

Informe de actividades del año 2000

1. - PUBLICACIONES

1) The role of the local-multiplicative Kohn-Sham potential on the description of occupied and unoccupied orbitals

Jorge Garza, Jeffrey A. Nichols and David A. Dixon

J. Chem. Phys. 113, 6029 (2000)

2) Shell Structure and Confined Atoms Using the Density Functional Theory

Jorge Garza, Rubicelia Vargas, Alberto Vela y K. D. Sen

J. Mol. Struct. (Theochem) **501**, 183(2000)

3) Conformational Analysis of N, N, N',N'-tetramethylsuccinamide: The role of C-H....O hydrogen bond

Rubicelia Vargas, Jorge Garza, David A. Dixon y Benjamin P. Hay

J. Phys. Chem A **104**, 5115(2000)

4) How Strong is the C²-H...O=C Hydrogen Bond?

Rubicelia Vargas, Jorge Garza, David A. Dixon y Benjamin P. Hay

J. Am. Chem. Soc. **122**, 4750(2000)

5) Atomic Ionization Radii using Janak's Theorem

K. D. Sen, Jorge Garza, Rubicelia Vargas y Alberto Vela

Chem. Phys. Lett. **325**, 29(2000)

6) Si las vacas se mueren, ¿qué podemos hacer?

Ana Martínez y Rubicelia Vargas

Educación Química, **11**, no. 3, 355(2000)

7) Quantum mechanical tunneling through barriers

A Cedillo

J. Chem. Educ. **77**, 528 (2000)

8) An atoms-in-molecules partitioning of a molecular density

A Cedillo, PK Chattaraj and RG Parr

Int. J. Quantum Chem. **77**, 403-407 (2000)

9) The Hartree product and the description of local and global quantities in atomic systems:

A study within Kohn-Sham theory

Jorge Garza, Jeffrey A. Nichols and David A. Dixon

J. Chem. Phys. 112, 1150 (2000)

10) The optimized effective potential and the self-interaction correction in density functional theory: Application to molecules

Jorge Garza, Jeffrey A. Nichols and David A. Dixon
J. Chem. Phys. 112, 7880 (2000)

2. - PROFESORES VISITANTES

1) Kali Das Sen
Universidad de Hyderabad
Proyecto de Intercambio México – India, CONACYT
Mayo y junio del 2000

2) Renato Contreras Ramos
Universidad de Chile
Catedra Patrimonial Nivel II, CONACYT
Noviembre del 1999 a septiembre del 2000

Enero del 2001