

Informe de actividades del año 2001

1. - PUBLICACIONES

- 1) Rafael Herrera, Arumugam Nagarajan, Miguel A. Morales, Francisco Méndez, Hugo A. Jiménez-Vázquez, L. Gerardo Zepeda and Joaquín Tamariz
Regio-and Stereoselectivity of Captodative Olefins in 1,3-Dipolar Cycloadditions. A DFT/HSAB Theory Rationale for the Observed Regiochemistry of Nitrones
J. Org. Chem. **66**, 1252-1263 (2001).
- 2) Jorge Garza, Rubicelia Vargas, Jeffrey A. Nichols and David A. Dixon.
Orbital energy analysis with respect to LDA and self-interaction corrected exchange-only potentials.
J. Chem. Phys. **114**, 639 (2001).
- 3) Rubicelia Vargas, Jorge Garza, David A. Dixon and Benjamin P. Hay.
C(sp²)-C(Aryl) bond rotation barrier in N-methylbenzamide.
J. Phys. Chem A **105**, 774(2001).
- 4) Rubicelia Vargas, Jorge Garza, Friesner, R. A., Stern, H., Benjamin P. Hay, David A. Dixon.
Strength of the N-H...O=C and C-H...O=C Bonds in Formamide and N-Methylacetamide Dimers.
J. Phys. Chem. A **105**, 4963 (2001).
- 5) Rubicelia Vargas, Jorge Garza, David A. Dixon and Benjamin P. Hay.
Conformational analysis of N-benzylformamide.
J. Mol. Struc. (THEOCHEM) **541**, 243 (2001).
- 6) Benjamin P. Hay, David A. Dixon, Rubicelia Vargas, Jorge Garza, and Kenneth N. Raymond
Structural Criteria for the Rational Design of Selective Ligands. 3. Quantitative Structure-Stability Relationship for Iron(III) Complexation by Tris-Catecholamide Siderophores.
Inorg. Chem. **40**, 3922 (2001).
- 7) Ana Martínez Vázquez y Rubicelia Vargas Fosada
Química en Acción 2 (Secundaria)
Santillana, México D. F., 2001. ISBN: 979-642-727-9

2. - PROFESORES VISITANTES

1) Badhín Gómez Valdés
Universidad de Chile
Proyecto de Intercambio México – Chile, CONACYT
Mayo-Julio del 2001

2) Juan Carlos Santos
Universidad de Chile
Catedra Patrimonial Nivel II, CONACYT
Septiembre-Diciembre del 2001

3) Miguel Angel García Garibay
Universidad de California en Los Angeles
Proyecto de Intercambio México-USA, CONACYT
Diciembre del 2001

Enero del 2002