17/12/2025

Currículum Vitae

Nombre:	Joel Ireta Moreno.
Posición:	Profesor Titular C en el Departamento de Química de la Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa.
SNI:	Nivel 2.
Teléfono oficina:	55 58 04 64 13.
Correo electrónico:	iret@xanum.uam.mx

Formación

1987-1992:	Licenciado en Química, Universidad de Guanajuato, México.
1993-1995:	Maestría en Química, Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa, México.
1995-1999:	Doctorado en Química, Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa. México.
2000-2001:	Posdoctorado, Instituto Fritz-Haber de la Sociedad Max Planck, Alemania.

Área de Investigación

Estudio teórico-computacional de propiedades de la materia usando, primordialmente, teoría de los funcionales de la densidad, dinámica molecular (dm), inteligencia artificial (ia) y cómputo de alto desempeño. En particular, se aplican metodologías diseñadas para calcular la estructura electrónica de sólidos en combinación con dm e ia al estudio de propiedades asociadas con interacciones no covalentes en péptidos y proteínas, a la predicción de polimorfismo en cristales moleculares, al análisis de la reactividad de óxidos e hidróxidos metálicos etc..

Experiencia profesional

Auxiliar técnico en el laboratorio de química de coordinación de la maestría en química de la facultad de química de la Universidad de Guanajuato de 1990 a 1991. Jefe de desarrollo de producto y control de calidad de la empresa Solder de México en 1992. Investigador invitado de la Sociedad Max-Planck, Instituto Fritz-Haber, Alemania del 2001 al 2007. Profesor de tiempo completo en la UAM-Iztapalapa del 2007 a la fecha. Coordinador académico del laboratorio de supercómputo y visualización en paralelo de la UAM-Iztapalapa del 2013 a la fecha.

Resumen de la producción académica:

40 artículos publicados en revistas indexadas de circulación internacional y un capítulo de libro. Tres tesis de doctorado, cuatro de maestría y cuatro de licenciatura dirigidas y concluidas.

Artículos publicados

1. F. Adasme-Carreño, C. Muñoz-Gutiérrez, M. Bedolla, J. Ireta *From Infinite Helices to β Sheets: Structural Insights from Electronic Structure Calculations* J. Chem. Theory Comput. 21, 11783-11795 (2025).
2. B. Gutiérrez, J. Ireta *On the quest for understanding hydrogen bonding effects and its nature* J. Mex. Chem. Soc. 69, 344-354 (2025).
3. J. Carmona-Espíndola, A. Flores, J. Ireta, J. L. Gázquez *Charge-transfer through the dipole moment* J. Chem. Phys. 161, 234109 (2024).
4. J. Bautista-Renedo, J. Ireta *Spurious proton transfer in hydrogen bonded dimers* Phys. Chem. Chem. Phys. 26, 21468-21475 (2024).
5. G. Castro, J. Cruz-Borbolla, M. Galván, A. Guevara-García, J. Ireta, M. H. Matus, A. Meneses-Viveros, L. I. Perea-Ramírez, M. Pescador-Rojas *Hydrodesulfurization of dibenzothiophene: a machine learning approach* ChemistryOpen e202400062 (2024).
6. F. Adasme-Carreño, A. Ochoa-Calle, M. Galván, J. Ireta *Conformational preferences of dipeptide zwitterions in aqueous solvent* Phys. Chem. Chem. Phys. 26, 8210-8218 (2024).
7. C. Muñoz-Gutiérrez, F. Adasme-Carreño, J. Alzate-Morales, J. Ireta *Effect of strand register in the stability and reactivity of crystals from peptides forming amyloid fibrils*

