, octubre de 2012.
- Calibración multivariada de segundo orden, Escuela de Invierno de Quimiometría, San Carlos, Brasil, agosto de 2013.
- Calibración multivariada de primer y segundo orden, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay, marzo de 2014.
- Calibración multivariada de segundo orden, XII Encuentro de Química Analítica y Ambiental y VII Congreso Iberoamericano de Física y Química Ambiental, Viña del Mar, Chile, octubre de 2014.
- Tópicos de quimiometría en espectroscopía de infrarrojo cercano, mini-curso dictado en la 17ª Conferencia Internacional sobre Espectroscopía de Infrarrojo Cercano (NIR 2015), octubre de 2015, Foz de Iguazú, Brasil.
- Diseño y optimización de experimentos, Instituto de Biología Agrícola de Mendoza (IBAM), Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad Nacional de Cuyo, Mendoza, noviembre de 2015.
- Calibración multivariada de primer orden, Universidad Nacional de Córdoba, 2016.
- Calibración multivariada de primer orden, Universidad Nacional de La Plata, 2017.
- Calibración multivariada. Recientes avances y cifras de mérito. Mini-curso dictado en el II Encuentro Regional de la Sociedad Brasileira de Química, Región Centro-Oeste, Brasilia, 2018.
- Calibración multivariada de primer orden, Metrohm, México, junio de 2018.

- Calibración multivariada de segundo orden, Universidad Estadual de San Pablo, Araraquara, Brasil, febrero de 2019.
  - Calibración multivariada de segundo orden, Universidad Nacional de Córdoba, 2019.
- Libros Educativos**
1. Equilibrios ácido-base en solución acuosa. Aplicaciones de la condición de protón. Olivieri, AC, UNR Editora, Rosario, 1994, Segunda edición ampliada y corregida, Ediciones Científicas Argentinas, Buenos Aires, 2000.
  2. Calibración multivariada. Introducción a la programación en MATLAB. Olivieri, AC, Ediciones Científicas Argentinas, Buenos Aires, 2001.
  3. La calibración en Química Analítica. Goicoechea, HC, Olivieri, AC, Universidad Nacional del Litoral, 2007, ISBN 978-987-508-900-6.
  4. Calibración multivariada: una aproximación práctica, Olivieri, AC, Libro Digital, Ediciones Científicas Argentinas, Buenos Aires, 2017.
- Publicaciones Educativas**
1. A simple computer program for the calculation of  $^{13}\text{C}$  NMR chemical shifts. Olivieri, AC, Kaufman, TS, J. Chem. Educ. 66 (1989) 53.
  2. Solution of acid-base equilibria by successive approximations. Olivieri, AC, J. Chem. Educ. 67 (1990) 229.
  3. Calculation of solubilities of carbonates and phosphates in water as influenced by competitive acid-base reactions. Lagier, CM, Olivieri, AC, J. Chem. Educ. 67 (1990) 934.
  4. Quadrupole effects in the solid-state NMR spectra of spin-1/2 nuclei: a perturbation approach. Grondona, P, Olivieri, AC, Concepts Magn. Reson. 5 (1993) 319.
  5. How to write a computer program for the simulation of solid-state NMR line shapes. Olivieri, AC, Concepts Magn. Reson. 8 (1996) 279.
  6. Illustrating longitudinal ( $T_1$ ) NMR relaxation with a microcomputer. Olivieri, AC, Concepts Magn. Reson. 9 (1997) 139.
  7. Illustrating transverse ( $T_2$ ) NMR relaxation with a microcomputer. Olivieri, AC, Concepts Magn. Reson. 9 (1997) 337.
  8. Illustrating rotating-frame ( $T_{1\rho}$ ) NMR relaxation with a microcomputer. Olivieri, AC, Concepts Magn. Reson. 10 (1998) 157.
  9. Illustrating NMR cross polarization (CP) with a microcomputer. Olivieri, AC, Concepts Magn. Reson. 10 (1998) 343.
  10. Determination of stability constants of metal complexes from spectrophotometric measurements. an undergraduate laboratory experiment. Ibáñez, GA, Escandar, GM, Olivieri, AC, J. Chem. Educ. 76 (1999) 1277.
  11. Determination of the active principle in a syrup by spectrophotometry and principal component regression (PCR) analysis. An advanced undergraduate experiment involving chemometrics. Ribone, ME, Pagani, AP, Olivieri, AC, Goicoechea, HC, J. Chem. Educ. 77 (2000) 1330.
  12. Simultaneous determination of two antibiotics in tablets by spectrophotometry and principal component regression (PCR) analysis. an advanced undergraduate experiment involving chemometrics. Ribone, ME, Pagani, AP, Goicoechea, HC, Olivieri, AC, The Chemical Educator 5 (2000) 236.
  13. Teaching chemometrics with a bioprocess: analytical methods comparison using bivariate linear regression. Franco, V, Mantovani, VE, Goicoechea, HC, Olivieri, AC, The Chemical Educator 7 (2002) 265.
  14. Spectrophotometric analysis of mixtures by classical least-squares calibration. An advanced experiment introducing MATLAB. González Gómez, D, Muñoz de la Peña, A, Espinosa Mansilla, A, Olivieri, AC, The Chemical Educator 8 (2003) 187.
  15. Precision in two-wavelength spectroscopic analysis of binary mixtures. Cabezón, M, Olivieri, AC, The Chemical Educator 9 (2004) 288.
  16. Precision in multi-wavelength spectroscopic analysis using classical least-squares regression. Cabezón, M, Olivieri, AC, The Chemical Educator 11 (2006) 394-401.
  17. Formation constants of copper(II)-salicylic acid complexes from multi-wavelength spectrophotometric pH titration data analyzed by alternating least-squares including Newton-Raphson and Gauss-Newton procedures. Ibáñez, GA, Escandar GA, Olivieri, AC, The Chemical Educator 12 (2007) 22-28.
  18. The pH of aqueous ammonium hydrogen carbonate. Lessons from mathematics and chemistry. Olivieri, AC, The Chemical Educator 15 (2010) 257-263.
  19. Excitation-emission fluorescence spectroscopic analysis in the presence of interferents. A laboratory experiment integrating analytical chemistry and advanced data processing. Boeris, V, Cabezón, MA, Olivieri, AC, The Chemical Educator 18 (2013) 165-172.
- Publicaciones de Divulgación**
1. El Valor de los científicos. Olivieri, AC, Ciencia Hoy 9 (1999) 44. Traducido al portugués y publicado como: O valor dos cientistas, Ciência Hoje 26 (1999) 30.
  2. Composición de mezclas de biodiesel con gasoil por espectroscopía de infrarrojo cercano. Pedrido,

- ML, Bortolato, S, González Sierra, M, Olivieri, AC, Boschetti, CE, LabCiencia, 3 (2008) 14.
3. Química Analítica en el siglo XXI: modelado de datos instrumentales y miniaturización de sistemas analíticos. Olivieri, AC, Rivas, GA, Ciencia Hoy 21 (2011) 51-56.
  4. Los desafíos de la química analítica: quimiometría. Ciencia e Investigación 61(2011) 77-80.
  5. Historias de metales, de amor, de locura y de muerte. Olivieri, AC, Ciencia Hoy 22 (2012) 15-20.
  6. ¿Habrá un futuro sin química? Olivieri, AC, Ciencia Hoy 23 (2013) 37-39.
  7. Chemometrics in Argentina: the result of unplanned events. Olivieri, AC, J. Braz. Chem. Soc. 25 (2014) 5-8.
  8. La tabla periódica de los elementos. Olivieri, AC, Ciencia Hoy 28 (2019) 41-46.

## ANTECEDENTES EN INVESTIGACIÓN

### Cargos Previos

- Becario de Iniciación, Perfeccionamiento, Externo y de Formación Superior, CONICET, 1983-1989.
- Investigador Adjunto, CONICET, 1989-1999, Investigador Independiente, CONICET, 1999-2002, Investigador Principal, CONICET, 2002-2010.

### Cargos Actuales

- Investigador Superior, CONICET (2010-).

### Dirección de Tesinas

- Anabel Rullo, Licenciatura en Biotecnología, 2001.
- Darío Rodríguez, Licenciatura en Química, 2002 (co-dirección).
- Virginia Roldán, Licenciatura en Química, 2004 (co-dirección).
- Anabel Rullo, Licenciatura en Química, 2005.
- Gerardo Martínez Delfa, Licenciatura en Química, 2005 (co-dirección).
- Gastón Knobel, Licenciatura en Química, 2006 (co-dirección).
- Santiago Bortolato, Licenciatura en Química, 2006.
- Franco Allegrini, Licenciatura en Química, 2010.

### Dirección de Tesis Doctorales

- Claudia M. Lagier, Tesis Doctoral, 1993, FCBF, Reacciones en Fase Sólida: Transferencia de Protones e Interacciones Ácido-Base en Sólidos.
- Sergio H. Alarcón, Tesis Doctoral, 1996, FCBF, Estudio de la Transferencia de Protones en Compuestos Orgánicos Mediante Métodos Espectroscópicos.
- Patricia C. Damiani, Tesis Doctoral, 1996, FCBF, Determinación Analítica Rápida de Metabolitos de Fármacos en Fluidos Biológicos.

- Héctor C. Goicoechea, Tesis Doctoral, 2000, FCBF, Nuevas Estrategias Espectroscópicas para el Análisis de Fármacos en Formas Farmacéuticas y Fluidos Biológicos.
  - María Élide Ribone, Tesis Doctoral, 2002, FCBF, Determinación de Tóxicos Ambientales y sus Metabolitos por Espectrofluorimetría.
  - Juan Alberto Nepote, Tesis Doctoral, 2003, FCBF, UNL, Nuevos Métodos para Análisis y Monitoreo de Fármacos. Estudios mediante Espectrofluorimetría, Absorciometría y Calibración Multivariada.
  - Luciana Vera Candioti, Tesis Doctoral, 2009, FCBF, UNL, Desarrollo de nuevas estrategias analíticas basadas en técnicas separativas acopladas a metodologías de preconcentración y modelado quimiométrico para el análisis de fármacos y sus metabolitos en muestras complejas.
  - Diana Magni, Tesis Doctoral, 2009, Facultad de Ingeniería, UNL, Desarrollo de métodos analíticos basados en espectroscopía, inyección en flujo y quimiometría. Aplicación a muestras de interés ambiental.
  - Valeria Lozano, Tesis Doctoral, 2011, FCBF, Desarrollo de métodos analíticos luminiscentes en combinación con métodos quimiométricos. Aplicaciones al control ambiental y alimenticio.
  - Franco Allegrini, Tesis Doctoral, 2015, FCBF, Calibración analítica multidimensional: estudio de cifras de mérito y desarrollo de nuevos algoritmos.
  - Natalia Sorol, Tesis Doctoral iniciada en 2010, Universidad Nacional de Tucumán.
- ### Dirección de Becarios
- Sergio H. Alarcón, Beca de Iniciación, Perfeccionamiento y Posdoctoral, CONICET (1992-1997).
  - Gabriela A. Ibáñez, Beca de Iniciación y Perfeccionamiento, CONICET (1995-1999).
  - Héctor C. Goicoechea, Beca Programa FOMEC (1997-2001).
  - Guillermo Labadie, Beca Posdoctoral, CONICET (1999-2001).
  - Carlos Boschetti, Beca Posdoctoral, CONICET cofinanciado por la empresa PASA (2000-2002).
  - Juan A. Arancibia, Beca Posdoctoral, CONICET (2003-2004).
  - Luciana Vera Candioti, Beca Posgrado Tipo I, CONICET (2005-2009).
  - Alejandro García Reiriz, Beca Posgrado Tipo I, CONICET (2006-2009).
  - Darío Leonardi, Beca Posdoctoral, CONICET (2007-2008).
  - Valeria Lozano, Beca Doctoral, ANPCyT (2007-2009) y CONICET Tipo II (2009-2010).

- Mariano Borraccetti, Beca Posdoctoral, ANPCyT (2008-2009).
- Rubén Maggio, Beca Posdoctoral, CONICET (2009-2011).
- Jessica Chiarandini Fiore, Beca Posdoctoral, CONICET (2010-2012).
- Jaiver Osorio, Beca Posdoctoral (co-dirección), CONICET (2011-2013).
- Valeria Boeris, Beca Posdoctoral, CONICET (2012-2014).
- Pablo Pisano, Beca Posdoctoral, CONICET (2012-2014).
- Franco Allegrini, Beca Doctoral, CONICET (2012-2015) y Posdoctoral (CONICET) (2016-2017).

#### **Dirección de Investigadores**

- Sergio H. Alarcón, Investigador Asistente CONICET (1997-2002).
- Gabriela A. Ibáñez, Investigadora Asistente CONICET (2003-2008).
- Héctor C. Goicoechea, Investigador Asistente CONICET (2003-2004).
- Alejandro G. García Reiriz, Investigador Asistente CONICET (2010-2016).
- Darío Leonardi, Investigador Asistente CONICET (2011-2015).
- Santiago Bortolato, Investigador Asistente CONICET (2013-2017).
- Pablo Pisano, Investigador Asistente CONICET (2015-).
- Romina Monasterio, Investigadora Asistente CONICET (co-director, 2014-).

