

Informe de actividades del 2004

1. Artículos

Publicados

- 1) J. Melin, F. Aparicio, V. Subramanian, M. Galvan, P.K. Chattaraj
Is the fukui function a right descriptor of hard-hard interactions?
J. Phys. Chem. A, **108**, 2487 (2004).
- 2) Myrna H. Matus, J. Garza and M. Galvan
Basis set effects on frontier molecular energies and energy gaps: A comparative study between plane waves and localized basis functions in molecular systems
J. Chem. Phys. **120**, 10359-10363 (2004).
- 3) Balderas-Hernandez P., Rojas-Hernandez, A., Galvan, M. Ramirez-Silva M.T
Spectrophotometric study of the system Hg(II)-thymol-blue-H₂O and its evidence through electrochemical means.
Spectrochim Acta **A60** (3), 569-577 (2004)
- 4) Jorge Garza, Rubicelia Vargas, Martín Gómez, Ignacio González and Felipe J. González
Theoretical and Electrochemical Study of the Quinone-Benzoic Acid adduct linked by Hydrogen Bonds.
J. Phys. Chem. A **107**, 11161-11168 (2003).
- 5) Benjamin P. Hay, Maciej Gutowski, David A. Dixon, Jorge Garza, Rubicelia Vargas, and Bruce A. Moyer.
Structural Criteria for the Rational Design of Selective Ligands: Convergent Hydrogen Bonding Sites for the Nitrate Anion.
J. Am. Chem. Soc. **126**, 7925-7934 (2004).
- 6) Pablo López and Francisco Méndez
Fukui Function as a Descriptor of the Imidazolium Protonated Cation Resonance Structure.
Organic Lett. **6** (2004), 1781-1783.

Aceptados

- 1) Jorge Garza, José-Zeferino Ramírez and Rubicelia Vargas.
The role of Hartree-Fock and Kohn-Sham orbitals in the basis set superposition error for systems linked by hydrogen bonds.
The Journal of Physical Chemistry A. En prensa.

Libros Publicados

Docencia

- 1) A Cedillo
Curso de química cuántica
www.fqt.izt.uam.mx/Profes/ACO/notas.html, 2004, no. de registro en el Registro Público del Derecho de Autor: 03-2004-090809513300-01
- 2) A Cedillo
Manual de prácticas para el curso de química computacional
www.fqt.izt.uam.mx/Profes/ACO/qcomp_n.pdf, 2004, no. de registro en el Registro Público del Derecho de Autor: 03-2004-090709521900-01

2. Alumnos graduados

- 1) Proyecto terminal

Licenciatura en química, UAM-I
Alejandra Monserrat Navarrete López.
Graduada en julio 2004

- 4) Tesis de doctorado
Posgrado en Química, UAM-I
Felipe Aparicio Platas
Graduado en julio de 2004
- 5) Tesis de doctorado
Posgrado en Química, UAM-I
Myrna H. Matus
Graduada en julio de 2004
- 6) Tesis de doctorado
Posgrado en Química, UAM-I
Pablo López Albarrán
Graduado en diciembre de 2004.

3. Profesores visitantes e invitados

- 1) Pratim K. Chattaraj
Indian Institute of Technology
CONACYT
Septiembre de 2003 a agosto de 2004

4. Eventos organizados

- 1) 3ª Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica
Puebla, PUE
Noviembre del 2004
- 2) Curso: Química Cuántica Computacional
UAM-I
Septiembre del 2004