

Informe de actividades del año 2002

1. - PUBLICACIONES

1) A Aizman, R Contreras, Marcelo Galván, Andrés Cedillo, E Chamorro and JC Santos

Markovnikov regioselectivity rule in the light of site activation models

J. Phys. Chem. A **106** 7844-7849 (2002)

2) Rubicelia Vargas, Andrés Cedillo, Jorge Garza, Marcelo Galván

Reactivity criteria in spin polarized density functional theory

En *Reviews in Modern Quantum Chemistry*, K.D. Sen (Ed.)

ISBN 981-02-4889-X, pp 936-965

World Scientific, Singapore (2002)

3) Felipe Aparicio Platas, Jorge Garza, Andrés Cedillo, Marcelo Galván, Rubicelia Vargas

The local multiplicative potential of the self interaction corrected approximation

En *Reviews in Modern Quantum Chemistry*, K.D. Sen (Ed.)

ISBN 981-02-4889-X, pp 755-786

World Scientific, Singapore (2002)

4) A Banerjee, KD Sen, Jorge Garza, Rubicelia Vargas

Mean excitation energy, static polarizability, and hyperpolarizability of the spherically confined hydrogen atom

J. Chem. Phys. **116**, 4054-4057 (2002)

5) KD Sen, Jorge Garza, Rubicelia Vargas and N Aquino

Static dipole polarizability of shell-confined hydrogen atom

Phys. Lett. A **295**, 299 (2002)

6) Rubicelia Vargas, Jorge Garza, BP Hay and DA Dixon

Conformational study of the alanine dipeptide at the MP2 and DFT levels

J. Phys. Chem. A **106**, 3213 (2002)

7) Jorge Garza, CA Fahlstrom, Rubicelia Vargas, JA Nichols and DA Dixon

Orbitals from molecular orbital and density functional theories for ionic systems

En *Reviews in Modern Quantum Chemistry*, K.D. Sen (Ed.)

ISBN 981-02-4889-X

World Scientific, Singapore (2002)

Aceptados

1) Felipe Aparicio Platas, J Ireta, Arturo Rojo, L Escobar, Andrés Cedillo and Marcelo Galván

On the existence of electronic states confined by charged groups in proteins

J. Phys. Chem. A

2) J Ireta, Felipe Aparicio Platas, Margarita Viniegra y Marcelo Galván

The role of the protons and the electrostatic potential in the reactivity of the (110) sulfated zirconia surface

J. Phys. Chem B

3) J Ireta, J Neugebauer, M Scheffler y Marcelo Galván

Density-functional theory study of the cooperativity of hydrogen-bonds in finite and infinite alpha-helices.

J. Phys. Chem. B

4) IM Gómez, Ignacio González, FJ González, Rubicelia Vargas, Jorge Garza

The association of neutral systems linked by hydrogen bond interactions: A quantitative electrochemical approach

Electrochem. Comm.

5) Felix Galindo y Francisco Méndez Ruiz

Determinación de la energía de activación para la reacción $H+H_2$ mediante el cálculo de superficies de energía potencial.

Rev. Mex. Fís.

2. - PROFESORES VISITANTES E INVITADOS

1) Patricio Fuentealba

Universidad de Chile

Proyecto de Intercambio México – Chile, CONACYT

Enero del 2002

2) Jenny Janet Zevallos Dávila

Pontificia Universidad Católica de Chile

Proyecto de Intercambio México – Chile, CONACYT

Enero-Febrero del 2002

3) Edoardo Apra

Pacific Northwestern National Laboratory

Proyecto de Investigación de CONACYT

Enero-Febrero del 2002

4) Miguel Angel García Garibay
Universidad de California en Los Angeles
Proyecto de Intercambio México-USA, CONACYT
Abril del 2002

5) Jaime Henríquez Román
Universidad de Santiago de Chile
Proyecto de Intercambio México – Chile, CONACYT
Octubre-Diciembre del 2002

3. - EVENTOS ORGANIZADOS POR EL AREA

1) Curso: Química Cuántica Computacional
UAM-I
Septiembre 2002

2) 1a Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica
Cuernavaca, Mor.
Diciembre 2002

Enero del 2003