#### **Dirección de Pasantes**

- Ignacio Mellán Cabrera, pasantía de post-grado del programa Intercampus España-Latinoamérica, septiembre-octubre de 1995.
- Angela Moreno Gálvez, pasantía de post-grado del programa Intercampus España-Latinoamérica, septiembre-octubre de 1997.
- David González Gómez, Beca de post-grado de la Junta de Extremadura, España, octubre-diciembre de 2002.
- Fernando Benavente, pasantía de post-doctorado, Facultad de Química, Universidad de Barcelona, marzo-mayo de 2004.
- Diego Bohoyo Gil, Beca de post-grado de la Junta de Extremadura, España, octubre-diciembre de 2004, convenio de cooperación con AECI, mayo-julio de 2006.
- Ana Jiménez Girón, Beca de post-grado del Ministerio de Educación y Ciencias, España, septiembre-noviembre de 2006.
- Wallace Fragoso, Universidad de Paraíba, Brasil, Beca CNPq, mayo 2015-abril 2016.
- Marco Ferrao, Universidad de Porto Alegre, Brasil, Beca CNPq, agosto 2015-enero 2016.

- Jez Wiliam Braga, Universidad de Brasilia, marzo-mayo 2017.
- Sarmento Mazivila, Universidad de Porto, Portugal, agosto-octubre 2017.
- Ana María Jiménez Carvelo, Universidad de Granda, España, setiembre-diciembre 2017.

#### **Subsidios Recibidos**

##### **Subsidios en curso**

- ANPCyT, 2017-2019, PICT 2016-1122.
- ##### **Subsidios previos**
- Academia de Ciencias del Tercer Mundo (TWAS), 1990: Investigadores Jóvenes de Países del Tercer Mundo.
  - Fundación Antorchas, 1990, 1992, 1993 y 1994: Científicos Jóvenes.
  - Fundación Antorchas-British Council, 1995-1997: colaboración con científicos de Gran Bretaña (Robin K. Harris, Universidad de Durham).
  - Fundación Antorchas, 1995 y 1996: compra de equipamiento científico.
  - Fundación Antorchas, 1997, 1998 y 2002: apoyo a proyectos.
  - CONICET, 1989 y 1992, PIA.
  - Universidad Nacional de Rosario (1993-2014): PIDs.
  - ANPCyT, 1998-2000, 2001-2003, 2005-2008, 2011-2013, 2014-2017.
  - Fundación Antorchas, 2002-2003 y 2004-2005: colaboración entre grupos argentinos. Contraparte: Dra. Beatriz Fernández Band, Universidad Nacional del Sur.
  - CONICET, 2004: compra de equipamiento científico.
  - CONICET, 1998-2003 y 2005-2008, PIPs.
  - IUPAC, 2005, División Química Analítica, Proyecto No. 2004-041-1-500.
  - Agencia Española de Cooperación Internacional (AECI), 2006: colaboración con el Depto. de Química Analítica de la Universidad de Extremadura, España, 2008: colaboración con el Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Barcelona, España
  - CONICET-CNPq, Convenio 2005-2006 visitas científicas. Contraparte: Ronei Poppi, Universidad de Campinas, Brasil.
  - SECyT-CAPEs, Convenio 2010-2011 visitas científicas. Contraparte: Ronei Poppi, Universidad de Campinas, Brasil.
  - CONICET-NSF, Convenio 2012-1013 visitas científicas. Contraparte: Sarah Rutan, Virginia Commonwealth University, Richmond, Virginia, EEUU.
  - Colaborador Internacional en el Proyecto del Plan Nacional de Investigación de España. Investigador Responsable: Arsenio Muñoz de la Peña, 2009-2012.

**Congresos****Congresos Internacionales**

- Simposio Fritz Haber, Jerusalem, 1987, presentación de póster.
- Coloquio Bunsen sobre Dinámica de Reacciones de Transferencia de Hidrógeno, Berlín, 1989, presentación de póster.
- Congreso Latinoamericano de Química, Buenos Aires, 1990, presentación de pósteres.
- XI Simposio sobre Resonancia Nuclear Cuadrupolar, Londres, 1991, presentación de póster.
- 11° Reunión Internacional sobre Espectroscopía de RMN, Royal Society of Chemistry, Swansea, Gales, 1993, conferencia plenaria.
- Conferencia Experimental de Resonancia Magnética Nuclear, Canadá, 1994, presentación de póster.
- Simposio Internacional de Ligandos Macrocíclicos para el Diseño de Nuevos Materiales, Buenos Aires, 1994, presentación de póster.
- XVIII Simposio Nacional de RMN, Ikaalinen, Finlandia, 1996, presentación de póster.
- 32° Conferencia Internacional de Química de Coordinación, Santiago de Chile, 1997, presentación de póster.
- 28° Conferencia Anual de la Federación de Sociedades de Química Analítica y Espectroscopía (FACSS 2001), Detroit (Estados Unidos), 2001, presentación de póster.
- X Simposio Internacional de Espectroscopía de Luminiscencia, Granada, España, 2002, presentación de póster, XI Simposio, Lugo, España, 2006, XIII Simposio, Bolonia, Italia, 2008, XIV Simposio, Praga, 2010, presentación de pósteres.
- Colloquium Chemometricum Mediterraneum, Ustica, Italia, 2003, presentación de póster, Bevagna, Italia, 2013, presentación de póster.
- Buenos Aires Workshop en Espectrometría de Rayos X, Comisión Nacional de Energía Atómica, Buenos Aires, 2004, conferencia invitada.
- IX International Conference on Methods and Applications of Fluorescence: Spectroscopy, Imaging and Probes, Lisboa, Portugal, 2005, presentación de pósteres.
- 13° Encuentro Nacional de Química Analítica y I Congreso Iberoamericano de Química Analítica, Niteroi, Brasil, 2005, conferencia plenaria, 14° Encuentro, Joao Pessoa, Brasil, octubre de 2007, presentación oral y de póster
- HPCE 2006: 20th International Symposium on Microscale Separation and Electrophoresis, Amsterdam, Holanda, 2006, presentación de póster.
- 10ª Conferencia Internacional de Quimiometría y Química Analítica, Aguas de Lindoia, Brasil, 2006, presentación oral y de pósteres, 11ª Conferencia, Montpellier, Francia, julio de 2008, presentación de pósteres, 13ª Conferencia, Budapest, Hungría, 2012, presentación de pósteres, 16ª Conferencia, Barcelona, 2016, conferencia plenaria y presentación de póster.
- XV Reunión de la Sociedad Española de Química Analítica, San Sebastián, España, 2009, presentación de póster.
- VIII Encuentro de Química Analítica y Ambiental, Iquique, Chile, 2006, conferencia plenaria, X Encuentro y IV Congreso Iberoamericano de Química Analítica, Con Con, Chile, 2010, presentación de pósteres, XII Encuentro y VII Congreso Iberoamericano de Física y Química Ambiental, Viña del Mar, Chile, 2014, dictado de minicurso “Calibración multivariada de segundo orden”.
- XXXVII Coloquio Espectroscópico Internacional (CSI), Buzios, Brasil, 2011, presentación de pósteres y conferencia invitada.
- II Congreso Uruguayo de Química Analítica, Montevideo, Uruguay, 2012, presentación de póster, III Congreso, Montevideo, 2014, presentación de póster.
- III Workshop de Quimiometría, Salvador de Bahía, Brasil, 2012, conferencia invitada, VII Workshop, Londrina, 2016, póster, VIII Workshop, Salvador de Bahía, 2017, conferencia invitada.
- V Workshop de Quimiometría, Badajoz, España, 2013, conferencia plenaria.
- TIC2017, Newcastle, Australia, conferencia invitada, 2017, TIC2019, Szeged, Hungría, conferencia invitada.
- 46° Congreso Mundial de IUPAC, San Pablo, Brasil, conferencia invitada, 2017.
- Workshop en Bioenergía y Quimiometría, Araraquara, Brasil, conferencia invitada, 2019.

**Congresos Nacionales**

- Simposio Nacional de Química Orgánica, Sierra de la Ventana, 1985; Huerta Grande, 1987, 1991, 1993, 1997 y 2011, presentación de pósteres; Los Cocos, 1995, conferencia plenaria y presentación de pósteres.
- Encuentro Académico-Tecnológico de Informática, Buenos Aires, 1990, presentación de póster.
- Congreso de la Asociación Química Argentina, Córdoba, 1994, Bahía Blanca, 1996, La Plata, 1998, Corrientes, 2000, Olavarría, 2004, presentación de pósteres, Santa Fe, 2002, conferencia plenaria y presentación de pósteres, Tucumán, 2008, conferencia plenaria.
- Congreso Argentino de Físicoquímica, Mar del Plata, 1992, San Luis, 1994, presentación de pósteres, Tucumán, 1997, conferencia semiplenaria y presentación de pósteres, Santa Fe, 1999,



- presentación de pósteres, San Martín de los Andes, 2001, presentación de pósteres.
- IV Jornadas Nacionales y Primeras Internacionales de Enseñanza Universitaria de la Química, Santa Fe, 1999, presentación de pósteres.
  - Reunión de Químicos Analíticos, San Luis, 1999, conferencia, Rosario, 2001, organización del encuentro.
  - Simposio Electrónico de la Asociación Argentina de Químicos Analíticos, 2000, dirección del Simposio y presentación de ponencias, 2002, dirección del Simposio y presentación de ponencias.
  - 145 Jornadas Científicas de la Academia Nacional de Farmacia y Bioquímica, Buenos Aires, 2001, conferencia.
  - Congreso de la Asociación Argentina de Químicos Analíticos, Rosario, 2001, organización del encuentro, presentación de pósteres y conferencia plenaria, Huerta Grande, 2003, presentación de pósteres, Merlo, 2005, presentación de pósteres, Buenos Aires (III Congreso Iberoamericano de Química Analítica), 2007, presentación de pósteres, Bahía Blanca, 2009, presentación de pósteres y conferencia plenaria, Santa Fe, 2011, presentación de pósteres y conferencia invitada, Mendoza, 2013, presentación de pósteres, La Plata, 2015, presentación de pósteres, Río Cuarto, 2017, conferencia plenaria y presentación de pósteres, La Pampa, presentación de pósteres.
  - Congreso de la Asociación Argentina de Catálisis, Santa Fe, 2005, presentación de póster.
  - Primer Taller Argentino de Ciencias del Ambiente, Rosario, 2009, presentación de póster, Tercer Taller, Córdoba, 2014, presentación de pósteres y conferencia plenaria.
  - XVIII Congreso de la Asociación de Universidades del Grupo Montevideo, Santa Fe, 2010, presentación de póster.
  - Congreso de la Sociedad Argentina de Farmacia y Bioquímica Industrial, Buenos Aires, 2011, conferencia invitada.
- Jornadas de divulgación**
- Exposición de la Agrupación de Representantes y Proveedores de Instrumental Analítico y Afines (ExpoARPIA 2005), Buenos Aires, 2005, conferencia.
  - Ciclo de Difusión Científica Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, CERIDER-CONICET y Colegio Internacional Parque de España, 2005, conferencia.
  - XIII Reunión de Educadores en Química (REQ), Rosario, 2006, conferencia.
  - Semana de la Química, 2007-2012, FBCB, conferencia.
  - Jornadas "Detectando lo invisible", Universidad Católica Argentina, Rosario, 2010, conferencia.
  - Universidad Abierta para Adultos Mayores, UNR, 2013.
  - "El índice h", Tecnicatura en Periodismo Científico, ISET, Rosario, 2014.
- Conferencias internacionales**
- Universidad de Durham, Inglaterra, 1991.
  - 11° Reunión Internacional sobre Espectroscopía de RMN, Royal Society of Chemistry, Gales, 1993.
  - Universidad Nacional de Educación a Distancia, Madrid, 1993.
  - Universidad de Turín, Italia, 1995.
  - Universidad de Extremadura, España, 2000.
  - Buenos Aires Workshop en Espectrometría de Rayos X, Comisión Nacional de Energía Atómica, Buenos Aires, 2004.
  - 13° Encuentro Nacional de Química Analítica y I Congreso Iberoamericano de Química Analítica, Niteroi, Brasil, 2005.
  - Universidad de Barcelona, España, 2006.
  - 10ª Conferencia Internacional de Quimiometría y Química Analítica, Campinas, Brasil, septiembre de 2006.
  - VIII Encuentro de Química Analítica y Ambiental, Iquique, Chile, 2006.
  - III Workshop de Quimiometría, Salvador de Bahía, Brasil, 2012.
  - Departamento de Química, Virginia Commonwealth University, Richmond, Virginia, EEUU, 2013.
  - V Workshop de Quimiometría, Badajoz, España, 2013.
  - XVI Congreso Internacional de Quimiometría, Barcelona, España, 2016.
  - VIII Workshop de Quimiometría, Salvador de Bahía, Brasil, 2017.
  - 46° Congreso Mundial de IUPAC, San Pablo, Brasil, 2017.
  - Workshop en Bioenergía y Quimiometría, Araraquara, Brasil, 2019.
- Colaboraciones internacionales**
- Arsenio Muñoz de la Peña, Universidad de Extremadura, España, desde 1997.
  - Andrés Campiglia, University of Central Florida, Orlando, EEUU, desde 2001.
  - Romà Tauler, CSIC, Barcelona, España, desde 2007.
  - Ronei Poppi, Instituto de Química, Universidad de Campinas, Brasil, desde 2004.
  - Fernando Benavente, Facultad de Química, Universidad de Barcelona, España, desde 2003.
  - Nicholas Faber, Chemometry Consultancy, Holanda, desde 2000.
  - Antonio Segura Carretero, Universidad de Granada, España, desde 2007.