Phys. Chem. Chem. Phys. 25, 23885-23893 (2023).
8. G. Castro, J. S. Valente, M. Galván, J. Ireta *Activated layered double hydroxides: assessing the surface anion basicity and its connection with the catalytic activity in the cyanoethylation of alcohols* Phys. Chem. Chem. Phys. 24, 23507-23516 (2022)
9. J. M. del Campo, J. Ireta *Understanding the unusual stiffness of hydrophobic dipeptide crystals* Phys. Chem. Chem. Phys. 23, 11931-11936 (2021).
10. F. Adasme-Carreño, J. Caballero, J. Ireta *PSIQUE: Protein Secondary Structure Identification on the Basis of Quaternions and Electronic Structure Calculations* J. Chem. Inf. Model. 61, 1789-1800 (2021).
11. C. Cuautli, J. S. Valente, J. C. Conesa, M. V. Ganduglia-Pirovano, J. Ireta *Theoretical Study of the Catalytic Performance of Activated Layered Double Hydroxides in the Cyanoethylation of Alcohols* J. Phys. Chem. C 123, 14, 8777-8784 (2019).
12. J. M. Bautista-Renedo, H. Reyes-Pérez, E. Cuevas-Yáñez, C. Barrera-Díaz, N. González-Rivas, J. Ireta, *Hydrogen bonding capabilities of group 14 homolegues of HCN and HNC* RSC Adv. **9**, 5937-5941 (2019).
13. N. E. González-Díaz, R. López-Rendón, J. Ireta, *Insight into the dipeptide self-assembly process using density functional theory*, J. Phys. Chem. C **123**, 2526-2532 (2019).
14. G. Nieto-Malagón, C. Cuautli, J. Ireta*, Interlaminar anionic transport in layered doublé hydroxides: estimation of diffusion coefficients*, J. Phys. Chem. C **122**, 171-176 (2018).
15. F. Adasme-Carreño, J. Alzate-Morales, J. Ireta, *Modeling cooperative effects in halogen-bonded infinite linear chains*, Phys. Chem. Chem. Phys. **19**, 18539-18538 (2017).
16. J. Nochebuena, C. Cuautli, J. Ireta, *Origin of cooperativity in hydrogen bonding*, Phys. Chem. Chem. Phys. **19**, 15256-15263 (2017).
17. J. Ireta, *Polyalanine alpha-helix microsolvation: assessing the energy of the peptide desolvation penalti with density functional theory*, Theor Chem. Acc. **135**, 220 (2016).
18. J. Nochebuena, A. Ramírez, J. Ireta, *On the van der Waals interactions and stability of polypeptide chains in helical conformations*, Int. J. Quantum Chem. **115**, 1613 (2015).
19. J. Nochebuena, J. Ireta, *On cooperative effects and aggregation of GNNQQNY and NNQQNY peptides*, J. Chem. Phys. 143, 135103 (2015).
20. C. Cuautli, J. Ireta, *Theoretical investigations on the layer-anion interaction in Mg-Al layered double hydroxides:Influence of the anion nature and layer composition*, J. Phys. Chem. **142**, 094704 (2015).
21. A. Guevara-García, J. Ireta, M. Galván, *Sensing polarization effects through the analysis of the effective C6 dispersion coefficients in NaCl solutions*, J. Phys. Chem. **142**, 014504 (2015).

22. J. Ireta, *Microsolvation effects on the stability of polyalanine in extended and polyproline II conformation*, Int. J. Quantum Chem. **112**, 3612 (2012).
23. F. Aparicio, N. González-Rivas, J. Irerta, A. Rojo, L.I. Escobar, A. Cedillo, M. Galván, *Soft-soft interactions in the protein-protein recognition process: the K+ channel-charybdotoxin case*, Int. J. Quantum Chem. **112**, 3618 (2012).
24. J. Ireta, *Micorsolvation effect on the twist of* β*-sheets*, J. Chem. Theory Comput. **7**, 2630 (2011).
25. L. Ismer, J. Ireta, J. Neugebauer, *A density functional theory based estimation of the anharmonic contributions to the free energy of a polypeptide helix*, J. Chem. Phys. **135**, 084122 (2011).
26. Tkatchenko, M. Rossi, V. Blum, J. Ireta, M. Scheffler, *Unraveling the Stability of Polypeptide Helices: Critical Role of van der Waals Interactions*, Phys. Rev. Lett **106**, 118102 (2011).
27. J. Ireta, M. Scheffler, *Density functional theory study of the conformational space of an infinitely long polypeptide chain*, J. Chem. Phys. **131**, 085104 (2009).
28. E. Penev, J. Ireta, J.-E. Shea, *Energetics of infinite homopolypeptide chains: a new look at commonly used force fields,* J. Phys. Chem. B**112**, 6872-6877 (2008).
29. L. Ismer, J. Ireta, J. Neugebauer, *First principles free energy analysis of helix stability: The origin of the low entropy in* π*-helices*, J. Phys. Chem. B **112**, 4109-4112 (2008).
30. I. De Gortari, M. Galván, J. Ireta, M. Segall, C. J. Pickard, M. Payne, *Theoretical investigations of oxygen-17 NMR chemical shifts to discriminate among helical forms,* J. Phys. Chem. A **111**, 13099-13105 (2007).
31. Ireta, J. Neugebauer, M. Scheffler, A. Rojo, M. Galván, *Structural transitions in the polyalanine alpha-helix under uniaxial strain ,* J. Am. Chem. Soc. **49***,* 17241-17244 (2005).
32. Ismer, J. Ireta, S. Boeck, J. Neugebauer, *Phonon spectra and thermodynamic properties of the infinite polyalanine* α *helix: A density-functional-theory-based harmonic vibrational analysis,* Phys. Rev. E **71***,* 031911 (2005).
33. J. Ireta, J. Neugebauer, M. Scheffler, *On the accuracy of DFT for describing hydrogen bonds: dependence on the bond directionality,* J. Phys. Chem. A **108**, 5692-5698 (2004).
34. J. Ireta, J. Neugebauer, M. Scheffler, A. Rojo, M. Galván, *Density-functional theory study of the co-operativity of hydrogen bonds in finite and infinite* α*-helices,* in additions and corrections J. Phys. Chem. B **107**, 9616 (2003).
35. J. Ireta, J. Neugebauer, M. Scheffler, A. Rojo, M. Galván, *Density-functional theory study of the co-operativity of hydrogen bonds in finite and infinite* α*-helices,* J. Phys.

