

Informe de Actividades del 2003

1. Artículos

Publicados

- 1) F. Aparicio, J. Ireta, A. Rojo, L. Escobar, A. Cedillo and M. Galván (*)
On the existence of electronic states confined by charged groups in proteins.
J. Phys. Chem. B 107 [7] 1692-1697 (2003).
- 2) M. H. Matus, R. Contreras, A. Cedillo and M. Galván.
Wave function instabilities in the cis-trans isomerization and singlet-triplet energy gaps in a push-pull compound.
J. Chem. Phys. 119 [8] 4112-4116 (2003).
- 3) F. Aparicio, R. Contreras, M. Galván and A. Cedillo.
Global and local reactivity and activation patterns of HOOX (X=H, NO₂, CO₂⁻, SO₃⁻) peroxides with solvents effects.
J. Phys. Chem. A 107 [47] 10098-10104 (2003).
- 4) Ireta, J.; Aparicio, F.; Viniegra, M.; Galván M. (*)
The role of the Protons and the Electrostatic Potential in the Reactivity of the (110) Sulfated Zirconia Surface.
J. Phys. Chem. B 107 [3], 811-818, 2003.
- 5) Ireta, J.; Neugebauer, J.; Scheffler, M.; Rojo, A., Galván, M. (*)
Density Functional Theory Study of the Cooperativity of Hydrogen Bonds in Finite and Infinite α -Helices.
J. Phys. Chem. B 107 [6] 1432-1437 (2003).
- 6) Melin, J.; Aparicio, F.; Galván, M.; Fuentealba, P.; Contreras, R.
Chemical Reactivity in the (N, Ns, v(r)) space.
J. Phys. Chem. A 107 [19], 3831-3835, (2003).
- 7) M. Gómez, I. González, F. J. González, R. Vargas, and J. Garza.(*)
The association of neutral systems linked by hydrogen bond interactions: A quantitative electrochemical approach.
Electrochemistry Communications 5, 12-15 (2003).
- 8) J. Garza, R. Vargas, M. Gómez, I. González, and F. J. González.
Theoretical and electrochemical study of the quinone-benzoic acid adduct linked by hydrogen bonds.
J. Phys. Chem. A 107 [50], 11161-11168 (2003).
- 9) María de Lourdes Romero and Francisco Méndez
Is the Hydrogen Charge Representative of the p-Substituted Phenol Acidity?
J. Phys. Chem. A, 107 [22], 4526-4530 (2003).
- 10) María de Lourdes Romero and Francisco Méndez.
The Local HSAB Principle and Bond Dissociation Energy of p-Substituted Phenol.
J. Phys. Chem. A, 107 [30], 5874-5875 (2003).
- 11) Angel Mañanes, Fernando Duke, Francisco Méndez, María José López and Julio A. Alonso.
Analysis of the Bonding and Reactivity of H and the Al₁₃ Cluster Using Density Functional Concepts.

J. Chem. Phys., 119 [10], 5128-5141 (2003).

Docencia

- 1) Felix Galindo y Francisco Méndez
Determinación de la Energía de Activación para la Reacción $H+H_2$ Mediante el Cálculo de Superficies de Energía Potencial
Revista Mexicana de Física, 49, 264-270 (2003).

Material didáctico

- 1) F. Aparicio, R. Vargas y A. Cedillo.
Carta descriptiva y manual de prácticas.
Actividades experimentales para el curso de Química, Curso selectivo para alumnos de la Licenciatura en Química de la UAM-I

Libros

- 1) Ana Martínez Vázquez y Rubicelia Vargas.
Química 2 (Secundaria).
Editorial Santillana, 2003.
- 2) Mauricio Castro y Rubicelia Vargas.
Química 3 (Secundaria).
Editorial Santillana, 2003

2. Alumnos graduados

- 1) Proyecto Terminal
Licenciatura en Química, DCBI, UAM-I
Álvaro Vázquez Mayagoitia

3. Profesores visitantes e invitados

1. Eduardo Chamorro
Universidad Nacional André Bello, CHILE.
Julio-Agosto del 2003.
2. Pratim K. Chatteraj
Indian Institute of Technology. INDIA.
Septiembre del 2003-Agosto del 2004.
3. Paul W. Ayers
MacMaster University, CANADA.
Noviembre del 2003.
4. Badhín Gómez
Proyecto de Investigación de CONACYT.
Enero-Marzo del 2003.
5. Junia Melín.
Proyecto de Investigación de CONACYT.
Junio-Diciembre del 2003.

4. Eventos organizados

- 1) Curso: Química Cuántica Computacional
UAM-I
Septiembre 2003.
- 2) 2a Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica
Guanajuato, Gto.
Noviembre 2003.
- 3) Fundamentos y aplicaciones de la Teoría de Funcionales de la Densidad.
UAMI
Noviembre 2003.