- Hai-Long Wu, Escuela de Química e Ingeniería Química, Universidad de Hunan, China, desde 2007.
- Sarah Rutan, Virginia Commonwealth University, Richmond, Virginia, EEUU, desde 2013.
- Peter Wentzell, Dalhousie University, Halifax, Canadá.
- Manuel Bravo, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Chile.

#### **Sociedades Científicas**

- Miembro de la Academia de Ciencias de América Latina (ACAL) (2018-).
- Sociedad Argentina de Investigadores en Química Orgánica (SAIQO), socio activo (1985-1997), y Tesorero (1995-1997).
- Asociación Argentina de Químicos Analíticos, socio activo (1999-), vocal de la Comisión Directiva (1999-2001 y 2010-2011), Vicepresidente (2001-2003) y Presidente (2004-2005).

#### **Comités Editoriales**

- Editor Asociado de la revista Microchemical Journal, Elsevier (2018-).
- Miembro del Comité Editorial de la revista Journal of Chromatography A, Elsevier (2018-).
- Miembro del Comité Editorial de la revista Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, Elsevier (2014-).
- Miembro del Comité Editorial de la revista Talanta, Elsevier (2010-).

#### **Referatos y Evaluaciones**

- Referee de revistas internacionales de química analítica, espectroscopía y quimiometría.
- Referee de solicitud de subsidios a la Agencia de Cooperación Estados Unidos-Israel.
- Evaluador del Sistema Nacional de Incentivos a docentes investigadores, categorías III y IV, Luján y Santa Fe, 1999, recusación de categorías III y IV, Buenos Aires, 2000, Recategorización, Salta, Luján y Córdoba, 2004.
- Miembro de Comisiones Asesoras de Concursos de Jefes de Trabajos Prácticos y Profesores en la FCBF, UNR, y en Facultades de Química de otras Universidades Nacionales.
- Miembro de Jurado de Tesinas y Tesis Doctorales en la FCBF, UNR y en otras Universidades Nacionales.
- Evaluador de solicitud de subsidios a la ANPCyT.
- Coordinador de la Comisión de Ciencias Químicas del FONCyT, 2009-2011.
- Evaluador de Ingresos a Carrera y solicitudes de subsidios de CONICET.
- Comisión Asesora para Becas de Ciencias Químicas de CONICET, integrante, 2008-2009, coordinador, 2010.

- Comisión Asesora de Ciencias Químicas de CONICET, integrante, 2003-2005, coordinador alterno, 2012, coordinador, 2013.
- Comisión Asesora para promoción a Investigador Superior, integrante, 2013-2014, coordinador, 2015.
- Miembro del Jurado Premio Catoggio, Asociación Argentina de Químicos Analíticos, 2015.
- Miembro de la Junta de Calificación y Promoción, CONICET, 2016-.

#### **Organización de Reuniones Científicas**

- Director del Primer Simposio Electrónico de la Asociación Argentina de Químicos Analíticos, del 12/06/00 al 07/07/00.
- Director de la Segunda Reunión de Químicos Analíticos, Rosario, 2 y 3 de agosto de 2001.
- Presidente del Comité Organizador de las Primeras Jornadas Nacionales de la Asociación Argentina de Químicos Analíticos, Rosario, 6 y 7 de diciembre de 2001.
- Miembro del Comité Organizador Internacional del Primer Congreso Iberoamericano de Química Analítica, Niteroi, Brasil, 12-16 de setiembre de 2005.

#### **Proyecto de Investigación Acreditado**

Modelado quimiométrico de datos espectroscópicos multivariados

Se propone la investigación de técnicas quimiométricas avanzadas de procesamiento de datos espectroscópicos (luminiscentes y absorbivos), con el objetivo de desarrollar métodos analíticos aplicables a mezclas de composición compleja. Los análisis de interés serán fármacos con diferente actividad biológica y sus metabolitos en muestras biomédicas, aditivos en alimentos y componentes de muestras industriales. Se pondrá énfasis en las nuevas herramientas quimiométricas basadas en datos de orden superior, que exhiben la llamada ventaja de segundo orden (es decir, el análisis de componentes calibrados en presencia de interferentes no calibrados), contribuyendo al desarrollo y análisis de la estructura de nuevos algoritmos. Se emplearán especialmente datos multidimensionales tales como matrices de excitación-emisión de luminiscencia (eventualmente acopladas a una reacción química que produzca variaciones temporales de la señal), o espectros de absorción en los que se introducirá una nueva dimensión a través de un gradiente de pH o la cinética de una reacción, y también datos espectroscópicos unidimensionales tales como espectros luminiscentes y de absorción UV-visible, infrarroja o infrarroja cercana. Las nuevas metodologías se validarán frente a técnicas cromatográficas de referencia, con el propósito de evaluar su calidad y cifras de mérito comparativas.

#### **Transferencia de Conocimientos**

- Convenio con la Empresa PASA SA y el CONICET, Resolución No. 675/00, Desarrollo de

métodos analíticos basados en la combinación de espectroscopía y quimiometría. Aplicación al análisis de cauchos, Período, 2000-2002.

- Convenio con la Empresa Petrobras Energía SA y la FCBF, Desarrollo de métodos analíticos basados en la combinación de espectroscopía y quimiometría. Aplicación al análisis de cauchos, Período: 2004-.
- Convenio con la Bolsa de Comercio de Rosario y la FCBF, Asistencia y cooperación en temas de química analítica, Período: 2006-.
- Asesoría Técnica, Calibración multivariada, Empresa minera SQM SA, Antofagasta, Chile, 2006.
- Asesoría Técnica, Calibración multivariada de primero y segundo orden, Empresa minera SQM SA, Antofagasta, Chile, 2007.
- Asesoría Técnica, Calibración multivariada, Estación Experimental Obispo Colombes, Tucumán, 2008.
- Asesoría Técnica, Calibración multivariada, FOSS Argentina SA, Rosario, 2009.
- Asesoría Técnica, Calibración multivariada, Mastellone SA, General Rodriguez, 2009.
- Capacitación en "Diseño y optimización de experimentos. Calibración multivariada.", Wiener Lab, Rosario, 10 jornadas de 4 horas c/u, julio 2016-julio 2017.
- Capacitación en "Diseño y optimización de experimentos. Calibración multivariada.", Laboratorio Industrial Farmacéutico, Santa Fe, 12 jornadas de 4 horas c/u, julio 2016-julio 2017.

#### **Cargos Administrativos y de Representación**

- Director Académico del Área Química Analítica General (1994-).
- Director del Departamento de Química Analítica, FCBF, UNR, 1990-1992 y 1996-1998, 2000-2002, 2005-2006 y 2008-2010.
- Director de la Carrera de Licenciatura en Química, FCBF, UNR, 1989-1992 y 1994-1998, y Codirector de la misma carrera, 1999.
- Miembro de la Comisión Tutorial de la carrera de Licenciatura en Química, FCBF, UNR, 1990-.
- Miembro de la Escuela de Química, FCBF, UNR, 2008-.
- Representante de la FCBF, UNR, ante el FODEQUI (Foro de Decanos de Facultades de Ciencias Químicas), 1995-1998.
- Miembro de la Comisión de Pases y Equivalencias, FCBF, UNR, 1995-1999.
- Consejero Directivo, claustro docente, FCBF, UNR, 1998-1999.
- Miembro del Consejo Ejecutivo de la Agencia Santafesina de Ciencia, Tecnología e Innovación, 2016-.

#### **Premios y Distinciones**

- Premio Luis C. Guglielmelli, Asociación Química Argentina, noviembre de 1986, a la mejor Tesis Doctoral en Química Orgánica.
- Premio Estímulo a Investigadores Jóvenes de la Asociación Prociencia de Rosario, 1995.
- Premio Rafael Labriola, Asociación Química Argentina, setiembre de 1998, a investigadores que se destaquen en la formación de discípulos y equipos de trabajo, en todos los campos de la química.
- Beca de la John Simon Guggenheim Memorial Foundation, 2001-2002.
- Premio Reinaldo Vanossi, Asociación Química Argentina, noviembre de 2001, a investigadores en química analítica.
- Premio Consagración en Química, Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, 2011.
- Fundación Konex, Diploma al mérito y premio Konex de Platino, Fisicoquímica, Química Inorgánica y Química Analítica, 2013.

#### **Otros Cargos**

- Coordinador del Taller de Enseñanza de la Química en el Ciclo Básico, Universidad Nacional de Entre Ríos, Concordia, abril de 1996.
- Especialista convocado por la Secretaría de Ciencia y Técnica del Ministerio de Educación y Justicia de la Nación para la formulación de Áreas de Vacancia y elaboración de la propuesta de la disciplina Química al Plan Nacional de Ciencia y Tecnología, julio-agosto 1998.
- Coordinador Área Química Analítica, Fisicoquímica y Química Inorgánica, Proyecto conjunto de la Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales (ANCEFN) y la Academia Nacional de Ciencias (ANC), Estado y Perspectivas de las Ciencias Exactas, Físicas y Naturales en la Argentina, 2014-2015.

#### **LISTA DE PUBLICACIONES**

##### **Datos bibliométricos**

- Índice *h*: 42, citas totales: 6208 (Fuente: SCOPUS, sin autocitas).

##### **Libros**

1. Practical three-way calibration. Olivieri, AC, Escandar, GM, Elsevier, Waltham, EEUU, 2014, ISBN 978-0-12-410408-2.
2. Introduction to multivariate calibration. A practical approach. Olivieri, AC, Springer-Nature, Berlín, 2018, ISBN 978-3-319-97096-7.

##### **Libros (edición)**

1. Data Handling in Science and Technology, Vol. 29, Fundamentals and analytical applications of multiway calibration, Muñoz de la Peña, A,

Goicoechea, HC, Escandar, GM, Olivieri, AC, Editores, Elsevier, Amsterdam, 2015.

### Capítulos de libros

- Residual dipolar coupling effects in solid state MAS NMR. Investigation of proton transfer processes in solids. Alarcón, SH, Olivieri, AC, en *Recent Advances in Analytical Techniques*, Gordon and Breach, Amsterdam, 1998, pp. 263-290.
- Solid state NMR using quadrupolar nuclei. Olivieri, AC, en *Encyclopedia of Spectroscopy and Spectrometry*, Academic Press, San Diego, 2000, pp. 2116-2127.
- Spinning sideband analysis for spin- $\frac{1}{2}$  nuclei. Harris, RK, Olivieri, AC, en *Encyclopedia of NMR Spectroscopy*, John Wiley & Sons, Chichester, 2002, Vol. 9, pp. 141-150.
- Luminescence techniques in pharmaceutical analysis. Recent advances in experimental methods and chemometric applications. Escandar, GM, Olivieri, AC, en *New Advances in Analytical Chemistry*, Taylor and Francis, Londres, 2002, Vol. 3, pp. 277-297.
- Multivariate calibration: a powerful tool in pharmaceutical analysis. Damiani, PC, Escandar, GM, Olivieri, AC, Goicoechea, HC, en *Current Pharmaceutical Analysis*, Bentham Science Publishers, Amsterdam, 2005, Vol. 1, pp. 141-154.
- Validation and error. Olivieri, AC, Faber, NM, en *Comprehensive Chemometrics*, Brown, S, Tauler, R, Walczak, B, Editores, Elsevier, Amsterdam, 2009, Vol. 3, pp. 91-120.
- Unfolded and multiway partial least-squares with residual multilinearization: fundamentals. Olivieri, AC, Escandar, GM, Goicoechea, HC, Muñoz de la Peña, A, en *Data Handling in Science and Technology*, Vol. 29, Fundamentals and analytical applications of multiway calibration, Muñoz de la Peña, A, Goicoechea, HC, Escandar, GM, Olivieri, AC, Editores, Elsevier, Amsterdam, 2015, Cap. 7, pp. 347-363, ISBN 978-0-444-63527-3.
- Unfolded and multiway partial least-squares with residual multilinearization: applications. Olivieri, AC, Escandar, GM, Goicoechea, HC, Muñoz de la Peña, A, en *Data Handling in Science and Technology*, Vol. 29, Fundamentals and analytical applications of multiway calibration, Muñoz de la Peña, A, Goicoechea, HC, Escandar, GM, Olivieri, AC, Editores, Elsevier, Amsterdam, 2015, Cap. 8, pp. 365-397.
- Figures of merit in multiway calibration. Olivieri, AC, Bortolato, S, Allegrini, F, en *Data Handling in Science and Technology*, Vol. 29, Fundamentals and analytical applications of multiway calibration, Muñoz de la Peña, A, Goicoechea, HC, Escandar, GM, Olivieri, AC, Editores, Elsevier, Amsterdam, 2015, Cap. 13, pp. 541-575.
- Data analysis. Olivieri, AC, Pisano, P, Muñoz de la Peña, A, Goicoechea, HC, en *Liquid Chromatography*, 2da. Edición, Vol. 1, Fanali, S, Haddad, PR, Poole, C, Riekkola, ML, Elsevier, Amsterdam, 2017, Cap. 21, pp. 515-531.
- Neural Networks. Allegrini, F, Olivieri, AC, en *Encyclopedia of Analytical Science*, 3ra. Edición, Elsevier, Amsterdam, 2019, pp. 487-499, ISBN 9780081019832.
- Figures of Merit. Allegrini, F, Olivieri, AC, en *Comprehensive Chemometrics*, 2da. Edición, Brown, S, Tauler, R, Walczak, B, Editores, Elsevier, Amsterdam (en prensa).
- Statistics and food quality, Lozano, VA, Olivieri, AC, Pellegrino-Vidal, R, Pisano, PL, *Comprehensive Foodomics*, Elsevier, Amsterdam (en prensa).