Chem. B **107**, 1432-1437 (2003).
36. F. Aparicio, J. Ireta, A. Rojo, L. Escobar, A. Cedillo, M. Galván, *On the existence of electronic states confined by charge groups in proteins*, J. Phys. Chem. B **107**, 1692-1697 (2003).
37. J. Ireta, F. Aparicio, M. Viniegra, M. Galván, *The role of the protons and the electrostatic potential in the reactivity of the (110) sulfated zirconia surface,* J. Phys. Chem. B **107**, 811-818 (2003).
38. J. Ireta, M. Galván, K. Cho, J.D. Joannopoulos, *Local reactivity of charybdotoxin, a K+ channel blocker,* J. Am. Chem. Soc. **120**, 9771-9778 (1998).
39. J. Ireta, M. Galván, *Plane waves basis sets in the description of diatomic anions and valence charge density,* J. Chem. Phys. **105**, 8231-8236 (1996).
40. G. Mendoza-Díaz, J. Ireta-Moreno, *Synthesis and characterization of zinc mixed complexes with nalidixate anion and (N-N) donors,* J. Inorg. Biochem. **54**, 235-246 (1994).

Capítulos en libros

1. M. Galván, J. Ireta, *Impacto y perspectivas del estudio de la estructura electrónica de proteínas* en el libro "La Física Biológica en México: Temas Selectos", Coordinadores L. García-Colín Scherer, L. Dagdug, P. Miramontes y A. Rojo, El colegio nacional, México, 279-298 (2006).

Supervisión de tesis (concluidas)

1. Director de la tesis de la licenciatura en química de Felipe Aparicio Platas. facultad de ciencias químicas de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (1998).

2. 2. Co-director de la tesis de diploma en física (equivalente a maestria) "Performance of the PBE functional in the description of proton barriers", de Lars Ismer, Universidad técnica de Berlín, Berlín Alemania (2001).

3. Co-director de la tesis de doctorado en física "Vibrational modes and thermodynamic properties of the secondary structure of proteins: A DFT-GGA based analysis", de Lars Ismer, Universidad de Paderborn, Paderborn Alemania (2008).

4. Co-director de la tesis de la maestría en química “Análisis de cambios conformacionales de polipéptidos y proteínas”, de Cicerón Ayala Orozco, departamento de química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa (2009).

5. Director de la tesis de la licenciatura en química “Estudio teórico de hidrotalcita usando potenciales ultrasuaves y ondas planas proyectadas”, de Cristina Cuautli Mejía, facultad de ciencias químicas de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (2010).

6. Director de la tesis de la maestría en química “Estudio teórico de la estructura del material tipo hidrotalcita Mg/Al-OH”, de Cristina Cuautli Mejía, departamento de química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa (2011).

7. Director de la tesis del doctorado en química “Estudio teórico de la formación de fibras amiloides”, de Jorge Alberto Nochebuena Hernández, departamento de química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa (2015).

8. Director de la tesis del doctorado en química “Estudio teórico de materiales tipo hidrotalcita Mg/Al-X (X=OH^-, Cl^-), Cristina Cuautli Mejía, departamento de química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa (2016).

9. Directo de proyecto terminal (licenciatura) “Cálculo de energía libre para desensamblar el dipéptido Alanina-Valina”, de Angel Martín Macías Preza, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Depto. de Química (2021).

10. Director de proyecto terminal (licenciatura) “Polimorfismo en cristales de moléculas orgánicas”, de Javier Camargo Díaz, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Depto de Química (2021).

11. Director de proyecto terminal (licenciatura) “Obtención de energía libre para desensamblar una unidad del agregado de dipéptidos de Fenilalanina-Fenilalanina”, de Sergio Arturo Domínguez Quezada, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Depto. de Química (2021).

12. Director de la tesis de la maestría en química “Análisis configuracional de cristales moleculares empleando cuaterniones duales”, de Hazel Uriel Vázquez Hernández, departamento de química, Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa

(2023).