### Publicaciones de revisión

- Quadrupole effects transferred to the spin-1/2 magic angle spinning spectra of solids. Harris, RK, Olivieri, AC, *Progr. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.* 24 (1992) 435.
- Uncertainty estimation and figures of merit for multivariate calibration (IUPAC technical report). Olivieri, AC, Faber, NM, Ferré, J, Boqué, R, Kalivas, JH, Mark, H, *Pure & Appl. Chem.* 78 (2006) 633-661.
- A review of multivariate calibration methods applied to biomedical analysis. Escandar, GM, Damiani, PC, Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *Microchem. J.* 82 (2006) 29-42.
- Second and third-order multivariate calibration: Data, algorithms and applications. Escandar, GM, Faber, NM, Goicoechea, HC, Muñoz de la Peña, A, Olivieri, AC, Poppi, RJ, *Trends Anal. Chem.* 26 (2007) 752-765.
- Analytical advantages of multivariate data processing. One, two, three, infinity? Olivieri, AC, *Anal. Chem. (Perspectives)* 80 (2008) 5713-5720.
- Application of chemometric methods to environmental analysis of organic pollutants. Escandar, GM, Mas, S, de Juan, A, Olivieri, AC, Tauler, R, *Talanta* 80 (2010) 1052-1067.
- Second- and higher-order multivariate calibration methods applied to non multi-linear data. Advantages and limitations of the different algorithms. Olivieri, AC, Escandar, GM, Muñoz de la Peña, A, *Trends Anal. Chem.* 30 (2011) 607-617.
- Recent advances in analytical calibration with multi-way data. Olivieri, AC, *Anal. Meth.* 4 (2012) 1876-1886.
- A review on second- and third-order multivariate calibration applied to chromatographic data, Arancibia, JA, Damiani, PC, Escandar, GM, Ibañez, GA, Olivieri, AC, *J. Chromatogr. B* 910 (2012) 22-30.

10. Recent applications of first- and second-order multivariate calibration to analytical chemistry. Arancibia, JA, Damiani, PC, Ibañez, GA, Olivieri, AC, J. AOAC Int. 97 (2014) 39-49.
  11. Second- and higher-order data generation and calibration: A tutorial, Escandar, GM, Goicoechea, HC, Muñoz de la Peña, A, Olivieri, AC, Anal. Chim. Acta 806 (2014) 8-26.
  12. Recientes desarrollos en calibración analítica empleando datos instrumentales multi-vía, Olivieri, AC, Anales de la Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales 66 (2014) 5-21.
  13. Analytical figures of merit: from univariate to multiway calibration, Olivieri, AC, Chem. Rev. 114 (2014) 5358-5378.
  14. Practical guidelines for reporting results in single- and multi-component analytical calibration: A tutorial, Olivieri, AC, Anal. Chim. Acta 868 (2015) 10-22.
  15. Recent advances in analytical figures of merit: heteroscedasticity strikes back, Olivieri, AC, Allegrini, F, Anal. Meth. 9 (2017) 739-743.
  16. A road map for multi-way calibration models, Escandar, GM, Olivieri, AC, Analyst 142 (2017) 2862-2873.
  17. Chemometrics coupled to vibrational spectroscopy and spectroscopic imaging for the analysis of solid-phase pharmaceutical products: A brief review on non-destructive analytical methods, Mazivila, SJ, Olivieri, AC Trends Anal. Chem. 108 (2018) 74-87.
  18. Multi-way chromatographic calibration - A review, Escandar, GM, Olivieri, AC J. Chromatogr. A 1587 (2019) 2-13.
  19. Analytical chemistry assisted by multi-way calibration: A contribution to green chemistry, Olivieri, AC, Escandar, GM, Talanta 204 (2019) 700-712.
  20. Why should the pharmaceutical industry claim for the implementation of second-order chemometric models – A critical review, Vignaduzzo, SE, Maggio, RM Olivieri, AC, J. Pharm. Biomed. Anal. (en prensa).
- Publicaciones periódicas**
1. Stereospecific transformation of grindelic acid into the antifeedant 6 $\alpha$ -hydroxygrindelic acid, its 6 $\beta$ -epimer and other related natural diterpene acids. González Sierra, M, Olivieri, AC, Colombo, MI, Zudenigo, ME, Rúveda, EA, J. Org. Chem. 49 (1984) 4984.
  2. Stereoselective synthesis of (+)-strictanonic acid, the enantiomer of a new type of diterpenoid, isolated from *Grindelia stricta* and *Chrysanthamnus Paniculatus*. González Sierra, M, Olivieri, AC, Colombo, MI, Rúveda, EA, J. Chem. Soc. Chem. Comm. (1985) 1045.
  3. Stereoselective synthesis of the novel bisnorditerpene grindelistrictic acid, isolated from *Grindelia stricta*. Olivieri, AC, González-Sierra, M, Rúveda, EA, J. Org. Chem. 51 (1986) 2824.
  4. An extension of Beierbeck and Saunders parameters for the semiempirical calculation of <sup>13</sup>C nuclear magnetic resonance chemical shifts. The gauche- $\gamma$ (X) effect in epoxides. Colombo, MI, Bustos, DA, González Sierra, M, Olivieri, AC, Rúveda, EA, Can. J. Chem. 64 (1986) 552.
  5. A simple approach for relating molecular and structural information to the dipolar coupling <sup>13</sup>C-<sup>14</sup>N in CP/MAS NMR. Olivieri, AC, Frydman, L, Díaz, LE, J. Magn. Reson. 75 (1987) 50.
  6. Model studies for the synthesis of erigerol. Synthesis of 1-deoxy-13-epierigerol. Somoza, C, Colombo, MI, Olivieri, AC, González Sierra, M, Rúveda, EA, Synth. Commun. 17 (1987) 1727.
  7. Solid-state NMR of drugs: soluble aspirin. Díaz, LE, Frydman, L, Olivieri, AC, Frydman, B, Anal. Lett. 20 (1987) 1657-1666.
  8. Semiempirical calculation of <sup>13</sup>C NMR chemical shifts of acyclic hydrocarbons. Application to the stereochemical analysis of steroidal side chains. González Sierra, M, Bustos, DA, Olivieri, AC, Grasselli, M, Rúveda EA, Can. J. Chem. 66 (1988) 71.
  9. High-resolution solid-state <sup>13</sup>C NMR spectra of porphine and of 5,10,15,20-tetraalkylporphyrins: Implications for the N-H tautomerization process. Frydman, L, Olivieri, AC, Díaz, LE, Frydman, B, Morin, F, Mayne, CL, Grant, DM, Adler, A, J. Am. Chem. Soc. 110 (1988) 336.
  10. A variable temperature solid-state <sup>13</sup>C CPMAS NMR analysis of mesotetrapropylporphyrin and octaethylporphyrin. Frydman, L, Olivieri, AC, Díaz, LE, Valasinas, A, Frydman, B, J. Am. Chem. Soc. 110 (1988) 5651.
  11. Analysis of the <sup>13</sup>C,<sup>14</sup>N residual dipolar coupling in the <sup>13</sup>C CPMAS NMR spectra of ribonucleosides. Olivieri, AC, Frydman, L, Grasselli, M, Díaz, LE, Magn. Reson. Chem. 26 (1988) 281.
  12. Microcomputer simulation of solid-state <sup>13</sup>C NMR line-shapes affected by quadrupolar nuclei. Olivieri, AC, Frydman, L, Díaz, LE, Grasselli, M, Magn. Reson. Chem. 26 (1988) 615.
  13. Absolute stereochemistry of the novel dioxaspiro diterpenoids strictanonic and grindelistrictic acids. Stereoselective synthesis of strictanonic acid methyl ester and its C-6 epimer. González Sierra, M, Olivieri, AC, Colombo, MI, Rúveda, EA, J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1 (1989) 1393.
  14. Conformational analysis of the 4a-methyl octahydrophenanthrene system. A spectroscopic and theoretical approach. Vila, AJ, Spanevello, RA,

- Olivieri, AC, González Sierra, M, McChesney, JD, *Tetrahedron* 45 (1989) 4951.
15. Concerning the crystal structure of porphine: a proton pulsed and  $^{13}\text{C}$  CPMAS NMR study. Frydman, L, Olivieri, AC, Díaz, LE, Vega, S, Kustanovich, I, Frydman, B, *J. Am. Chem. Soc.* 111 (1989) 7001.
  16.  $^{13}\text{C}$  NMR and X-ray structure determination of 1-arylozo-2-naphthols. Intramolecular proton transfer between nitrogen and oxygen atoms in the solid state. Olivieri, AC, Wilson, R, Paul, IC, Curtin, DY, *J. Am. Chem. Soc.* 111 (1989) 5525.
  17. Self-decoupling collapse of  $^{13}\text{C},^{14}\text{N}$  residual dipolar splittings in CPMAS NMR. Olivieri, AC, *J. Magn. Reson.* 82 (1989) 342.
  18. Quadrupolar effects in the CPMAS NMR spectra of spin- $1/2$  nuclei. Olivieri, AC, *J. Magn. Reson.* 81 (1989) 201.
  19. High-resolution solid-state NMR study of 1,5 proton shifts in organic solids. Vila, AJ, Lagier, CM, Olivieri, AC, *Magn. Reson. Chem.* 28 (1990) S29.
  20. A  $^{13}\text{C}$  solid-state NMR study of the structure and dynamics of the polymorphs of sulfanilamide. Frydman, L, Olivieri, AC, Díaz, LE, Frydman, B, Schmidt, A, Vega, S, *Mol. Phys.* 70 (1990) 563.
  21. Effects of a solid proton transfer on the  $^{13}\text{C},^{14}\text{N}$  residual dipolar coupling in CPMAS NMR. Implications for the shape of the potential energy function. Olivieri, AC, *J. Chem. Soc. Perkin Trans 2* (1990) 85.
  22.  $^{13}\text{C}$  CPMAS study of the polymorphs of naphthazarin and of some methyl derivatives. Olivieri, AC, Paul, IC, Curtin, DY, *Magn. Reson. Chem.* 28 (1990) 119.
  23. A correlation between  $^{31}\text{P}$  NMR chemical shift tensors in solid phosphates and P-O bond lengths. Implications for proton transfer processes. Olivieri, AC, *J. Magn. Reson.* 88 (1990) 1.
  24. Solid-state  $^{13}\text{C}$  NMR and AM1 study of intramolecular proton transfer in 1,3-diphenyl-1,3-propanedione. Vila, AJ, Lagier, CM, Olivieri, AC, *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2* (1990) 1615.
  25. A microcomputer program for the prediction of  $^{13}\text{C}$  NMR chemical shifts in acyclic hydrocarbons using the Beierbeck and Saunders approach. Olivieri, AC, Grasselli, M, *Anal. Chim. Acta* 233 (1990) 315-319.
  26.  $^{31}\text{P}$  NMR spectra of crystalline phosphoric acid and their relation to the structure of urea phosphate. Vila, AJ, Lagier, CM, Olivieri, AC, Wagner, G, *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* (1991) 683.
  27. Proton transfer in solid 1-phenylbutane-1,3-dione and related diones as studied by  $^{13}\text{C}$  CPMAS and AM1 calculations. Vila, AJ, Lagier, CM, Olivieri, AC, *J. Phys. Chem.* 95 (1991) 5069.
  28.  $^{14}\text{N}$  effects in the  $^{29}\text{Si}$  solid-state NMR spectra of silicon nitride. Olivieri, AC, Hatfield, GR, *J. Magn. Reson.* 94 (1991) 535.
  29. Structural and  $^{14}\text{N}$  EFG information on solid imidazole by  $^{13}\text{C}$  CPMAS NMR data. Grasselli, M, Diaz, LE, Olivieri, AC, *Spectrosc. Lett.* 24 (1991) 895.
  30. C,O Atomic motion associated with solid-state proton transfer in enolic 1,3-diketones. Vila, AJ, Lagier, CM, Olivieri, AC, *J. Mol. Struct.* 274 (1992) 215.
  31. Magic-angle-spinning  $^{31}\text{P}$  NMR spectra of solid dihydrogen phosphates. Comparison of ordered and dynamically disordered compounds. Olivieri, AC, Lagier, CM, Apperley, D, Harris, RK, *Solid State NMR* 1 (1992) 205.
  32.  $^{14}\text{N}$  Quadrupole interactions in nitrogen-containing ceramics. Effects on  $^{29}\text{Si}$  NMR line shapes and structural implications. Olivieri, AC, *Z. Naturforsch.* 47a (1992) 39.
  33. Study of quadrupole-perturbed quartets in the solid-state magic angle spinning  $^{31}\text{P}$  NMR spectra of phosphine-Cu(I) complexes.  $^{63}\text{Cu}$  Electric field gradients and anisotropy in the  $^{31}\text{P},^{63}\text{Cu}$  scalar coupling. Olivieri, AC, *J. Am. Chem. Soc.* 114 (1992) 5758.
  34. A simple theoretical treatment of quadrupolar effects on magic-angle spinning solid state NMR spectra of spin- $1/2$  nuclei in the limit of large quadrupole coupling constants. Olivieri, AC, *Solid State NMR* 1 (1992) 345.
  35.  $^{13}\text{C}$  NMR spectroscopic study of the tautomeric equilibrium in *p*-phenyl substituted benzoylacetones. Cravero, RM, González-Sierra, M, Olivieri, AC, *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2* (1993) 1067.
  36. Proton transfer in rubazoic acid derivatives in solution and in the solid state. An NMR study. Olivieri, AC, Sanz, D, Claramunt, R, Elguero, J, *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2* (1993) 1597.
  37.  $^{13}\text{C}$  CPMAS NMR study of solid arylazonaphthols. Evidences of  $^{13}\text{C},^{14}\text{N}$  self-decoupling induced by a solid-state proton transfer reaction. Alarcón, SH, Olivieri, AC, Jonsen, P, *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2* (1993) 1783.
  38. Dipolar and scalar coupling in magic-angle spinning solid-state NMR spectra of spin- $1/2$  nuclei affected by quadrupolar nuclei with large quadrupole coupling constants. Olivieri, AC, *J. Magn. Reson. A* 101 (1993) 313.
  39.  $^{13}\text{C}$  CPMAS NMR spectra of solid proton-exchanging *p*-substituted benzoylacetones. Observation of  $^{13}\text{C},^{35,37}\text{Cl}$  residual dipolar coupling in the *p*-chloro derivative. Cravero, RM, González-Sierra, M, Fernández, C, Olivieri, AC, *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* (1993) 1253.
  40. Quadrupole effects of spin- $3/2$  nuclei on the solid-state MAS NMR spectra of spin- $1/2$  nuclei. Deviations from first-order theory and implications concerning the sign of the indirect coupling constant.

- Alarcón, SH, Olivieri, AC, Harris, RK, *Solid State NMR* 2 (1993) 325.
41. Total fluorescence and zero-crossing first-derivative synchronous fluorescence determination of acetylsalicylic acid metabolites in biological fluids. Damiani, P, Ibañez, G, Olivieri, AC, *Anal. Lett.* 26 (1993) 247-257.
  42. Zero-crossing first and second derivative synchronous fluorescence spectroscopic determination of aspirin metabolites in urine. Damiani, P, Ibañez, G, Olivieri, AC, *J. Pharm. Biomed. Anal.* 12 (1994) 1333-1335.
  43. Iron (III) complexes of lactobionic acid: equilibrium and structural studies in aqueous solution. Escandar, GM, Olivieri, AC, González-Sierra, M, Sala, LF, *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* (1994) 1189.
  44. Retrieval of solid state  $^{31}\text{P}$  NMR chemical shielding parameters: proposal of an approach concerning variable-temperature  $^{31}\text{P}$  NMR MAS spectra of urea phosphate and comparison of different methods. Lagier, CM, Olivieri, AC, *Solid State NMR* 3 (1994) 163.
  45.  $^{13}\text{C}$  NMR Spectroscopic and AM1 study of the intramolecular proton transfer in anils of salicylaldehyde and 2-hydroxynaphthalene-1-carbaldehyde. Alarcón, SH, González-Sierra, M, Olivieri, AC, *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2* (1994) 1067.
  46. Shifting of the keto-enol equilibrium in 1,3-diphenyl-1,3-propanedione by methyl substitution. An AM1 study. Lagier, CM, Vila, AJ, Olivieri, AC, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* 309 (1994) 59.
  47. Variable-field study of  $^{13}\text{C}$ ,  $^{35,37}\text{Cl}$  residual dipolar coupling in the  $^{13}\text{C}$  CPMAS NMR spectra of pyrazole derivatives. Olivieri, AC, López, MC, Cabildo, P, Claramunt, R, Elguero, J, *J. Phys. Chem.* 98 (1994) 5207.
  48. Effects of  $^{35}\text{Cl}/^{37}\text{Cl}$ ,  $^{13}\text{C}$  residual dipolar coupling on the variable-temperature  $^{13}\text{C}$  CP/MAS NMR spectra of solid, chlorinated sodium acetates. Alarcón, SH, Olivieri, AC, Carss, SA, Harris, RK, *Angew. Chem.* 106 (1994) 1708, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 33 (1994) 1624.
  49. Complexation of aluminum (III), gallium (III) and indium (III) ions with D-gluconic and lactobionic acids. A potentiometric and NMR spectroscopic study. Escandar, GM, Olivieri, AC, González-Sierra, M, Frutos, AA, Sala, LF, *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* (1995) 799.
  50. Tautomerism of representative aromatic  $\alpha$ -hydroxy carbaldehyde anils as studied by spectroscopic methods and AM1 calculations. Alarcón, SH, Olivieri, AC, Labadie, G, Cravero, R M, González-Sierra, M, *Tetrahedron* 51 (1995) 4619.
  51. Ground and excited-state prototropic tautomerism in anils of aromatic  $\alpha$ -hydroxy aldehydes studied by electronic absorption, fluorescence and  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR spectroscopies and semiempirical calculations. Alarcón, SH, Olivieri, AC, Labadie, G, Cravero, RM, González-Sierra, M, *J. Phys. Org. Chem.* 8 (1995) 713.
  52. Residual dipolar ( $^{35,37}\text{Cl}$ ,  $^{13}\text{C}$ ) coupling in solid sodium chloroacetates: a combined variable-temperature  $^{35}\text{Cl}$  NQR and variable-field  $^{13}\text{C}$  MAS NMR study. Alarcón, SH, Olivieri, AC, Carss, SA, Harris, RK, Zuriaga, M, Monti, G, *J. Magn. Reson. A* 116 (1995) 244.
  53.  $^{79,81}\text{Br}$  effects in the high-resolution  $^{13}\text{C}$  NMR spectra of bromoaromatic compounds. Dipolar and iso- and anisotropic indirect ( $^{79,81}\text{Br}$ ,  $^{13}\text{C}$ ) interactions studied by inverse first order theory. Alarcón, SH, Olivieri, AC, Carss, SA, Harris, RK, *Magn. Reson. Chem.* 33 (1995) 603.
  54. Second-order quadrupolar effects for directly bonded and remote  $^{13}\text{C}$ ,  $^{79,81}\text{Br}$  spin pairs in high resolution  $^{13}\text{C}$  NMR spectra of solids. Aliev, AE, Harris, KDM, Harris, RK, Carss, SA, Olivieri, AC, *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* 91 (1995) 3167.
  55. The influence of chlorine-carbon dipolar and indirect spin-spin interactions in high-resolution carbon-13 NMR spectra of chloroketosulphones in the solid state. Eichele, K, Wasylishen, RE, Grossert, JS, Olivieri, AC, *J. Phys. Chem.* 99 (1995) 10110.
  56. Rapid determination of paracetamol in blood serum samples by first-derivative UV absorption spectroscopy. Damiani, P, Ribone, ME, Olivieri, AC, *Anal. Lett.* 28 (1995) 2219-2226.
  57. Determination of three aspirin metabolites in human urine by derivative synchronous spectrofluorimetry. Damiani, P, Ibañez, G, Ribone, ME, Olivieri, AC, *Analyst* 120 (1995) 443-445.
  58. Solution and solid state proton transfer from phenols to triphenylphosphine oxide studied by  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  and  $^{31}\text{P}$  NMR spectroscopy. Lagier, CM, Scheler, U, McGeorge, G, González Sierra, M, Olivieri, AC, Harris, RK, *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2* (1996) 1325.
  59. Urea-phosphoric acid complex studied by variable-temperature  $^{31}\text{P}$  NMR and semiempirical calculations. Lagier, CM, Zuriaga, M, Monti, G, Olivieri, AC, *J. Phys. Chem. Solids* 57 (1996) 1183.
  60. Residual dipolar coupling to quadrupolar nuclei with negative gyromagnetic ratios in MAS NMR. Implications for ( $^{29}\text{Si}$ ,  $^{14}\text{N}$ ) effects in  $^{29}\text{Si}$  solid-state NMR spectra. Olivieri, AC, *Magn. Reson. Chem.* 34 (1996) 365.
  61. The effects of interplay between quadrupolar, dipolar and shielding tensors on magic-angle spinning NMR spectra: shapes of spinning sidebands. Davies, NA, Harris, RK, Olivieri, AC, *Mol. Phys.* 87 (1996) 669.
  62. Rigorous statistical analysis of errors in chemical shift tensor components obtained from spinning side bands

- in solid state NMR. Olivieri, AC, *J. Magn. Reson. A* 123 (1996) 207.
63. Solid-state electronic absorption, fluorescence and  $^{13}\text{C}$  CPMAS NMR spectroscopic study of thermo- and photo-chromic aromatic Schiff bases, Alarcón, SH, Olivieri, AC, Nordon, A, Harris, RK, *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2* (1996) 2293.
  64. Deuterium isotope effects on  $^{31}\text{P}$  NMR parameters: hydrogen bonding in a solid urea-phosphoric acid adduct. Lagier, CM, Apperley, DC, Scheler, U, Olivieri, AC, Harris, RK, *J. Chem. Soc. Faraday Trans. 92* (1996) 5047.
  65.  $^{13}\text{C}$  CP/MAS NMR of a  $^{13}\text{C}$ - $^2\text{H}$  residual dipolar coupled pair. Jonsen, P, Olivieri, AC, Tanner, SF, *Solid State NMR* 7 (1996) 121.
  66. Spectroscopic and potentiometric study of aromatic  $\alpha$ -hydroxy azo compounds and their copper(II) complexes. Ibañez, GA, Olivieri, AC, Escandar, GM, *J. Chem. Soc. Faraday Trans. 93* (1997) 545.
  67.  $^{23}\text{Cu}$ - $^{31}\text{P}$  coupling constants and  $^{63}\text{Cu}$  quadrupolar couplings from  $^{31}\text{P}$  CP/MAS spectra of copper (I)-phosphine complexes with aryldithiocarboxylates or benzoate. Asaro, F, Camus, A, Gobetto, R, Olivieri, AC, Pellizer, G, *Solid State NMR* 8 (1997) 81.
  68. Retrieving  $^{31}\text{P}$  chemical shift tensor information for dihydrogen phosphates in the presence of homonuclear  $^{31}\text{P}$ ,  $^{31}\text{P}$  dipolar coupling. Lagier, CM, Olivieri, AC, *J. Magn. Reson. A* 126 (1997) 138.
  69. Ground and excited state proton transfer in intramolecularly hydrogen bonded aromatic  $\alpha$ -hydroxy azo, aldehydes and their derivatives. Ledesma, GN, Ibañez, GA, Escandar, GM, Olivieri, AC, *J. Mol. Struct.* 415 (1997) 115.
  70. Proton transfer and Cu(II) binuclear complexes of 1,4-bis-p-sulfonylazo-2,3-dihydroxy naphthalene: a spectroscopic and potentiometric study in aqueous solution. Ibañez, GA, Olivieri, AC, Escandar, GM, *J. Mol. Struct.* 435 (1997) 199.
  71. Solid state NMR sideband shape simulations for any spinning angle and speed. First order calculation of residual dipolar coupling to quadrupolar nuclei. Olivieri, AC, *Solid State NMR*, 10 (1997) 19.
  72. Random error analysis in the determination of equilibrium constants of very stable metal complexes. Escandar, GM, Olivieri, AC, *Anal. Lett.* 30 (1997) 1967-1980.
  73. Errors in chemical shift tensor components and orientation in the molecular frame as obtained from MAS NMR spinning sideband analysis. Olivieri, AC, *Solid State NMR* 11 (1998) 181.
  74. NMR studies of proton transfer in 1:1 tris-trimethoxyphenylphosphine oxide-phenol complexes. Lagier CM, Olivieri, AC, Harris, RK, *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2* (1998) 1791.
  75. EPSILON: A versatile microcomputer program for the spectrophotometric data analysis of metal-ligand equilibria. Araujo, CL, Ibañez, GA, Ledesma, GN, Escandar, GM, Olivieri, AC, *Computers & Chem.* 22 (1998) 161-168.
  76. Spectrofluorometric determination of piroxicam. Damiani, PC, Cabezón, M, Bearzotti, M, Olivieri, AC, *J. Pharm. Biomed. Anal.* 17 (1998) 233-236.
  77. Simultaneous determination of phenobarbital and phenytoin in tablet preparations by multivariate spectrophotometric calibration. Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *Talanta* 47 (1998) 103-108.
  78. Spectroscopic and semiempirical MO study of substituent effects on the intramolecular proton transfer in anils of 2-hydroxybenzaldehydes. Alarcón, SH, Bacigaluppo, J, Pagani, D, Olivieri, AC, *J. Mol. Struct.* 475 (1999) 233.
  79. Determination of theophylline in blood serum by UV spectrophotometry and partial least-squares (PLS-1) calibration, Goicoechea, HC, Muñoz de la Peña, A, Olivieri, AC, *Anal. Chim. Acta* 384 (1999) 95-103.
  80. Simultaneous multivariate spectrophotometric analysis of paracetamol and minor components (diphenhydramine or phenylpropanolamine) in tablet preparations. Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *J. Pharm. Biomed. Anal.* 20 (1999) 255-261.
  81. Spectrofluorometric determination of diclofenac in tablets and ointments. Damiani, PC, Bearzotti, M, Cabezón, MA, Olivieri, AC, *J. Pharm. Biomed. Anal.* 20 (1999) 587-590.
  82. Simultaneous determination of rifampicin, isoniazid and pyrazinamide in tablet preparations by multivariate spectrophotometric calibration. Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *J. Pharm. Biomed. Anal.* 20 (1999) 681-686.
  83. Wavelength selection by net analyte signals calculated with the multivariate factor-based hybrid linear analysis (HLA). A theoretical and experimental comparison with partial least-squares (PLS). Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *Analyst* 124 (1999) 725-731.
  84. Simultaneous multivariate spectrophotometric analysis of binary and ternary mixtures of sulfamethoxazole, trimethoprim and phenazopyridine in tablets. Ribone, ME, Pagani, AP, Olivieri, AC, *Anal. Lett.* 32 (1999) 1389-1401.
  85. Determination of bromhexine in cough-cold syrups by absorption spectrophotometry and multivariate calibration using partial least-squares and hybrid linear analyses. Application of a novel method of wavelength selection. Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *Talanta* 49 (1999) 793-800.
  86. Simultaneous determination of timolol maleate and pilocarpine hydrochloride in ophthalmic solutions by first derivative UV spectrophotometry and PLS-



- 1 multivariate calibration. Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *Anal. Lett.* 32 (1999) 2019-2033.
87. Enhanced synchronous spectrofluorometric determination of tetracycline in blood serum by chemometric analysis. Comparison of partial least-squares and hybrid linear analysis calibrations. Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *Anal. Chem.* 19 (1999) 4361-4368.
  88. Cu(II), Ni(II), Co(II) and Zn(II) coordination properties and tautomerism of 1,8-bis-p-phenylazo-2,7-dihydroxy naphthalene. A spectroscopic and semiempirical AM1/PM3 study. Arancibia, JA, Olivieri, AC, Escandar, GM, *J. Mol. Struct.* 522 (2000) 233.
  89. Determination of the minor component bromhexine in cotrimoxazole-containing tablets by absorption spectrophotometry and partial least-squares (PLS-1) multivariate calibration. Ribone, ME, Pagani, AP, Olivieri, AC, *J. Pharm. Biomed. Anal.* 23 (2000) 591-595.
  90. Simultaneous spectrophotometric-multivariate calibration determination of several components of ophthalmic solutions: phenylephrine, chloramphenicol, antipyrine, methylparaben and thimerosal. Collado, MS, Mantovani, VE, Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *Talanta* 52 (2000) 909-920.
  91. Spectrofluorimetric determination of phenylephrine in the presence of a large excess of paracetamol. Arancibia, JA, Nepote, JA, Escandar, GM, Olivieri, AC, *Anal. Chim. Acta* 419 (2000) 159-168.
  92. MULTIVAR. A program for multivariate calibration incorporating net analyte signal calculations. Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *Trends Anal. Chem.* 19 (2000) 599-605.
  93. A comparison of orthogonal signal correction and net analyte preprocessing methods. Theoretical and experimental study. Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 56 (2001) 73-81.
  94. Simultaneous determination of nicotinamide and inosine in ophthalmic solutions by UV spectrophotometry and PLS-1 multivariate calibration. Collado, MS, Mantovani, VE, Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *Anal. Lett.* 34 (2001) 363-376.
  95. Simultaneous spectrofluorometric determination of oxatamide and phenylephrine in the presence of a large excess of paracetamol. Nepote, JA, Olivieri, AC, *Anal. Chim. Acta* 439 (2001) 87-94.
  96. Sustained prediction ability of net analyte methods using reduced calibration sets. Spectrophotometric determination of multicomponent pharmaceutical solutions. Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *Analyst* 126 (2001) 1105-1112.
  97. Simultaneous multivariate spectrophotometric analysis of ear drops containing a ternary mixture of antipyrine, sulfathiazole and rivanol. Ribone, ME, Pagani, AP, Olivieri, AC, *Anal. Lett.* 34 (2001) 2077-2088.
  98. Net analyte preprocessing: a new and versatile multivariate calibration technique. Analysis of mixtures of rubber antioxidants by NIR spectroscopy. Boschetti, CE, Olivieri, AC, *J. NIR Spectrosc.* 9 (2001) 245-254.
  99. Proton transfer and coordination properties of aromatic  $\alpha$ -hydroxy hydrazones. Ibañez, GA, Escandar, GM, Olivieri, AC, *J. Mol. Struct.* 605 (2002) 17.
  100. Chemometric assisted simultaneous spectrophotometric determination of four-component nasal solutions with a reduced number of calibration samples. Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *Anal. Chim. Acta* 453 (2002) 289-300.
  101. A simple approach to uncertainty propagation in preprocessed multivariate calibration. Olivieri, AC, *J. Chemometr.* 16 (2002) 207-217.
  102. Near-infrared spectroscopic determination of antioxidants and organic acids in rubbers assisted by a new multivariate calibration method based on direct orthogonalization. Rodríguez, D, Boschetti, CE, Olivieri, AC, *Analyst* 127 (2002) 304-309.
  103. Comparative study of net analyte signal based methods and partial least squares for the simultaneous determination of amoxicillin and clavulanic acid by stopped-flow kinetic analysis. Muñoz de la Peña, A, Espinosa-Mansilla, A, Acedo Valenzuela, MI, Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *Anal. Chim. Acta* 463 (2002) 75-88.
  104. Direct and simultaneous spectrofluorometric determination of naproxen and salicylate in human serum assisted by chemometric analysis. Damiani, P, Borraccetti, M., Olivieri, AC, *Anal. Chim. Acta* 471 (2002) 87-96.
  105. Complementary use of partial least-squares and artificial neural networks for the non-linear spectrophotometric analysis of pharmaceutical samples. Goicoechea, HC, Collado, MS, Satuf, ML, Olivieri, AC, *Anal. Bioanal. Chem.* 374 (2002) 460-465.
  106. First- and second-order multivariate calibration applied to biological samples: determination of anti-inflammatories in serum and urine. Arancibia, JA, Olivieri, AC, Escandar, GM, *Anal. Bioanal. Chem.* 374 (2002) 451-459.
  107. Wavelength selection for multivariate calibration using a genetic algorithm: a novel initialization strategy. Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *J. Chem. Inf. Comp. Sci.* 42 (2002) 1146-1153.
  108. Chemometrics assisted spectroscopic determination of vitamin B6, vitamin B12 and dexamethasone in injectables. Nepote, AJ, Damiani, PC, Olivieri, AC, *J. Pharm. Biomed. Anal.* 31 (2003) 621-627.

109. Solid-liquid extraction room-temperature phosphorimetry and pattern recognition for screening polycyclic aromatic hydrocarbons and polychlorinated biphenyls in water samples. Arruda, AF, Goicochea, HC, Santos, M, Campiglia, AD, Olivieri, AC, *Environm. Sci. Technol.* 7 (2003) 1385-1391.
110. Interference-free analysis using three-way fluorescence data and the parallel factor model. Determination of fluoroquinolone antibiotics in human serum. Muñoz de la Peña, A, Espinosa Mansilla, A, González Gómez, D, Olivieri, AC, Goicochea, HC, *Anal. Chem.* 75 (2003) 2640-2646.
111. Development and validation of chemometrics-assisted spectrophotometry and micellar electrokinetic chromatography for the determination of four-component pharmaceuticals. Nepote, AJ, Vera-Candiotti, L, Williner, MR, Damiani, PC, Olivieri, AC, *Anal. Chim. Acta* 489 (2003) 77-84.
112. A new family of genetic algorithms for wavelength interval selection in multivariate analytical spectroscopy. Goicochea, HC, Olivieri, AC, *J. Chemometr.* 17 (2003) 338-345.
113. Ground and excited-state intramolecular proton transfer in 3,5-dibromosalicylic acid. Ibañez, GA, Labadié, G, Escandar, GM, Olivieri, AC, *J. Mol. Struct.* 645 (2003) 61.
114. Substituent and solvent effects on the proton transfer equilibrium in anils and azo derivatives of naphthol. Multinuclear NMR study and theoretical calculations. Alarcón, SH, Olivieri, AC, Sanz, D, Claramunt, RM, Elguero, J, *J. Mol. Struct.* 705 (2004) 1.
115. Standard error of prediction in parallel factor (PARAFAC) analysis of three-way data. Olivieri, AC, Faber, NM, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 70 (2004) 75-82.
116. Two multivariate strategies applied to three-way kinetic spectrophotometric data for the determination of mixtures of the pesticides carbaryl and chlorpyrifos. Espinosa-Mansilla, A, Muñoz de la Peña, A, Goicochea, HC, Olivieri, AC, *Appl. Spectrosc.* 58 (2004) 83-90.
117. Fast spectrophotometric determination of fluoride in ground waters by flow injection using partial least-squares calibration. Arancibia, JA, Rullo, A, Olivieri, AC, Di Nezio, S, Pistonesi, M, Lista, A, Fernández Band, BS, *Anal. Chim. Acta* 512 (2004) 157-163.
118. A test field for the second-order advantage in bilinear least-squares and parallel factor analyses: fluorescence determination of ciprofloxacin in human urine. Damiani, PC, Nepote, AJ, Bearzotti, M, Olivieri, AC, *Anal. Chem.* 76 (2004) 2798-2806.
119. A new method for the determination of benzoic and sorbic acids in commercial orange juices based on second-order spectrophotometric data generated by a pH gradient flow injection technique. Marsili, NR, Lista, A, Fernández Band, BS, Goicochea, HC, Olivieri, AC, *J. Agric. Food. Chem.* 52 (2004) 2479-2484.
120. A new genetic algorithm applied to the near-infrared analysis of gasolines. Boschetti, CE, Olivieri, AC, *J. NIR Spectrosc.* 12 (2004) 85-91.
121. MVC1: An integrated Matlab toolbox for first-order multivariate calibration. Olivieri, AC, Goicochea, HC, Iñón, FA, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 73 (2004) 189-197.
122. Second-order advantage achieved with four-way fluorescence excitation-emission-kinetic data processed by parallel factor analysis and trilinear least-squares. Determination of methotrexate and leucovorin in human urine. Olivieri, AC, Arancibia, JA, Muñoz de la Peña, A, Durán-Merás, I, Espinosa Mansilla, A, *Anal. Chem.* 76 (2004) 5657-5666.
123. Simultaneous determination of levodopa and benserazide by stopped-flow injection analysis and three-way multivariate calibration of kinetic-spectrophotometric data. Pistonesi, M, Centurión, ME, Fernández Band, BS, Damiani, PC, Olivieri, AC, *J. Pharm. Biomed. Anal.* 36 (2004) 541-547.
124. Sample-specific standard prediction errors in three-way parallel factor analysis (PARAFAC) exploiting the second-order advantage. Olivieri, AC, *J. Chemometr.* 18 (2004) 363-371.
125. Artificial neural networks study of the catalytic reduction of resazurin. Stopped flow injection kinetic spectrophotometric determination of Cu(II) and Ni(II). Magni, DM, Olivieri, AC, Bonivardi, A, *Anal. Chim. Acta* 528 (2005) 275-284.
126. Four-way data coupled to parallel factor model applied to environmental analysis: determination of 2,3,7,8-tetrachloro-dibenzo-para-dioxin in highly contaminated waters by solid-liquid extraction laser-excited time-resolved Shpol'skii spectroscopy. Goicochea, HC, Yu, S, Olivieri, AC, Campiglia, AD, *Anal. Chem.* 77, 2608-2616 (2005).
127. Design and optimization of a chemometrics-assisted spectrophotometric method for the simultaneous determination of levodopa and carbidopa in pharmaceutical products. Damiani, PC, Moschetti, AC, Rovetto, AJ, Benavente, F, Olivieri, AC, *Anal. Chim. Acta* 543 (2005) 192-198.
128. A new robust bilinear least-squares method for the analysis of spectral-pH matrix data. Goicochea,

- HC, Olivieri, AC, *Appl. Spectrosc.* 59 (2005) 926-933.
129. Computing sensitivity and selectivity in parallel factor analysis and related multi-way techniques: the need for further developments in net analyte signal theory. Olivieri, AC, *Anal. Chem.* 77 (2005) 4936-4946.
  130. Evaluation of complex spectral-pH three-way arrays by modified bilinear least-squares: determination of four different dyes in interfering systems. Marsili, NR, Lista, A, Fernández Band, BS, Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *Analyst* 130 (2005) 1291-1298.
  131. Application of partial least-squares spectrophotometric multivariate calibration to the determination of 2-sec-butyl-4,6-dinitrophenol (dinoseb) and 2,6-dinitro-p-cresol in industrial and water samples containing hydrocarbons. Arancibia, JA, Martínez Delfa, G, Boschetti, CE, Escandar, GM, Olivieri, AC, *Anal. Chim. Acta* 553 (2005) 141-147.
  132. On a versatile second-order multivariate calibration method based on partial least-squares and residual bilinearization. Second-order advantage and precision properties. Olivieri, AC, *J. Chemometr.* 19 (2005) 253-265.
  133. A closed-form expression for computing the sensitivity in second-order bilinear calibration. Olivieri, AC, Faber, NM, *J. Chemometr.* 19 (2005) 583-592.
  134. A combined artificial neural network/residual bilinearization approach for obtaining the second-order advantage from three-way non-linear data. Olivieri, AC, *J. Chemometr.* 19 (2005) 615-624.
  135. Trilinear least-squares and unfolded-PLS coupled to residual trilinearization: new chemometric tools for the analysis of four-way instrumental data. Arancibia, JA, Olivieri, AC, Bohoyo Gil, D, Muñoz de la Peña, A, Durán-Merás, I, Espinosa Mansilla, A, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 80 (2006) 77-86.
  136. Sensitivity and prediction error for spectroscopic bilinear least-squares exploiting the second-order advantage. Theoretical and experimental study. Haimovich, A, Orselli, R, Escandar, GM, Olivieri, AC, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 80 (2006) 99-108.
  137. Second-order calibration of excitation-emission matrix fluorescence spectra for the determination of N-phenylanthranilic acid derivatives. Muñoz de la Peña, A, Espinosa Mansilla, A, Mora Díez, N, Bohoyo Gil, D, Olivieri, AC, Escandar, GM, *Appl. Spectrosc.* 60 (2006) 330-338.
  138. Simultaneous determination of flufenamic and meclofenamic acids in human urine samples by second-order multivariate calibration of micellar-enhanced excitation-emission fluorescence data. Muñoz de la Peña, A, Mora Díez, N, Bohoyo Gil, D, Olivieri, AC, Escandar, GM, *Anal. Chim. Acta* 569 (2006) 250-259.
  139. Evaluation of partial least-squares with second-order advantage for the multi-way spectroscopic analysis of complex biological samples in the presence of analyte-background interactions. Culzoni, MJ, Goicoechea, HC, Pagani, AP, Cabezón, MA, Olivieri, AC, *Analyst* 131 (2006) 718-723.
  140. Estimation of the composition of recombinant human erythropoietin mixtures using capillary electrophoresis and multivariate calibration methods. Benavente, F, Gimenez, E, Olivieri, AC, Barbosa, J, Sanz-Nebot, V, *Electrophoresis* 27 (2006) 4008-4015.
  141. Second-order advantage achieved by unfolded-partial least-squares/residual bilinearization modelling of excitation-emission fluorescence data presenting inner filter effects. Bohoyo Gil, D, Muñoz de la Peña, A, Arancibia, JA, Escandar, GM, Olivieri, AC, *Anal. Chem.* 78 (2006) 8051-8058.
  142. Different strategies for the direct determination of amoxicillin in human urine by second-order multivariate analysis of kinetic-spectrophotometric data. García-Reiriz, A, Damiani, PC, Olivieri, AC, *Talanta* 71 (2007) 806-815.
  143. Analysis of amoxicillin in human urine by photo-activated generation of fluorescence excitation-emission matrices and artificial neural networks combined with residual bilinearization. García-Reiriz, A, Damiani, PC, Olivieri, AC, *Anal. Chim. Acta* 588 (2007) 192-199.
  144. Determination of pesticides and metabolites in wine samples by HPLC-DAD and second-order calibration methods. Braga, JWB, Bottoli, CBG, Jardim, ISCF, Goicoechea, HC, Olivieri, AC, Poppi, RJ, *J. Chromatogr. A* 1148 (2007) 200-210.
  145. Simultaneous multiresponse optimization applied to epinastine determination in human serum by using capillary electrophoresis. Vera-Candioti, L, Olivieri, AC, Goicoechea, HC, *Anal. Chim. Acta* 595 (2007) 310-318.
  146. Experimental study of non-linear second-order analytical data with focus on the second-order advantage. Culzoni, MJ, Damiani, PC, García-Reiriz, A, Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *Analyst* 132 (2007) 654-663.
  147. Improvement of residual bilinearization by particle swarm optimization for achieving the second-order advantage with unfolded partial least-squares. Bortolato, SA, Arancibia, JA, Escandar, GM, Olivieri, AC, *J. Chemometr.* 21 (2007) 557-566.
  148. Multi-way partial least-squares coupled to residual trilinearization: a genuine multi-dimensional tool for the study of third-order data. Simultaneous

- analysis of procaine and its metabolite p-amino benzoic acid in equine serum. Damiani, PC, Durán-Merás, I, García-Reiriz, A, Jiménez-Girón, A, Muñoz de la Peña, A, Olivieri, AC, *Anal. Chem.* 79 (2007) 6949-6958.
149. Photoinduced fluorimetric determination of folic acid and 5-methyltetrahydrofolic acid in serum using the kinetic evolution of the emission spectra accomplished with multivariate second-order calibration methods. Jiménez Girón, A, Durán Merás, I, Muñoz de la Peña, A, Espinosa Mansilla, A, Cañada-Cañada, F, Olivieri, AC, *Anal. Bioanal. Chem.* 391 (2008) 827-835.
  150. A versatile strategy for achieving the second-order advantage when applying different artificial neural networks to non-linear second-order data: unfolded principal component analysis/residual bilinearization. García-Reiriz, A, Damiani, PC, Culzoni, MJ, Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 92 (2008) 61-70.
  151. Three-way partial least-squares/residual bilinearization study of second-order lanthanide-sensitized luminescence excitation-time decay data. Analysis of benzoic acid in beverage samples. Lozano, VA, Ibañez, GA, Olivieri, AC, *Anal. Chim. Acta* 610 (2008) 186-195.
  152. Second-order advantage from kinetic-spectroscopic data matrices in the presence of extreme spectral overlapping. A multivariate curve resolution - alternating least-squares approach. Culzoni, MJ, Goicoechea, HC, Ibañez, GA, Lozano, VA, Marsili, NR, Olivieri, AC, Pagani, AP, *Anal. Chim. Acta* 614 (2008) 46-57.
  153. Screening of oil samples on the basis of excitation-emission room-temperature phosphorescence data and multi-way chemometric techniques. Introducing the second-order advantage in a classification study. Arancibia, JA, Boschetti, CE, Olivieri, AC, Escandar, GM, *Anal. Chem.* 80 (2008) 2789-2798.
  154. Determination of folic acid and its two main metabolites in serum by on line photochemically induced excitation-emission-kinetic four-way data. Jiménez Girón, A, Durán-Merás, I, Espinosa-Mansilla, A, Muñoz de la Peña, A, Cañada-Cañada, F, Olivieri, AC, *Anal. Chim. Acta* 622 (2008) 94-103.
  155. A multiway approach for classification and characterization of rabbit liver apothioneins by CE-ESI-MS. Benavente, F, Andón, B, Giménez, E, Olivieri, AC, Barbosa, J, Sanz-Nebot, V, *Electrophoresis* 29 (2008) 4355-4367.
  156. Non-linear four-way kinetic-excitation-emission fluorescence data processed by a variant of parallel factor analysis and by a neural network model achieving the second-order advantage: malonaldehyde determination in olive oil samples. García-Reiriz, A, Damiani, PC, Olivieri, AC, Cañada-Cañada, F, Muñoz de la Peña, A, *Anal. Chem.* 80 (2008) 7248-7256.
  157. Chemometric resolution of fully overlapped capillary electrophoresis peaks: quantitation of carbamazepine in human serum in the presence of several interferences. Vera-Candioti, L, Culzoni, MJ, Olivieri, AC, Goicoechea, HC, *Electrophoresis* 29 (2008) 4527-4537.
  158. Multiresponse optimization of the properties of albendazole-chitosan microparticles. Leonardi, D, Lamas, MC, Olivieri, AC, *J. Pharm. Biomed. Anal.* 48 (2008) 802-807.
  159. Multiple Response Optimization of Styrene-Butadiene Rubber Emulsion Polymerization. Martinez Delfa, G, Olivieri, AC, Boschetti, CE, *Comp. Chem. Eng.* 33 (2009) 850-856.
  160. Development of novel formulations for Chagas' disease. Optimization of benznidazol chitosan microparticles based on artificial neural networks. Leonardi, D, Lamas, MC, Salomón, CJ, Olivieri, AC, *Int. J. Pharm.* 367 (2009) 140-147.
  161. Standard addition analysis of fluoroquinolones in human serum in the presence of the interferent salicylate using lanthanide-sensitized excitation-time decay luminescence data and multivariate curve resolution. Lozano, VA, Tauler, R, Ibañez, GA, Olivieri, AC, *Talanta* 77 (2009) 1715-1723.
  162. Nitrate determination in Chilean Caliche samples by UV-visible absorbance measurements and multivariate calibration. Bravo, M, Olivieri, AC, Oelckers, B, *J. Chilean Chem. Soc.* 53 (2009) 93-98.
  163. Principal component analysis - adaptive neuro-fuzzy inference systems (ANFIS) for the simultaneous spectrophotometric determination of three metals in water samples. Goodarzi, M, Olivieri, AC, Freitas, MP, *Spectrochim. Acta A* 73 (2009) 608-614.
  164. MVC2: a MATLAB graphical interface toolbox for second-order multivariate calibration. Olivieri, AC, Wu, H-L, Yu, R-Q, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 96 (2009) 246-251.
  165. Second-order multivariate calibration procedures applied to high-performance liquid chromatography coupled to fast-scanning fluorescence detection for the determination of fluoroquinolones. Cañada-Cañada, F, Arancibia, JA, Escandar, GM, Ibañez, GA, Espinosa Mansilla, A, Muñoz de la Peña, A, Olivieri, AC, *J. Chromatogr. A* 1219 (2009) 4868-4876.
  166. When unfolding is better: unique success of unfolded partial least-squares regression with residual bilinearization for the processing of spectral-pH data with strong spectral overlapping.

- Analysis of fluoroquinolones in human urine based on flow-injection pH-modulated synchronous fluorescence data matrices. Borraccetti, MD, Damiani, PC, Olivieri, AC, *Analyst* 134 (2009) 1682-1691.
167. A novel second-order standard addition analytical method based on data processing with multidimensional partial least-squares and residual bilinearization. Lozano, VA, Ibañez, GA, Olivieri, AC, *Anal. Chim. Acta* 651 (2009) 165-172.
168. Residual bilinearization combined with kernel-unfolded partial least-squares: a new technique for processing non-linear second-order data achieving the second-order advantage. García-Reiriz, A, Damiani, PC, Olivieri, AC, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 100 (2010) 127-135.
169. Time-alignment of bidimensional chromatograms in the presence of uncalibrated interferences using parallel factor analysis. Application to multi-component determinations using liquid-chromatography with spectrofluorimetric detection. Bortolato, SA, Arancibia, JA, Escandar, GM, Olivieri, AC, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 101 (2010) 30-37.
170. Discrimination of the aroma pattern emitted by an encapsulated essence along time by using electronic noses and chemometric analysis. Rodriguez, SD, Monge, ME, Olivieri, AC, Negri, RM, Bernik, DL, *Food Res. Int.* 43 (2010) 797-804.
171. Application of the correlation constrained multivariate curve resolution alternating least-squares method for analyte quantitation in the presence of unexpected interferences using first-order instrumental data. Goicoechea, HC, Olivieri, AC, Tauler, R, *Analyst* 135 (2010) 636-642.
172. Flow injection system for the on-line preconcentration of Pb by cloud point extraction coupled to USN-ICP OES. Gil, RA, Salonia, JA, Gásquez, JA, Olivieri, AC, Olsina, R, Martinez, LD, *Microchem. J.* 95 (2010) 306-310.
173. The effect of factor interactions in Plackett-Burman experimental designs. Comparison of Bayesian-Gibbs analysis and genetic algorithms. Magallanes, JF, Olivieri, AC, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 102 (2010) 8-14.
174. Development of a novel strategy for preconcentration of antibiotic residues in milk and their quantitation by capillary electrophoresis. Vera-Candioti, L, Olivieri, AC, Goicoechea, HC, *Talanta* 82 (2010) 213-221.
175. Visible/near infrared - partial least-squares analysis of Brix in sugar cane juice. A test field for variable selection methods. Sorol, N, Arancibia, E, Bortolato, SA, Olivieri, AC, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 102 (2010) 100-109.
176. *In vivo* evaluation of albendazole microspheres for the treatment of *Toxocara canis* larva migrans. Barrera, MG, Leonardi, D, Bolmaro, RE, Echenique, CG, Olivieri, AC, Salomon, CJ, Lamas, MC, *Eur. J. Pharm. Biopharm.* 75 (2010) 451-454.
177. Second-order analyte quantitation under identical profiles in one data dimension. A dependency-adapted partial least-squares/residual bilinearization method. Lozano, VA, Ibañez, GA, Olivieri, AC, *Anal. Chem.* 82 (2010) 4510-4519.
178. Simultaneous voltammetric determination of levodopa, carbidopa and benserazide in pharmaceuticals using multivariate calibration. Zapata-Urzuá, C, Pérez-Ortiz, M, Bravo, M, Olivieri, AC, Álvarez-Lueje, A, *Talanta* 82 (2010) 962-968.
179. Four-way kinetic-excitation-emission fluorescence data processed by multi-way algorithms. Determination of carbaryl and 1-naphthol in water samples in the presence of fluorescent interferences. Maggio, RM, Damiani, PC, Olivieri, AC, *Anal. Chim. Acta* 677 (2010) 97-107.
180. Multivariate curve resolution analysis of pesticides in water samples from liquid chromatographic - diode array data. Maggio, RM, Damiani, PC, Olivieri, AC, *Talanta* 80 (2011) 1173-1180.
181. A new and efficient variable selection algorithm based on ant colony optimization. Applications to near infrared spectroscopy / partial least-squares analysis. Allegrini, F, Olivieri, AC, *Anal. Chim. Acta* 699 (2011) 18-25.
182. Unfolded partial least-squares with residual quadrilinearization: a new multivariate algorithm for processing five-way data achieving the second-order advantage. Application to fourth-order excitation-emission-kinetic-pH fluorescence analytical data. Maggio, RM, Muñoz de la Peña, A, Olivieri, AC, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 109 (2011) 178-185.
183. Comparison of the predictive ability of several second-order multivariate methods in the simultaneous determination of two therapeutic drugs in human urine. Hurtado Sánchez, MC, Durán Merás, I, Rodríguez Cáceres, MI, Jiménez Girón, A, Olivieri, AC, *Talanta* 88 (2012) 609-616.
184. New developments for the sensitivity estimation in four-way calibration with the quadri-linear parallel factor model. Olivieri, AC, Faber, K, *Anal. Chem.* 84 (2012) 186-193.
185. MVC3: a MATLAB graphical interface toolbox for third-order multivariate calibration. Olivieri, AC, Wu, HL, Yu, RQ, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 116 (2012) 9-16.
186. Determination of enantiomeric composition of ibuprofen in pharmaceutical formulations by partial least-squares regression of strongly overlapped

- chromatographic profiles. Osorio Grisales, J, Arancibia, JA, Castells, CB, Olivieri, AC, J. Chromatogr. B 910 (2012) 78-83.
187. Uncovering interactions in Plackett-Burman screening designs applied to analytical systems. A Monte Carlo ant colony optimization approach. Olivieri, AC, Magallanes, JF, Talanta 97 (2012) 242-248.
  188. A sensitivity equation for quantitative analysis with multivariate curve resolution - alternating least-squares. Theoretical and experimental approach. Bauza, CM, Ibañez, GA, Tauler, R, Olivieri, AC, Anal. Chem. 84 (2012) 8697-8706.
  189. Analytical figures of merit for partial least-squares coupled to residual multi-linearization. Allegrini, FA, Olivieri, AC, Anal. Chem. 84 (2012) 10823-10830.
  190. Determination of tributyltin at parts-per-trillion levels in natural waters by second-order multivariate calibration and fluorescence spectroscopy. Bravo M, Aguilar, F, Quiroz, W, Olivieri, AC, Escandar, GM, Microchem. J. 106 (2013) 95-101.
  191. Feasibility of the determination of polycyclic aromatic hydrocarbons in edible oils via unfolded partial least-squares/residual bilinearization and parallel factor analysis of fluorescence excitation emission matrices. Alarcón, F, Báez, ME, Bravo, M, Richter, P, Escandar, GM, Olivieri, AC, Fuentes, E, Talanta 103 (2013) 361-370.
  192. Design, characterization, and *in vitro* evaluation of antifungal polymeric films. Real, DA, Martínez, MV, Frattini, A, Soazo, M, Luque, AG, Biasoli, MS, Salomon, CJ, Olivieri, AC, Leonardi, D. AAPS PharmSciTech 14 (2013) 64-73.
  193. Excitation-emission matrices applied to the study of urban effluent discharges in the Chubut River (Patagonia, Argentina). Chiarandini Fiore, JP, Scapini, MC, Olivieri, AC, Environ. Monit. Assess. 185 (2013) 6909-6919.
  194. An integrated approach to the simultaneous selection of variables, mathematical pre-processing and calibration samples in partial least-squares multivariate calibration. Allegrini, F, Olivieri, AC, Talanta 115 (2013) 755-760.
  195. Optimization of the hydrolysis of lignocellulosic residues by using radial basis functions modeling and particle swarm optimization. Giordano, PC, Beccaria, AJ, Goicoechea, HC, Olivieri, AC, Biochem. Eng. J. 80 (2013) 1-9.
  196. Chemometric modeling of organic contaminant sources in surface waters of a mediterranean river basin. García-Reiriz, AG, Olivieri, AC, Teixidó, E, Ginebreda, A, Tauler, R. Environ. Sci. Processes Impacts 16 (2014) 124-134.
  197. Second-order advantage obtained from standard addition first-order instrumental data and multivariate curve resolution-alternating least squares. Calculation of the feasible bands of results. Mohseni, N, Bahram, M, Olivieri, AV, Farhadi, K, Spectrochim. Acta A 122 (2014) 721-730.
  198. Exploration of liquid chromatographic-diode array data for Argentinean wines by extended multivariate curve resolution. Pisano, P, Silva, MF, Olivieri, AC, Chemom. Intell. Lab. Syst. 132 (2014) 1-7.
  199. Determination of five pesticides in juice, fruit and vegetable samples by means of liquid chromatography combined with multivariate curve resolution. Boeris, V, Arancibia, JA, Olivieri, AC, Anal. Chim. Acta 814 (2014) 23-30.
  200. Chemometric processing of second-order liquid chromatographic data with UV-visible and fluorescence detection. A comparison of multivariate curve resolution and parallel factor analysis 2. Bortolato, SA, Olivieri, AC, Anal. Chim. Acta 842 (2014) 11-19.
  201. IUPAC-consistent approach to the limit of detection in partial least-squares calibration. Allegrini, FA, Olivieri, AC, Anal. Chem. 86 (2014) 7858-7866.
  202. Spray drying formulation of albendazole microspheres by experimental design. In vitro-in vivo studies. García, A, Leonardi, D, Piccirilli, GN, Mamprin, ME, Olivieri, AC, Lamas, MC, Drug Dev. Ind. Pharm. 41 (2015) 244-252.
  203. A new modeling strategy for third-order fast high-performance liquid chromatographic data with fluorescence detection. Quantitation of fluoroquinolones in water samples, Alcaráz, MR, Bortolato, SA, Goicoechea, HC, Olivieri, AC, Anal. Bioanal. Chem. 407 (2015) 1999-2011.
  204. Novel augmented parallel factor model for four-way calibration of high-performance liquid chromatography-fluorescence excitation-emission data, Bortolato, SA, Lozano, VA, Muñoz de la Peña, A, Olivieri, AC, Chemom. Intell. Lab. Syst. 141 (2015) 1-11.
  205. Anthocyanins as markers for the classification of Argentinean wines according to botanical and geographical origin. Chemometric modelling of liquid chromatography-mass spectrometry data, Pisano, PL, Silva, MF, Olivieri, AC, Food Chem. 175 (2015) 174-180.
  206. Scope of partial least-squares regression applied to the enantiomeric composition determination of ketoprofen from strongly overlapped chromatographic profiles. Padró, JM, Osorio-Grisales, J, Arancibia, JA, Olivieri, AC, Castells, CB, J. Sep. Sci. 38 (2015) 2423-2430.
  207. Discriminant analysis of *Annona muricata* and *Rollinia mucosa* extracts by multivariate curve

- resolution and partial least-squares regression of liquid chromatography-diode array data. Afonso, S, Pisano, P, Silva, F, Scarminio, I, Olivieri, AC, J. Braz. Chem. Soc. 26 (2015) 2241-2248.
208. A novel application of nylon membranes for tributyltin determination in complex environmental samples by fluorescence spectroscopy and multivariate calibration. Bravo, MA, Escandar, GM, Olivieri, AC, Bardin, E, Aguilar, LF, Quiroz, W, Chemom. Intell. Lab. Syst. 148 (2015) 77-84.
  209. Generalized error-dependent prediction uncertainty in multivariate calibration. Allegrini, F, Wentzell, PD, Olivieri, AC, Anal. Chim. Acta 903 (2016) 51-60.
  210. Chemometric modeling of kinetic-fluorescent third-order data for thiamine determination in multivitamin complexes. Fragoso, WD, Olivieri, AC, Microchem. J. 128 (2016) 42-46.
  211. A new and consistent parameter for measuring the quality of multivariate analytical methods: generalized analytical sensitivity. Fragoso, W, Allegrini, F, Olivieri, AC, Anal. Chim. Acta 933 (2016) 43-49.
  212. Regression models based on new local strategies for near infrared spectroscopic data, Allegrini, F, Fernández Pierna, JA, Fragoso, WD, Olivieri, AC, Baeten, V, Dardenne, P, Anal. Chim. Acta 933 (2016) 50-58.
  213. Sensitivity, prediction uncertainty, and detection limit for artificial neural network calibrations. Allegrini, F, Olivieri, AC, Anal. Chem. 88 (2016) 7807-7812.
  214. Enantiomeric analysis of overlapped chromatographic profiles in the presence of interferences. Determination of ibuprofen in a pharmaceutical formulation containing homatropine. Padró, JM, Osorio-Grisales, J, Arancibia, JA, Olivieri, AC, Castells, CB, J. Chromatogr. A 1467 (2016) 255-260.
  215. Multi-way figures of merit in the presence of heteroscedastic and correlated instrumental noise: unfolded partial least-squares with residual multilinearization, Allegrini, F, Olivieri, AC, Chemom. Intell. Lab. Syst. 158 (2016) 200-209.
  216. A systematic study on the effect of noise and shift on multivariate figures of merit of second-order calibration algorithms, Ahmadvand, M, Parastar, H, Sereshti, H, Olivieri, AC, Tauler, R, Anal. Chim. Acta 952 (2017) 18-31.
  217. Multivariate curve resolution applied to kinetic-spectroscopic data matrices: Dye determination in foods by means of enzymatic oxidation. Boeris, V, Arancibia, JA, Olivieri, AC, Talanta 169 (2017) 189-194.
  218. Maximum likelihood unfolded principal component regression with residual bilinearization (MLU-PCR/RBL) for second-order multivariate calibration, Batista Braga, JW, Allegrini, F, Olivieri, AC, Chemom. Intell. Lab. Syst. 170 (2017) 51-57.
  219. SRO\_ANN: An integrated MatLab toolbox for multiple surface response optimization using radial basis functions, Giordano, PC, Goicoechea, HC, Olivieri, AC, Chemom. Intell. Lab. Syst. 171 (2017) 198-206.
  220. The effect of data matrix augmentation and constraints in extended multivariate curve resolution-alternating least squares. Olivieri, AC, Tauler, R. J. Chemometr. 31 (2017) e2875.
  221. MVC3\_GUI: a MATLAB graphical user interface for third-order multivariate calibration. An upgrade including new multi-way models. Mazivila, SJ, Bortolato, SA, Olivieri, AC, Chemom. Intell. Lab. Syst. 173 (2018) 21-29.
  222. The effect of constraints on the analytical figures of merit achieved by extended multivariate curve resolution-alternating least-squares. Pellegrino Vidal, RB, Allegrini, F, Olivieri, AC, Anal. Chim. Acta 1003 (2018) 10-15.
  223. Phenolic profiling of grapes, fermenting samples and wines using UV-visible spectroscopy and chemometrics. Alexandre-Tudo, JL, Nieuwoudt, H, Olivieri, AC, Alexandre, JL, du Toit, W, Food Control 85 (2018) 11-22.
  224. Error covariance penalized regression: a novel multivariate model combining penalized regression with multivariate error structure. Allegrini, F, Braga, JWB, Moreira, ACO, Olivieri, AC, Anal. Chim. Acta 1011 (2018) 20-27.
  225. Quantifying the prediction error in analytical multivariate curve resolution studies of multicomponent systems. Pellegrino Vidal, R, Olivieri, AC, Tauler, R, Anal. Chem. 90 (2018) 7040-7047.
  226. A strategy to obtain accurate analytical solutions in second-order multivariate calibration with curve resolution methods, Ghaffari, M, Olivieri, AC, Abdollahi, H, Anal. Chem. 90 (2018) 9725-9733.
  227. Structural analysis of natural deep eutectic solvents. Theoretical and experimental study, Pisano, PL, Espino, M, Fernández, MA, Silva, MF, Olivieri, AC, Microchem. J. 143 (2018) 252-258.
  228. Online third-order liquid chromatographic data with native and photoinduced fluorescence detection for the quantitation of organic pollutants in environmental water, Pellegrino Vidal, RB, Olivieri, AC, Ibañez, GA, Escandar, GM, ACS Omega 3 (2018) 15771-15779.
  229. Comparative chemometric analysis of fluorescence and near infrared spectroscopies for authenticity confirmation and geographical origin of Argentinean extra virgin olive oils, Jiménez-

- Carvelo, AM, Lozano, VA, Olivieri, AC, *Food Control* 96 (2019) 22-28.
230. Classification of olive oils according to their cultivars based on second-order data using LC-DAD, Jiménez-Carvelo, AM, Cruz, CM, Olivieri, AC, González-Casado, A, Cuadros-Rodríguez, L, *Talanta* 195 (2019) 69-76.
231. Second-order multivariate calibration with the extended bilinear model: effect of initialization, constraints and composition of the calibration set on the extent of rotational ambiguity, Olivieri, AC, *J. Chemometr.* (2109) e3130.
232. Contribution to second-order calibration based on multivariate curve resolution with and without previous chromatographic synchronization, Pellegrino Vidal, RB, Olivieri, AC, *Anal. Chim. Acta* 1078 (2019) 8-15.
233. EEM\_corr: An integrated MatLab toolbox for scattering correction in fluorescence landscapes, Chiappini, FA, Alcaraz, MR, Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 193 (2019) 103810.
234. Partial least-squares for complex numbers applied to the treatment of electrochemical impedance spectroscopy data, Rodrigues, DR, Olivieri, AC, Frago, WD, Lemos, SG, *Anal. Chim. Acta* 1080 (2019) 1-11. Portada de la revista.
235. Interpretation of matrix chromatographic-spectral data modelling with parallel factor analysis 2 and multivariate curve resolution, Anzardi, MB, Arancibia, JA, Olivieri, AC, *J. Chromatogr. A* 1604 (2019) 460502.
236. On second-order calibration based on multivariate curve resolution in the presence of highly overlapped profiles, Alcaraza, MR, Culzonia, MJ, Ibañez, GA, Lozano, VA, Olivieri, AC, *Anal. Chim. Acta* (en prensa).