Diciembre de 2025.

CURRICULUM VITAE

DATOS PERSONALES

1. Nombre: Marcelo Enrique Galván Espinosa

2. Correo Electrónico: mgalvan@xanum.uam.mx

DATOS LABORALES

PUESTO ACTUAL:

Profesor Titular C
Área de Fisicoquímica Teórica
Departamento de Química
División de Ciencias Básicas e Ingeniería
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa
Antigüedad en la Universidad: 41 años

Teléfono: 5804-4600; ext. 3277

CARGOS DESEMPEÑADOS

1. Profesor de Asignatura en la Sección de Química de la ENEP-Zaragoza, UNAM .(Septiembre de 1980 a octubre de 1982)

2. Profesor de Tiempo Completo en las áreas de Química Cuántica y de Fisicoquímica Teórica del Departamento de Química de la UAM-Iztapalapa (noviembre de 1982 a la Fecha)

3. Jefe del área de Fisicoquímica Teórica del Departamento de Química de la UAM-I. (Septiembre de 1993 a Mayo del 2000).

4. Coordinador del Laboratorio de Supercómputo de la División de CBI, UAM-Iztapalapa, 2001-2004.

5. Jefe del Departamento de Química, UAM-Iztapalapa, División de CBI. 17/Nov/2008 a 16/Nov/2012

6. Jefe del área de Fisicoquímica Teórica del Departamento de Química de la UAM-I. (Enero de 2015 a abril de 2022)

7. Miembro de la Junta Directiva de la Universidad Autónoma Metropolitana, 5 de abril de 2022-a la fecha.

FORMACIÓN ACADÉMICA

1. Licenciatura en Química
Institución: Facultad de Química, UNAM
Fecha del Examen Profesional: 14 de Agosto de 1980.
Título de la Tesis: *Cálculos ab-initio UHF para la molécula del dioxirano, en relación a un probable mecanismo de la bioluminiscencia*.
Asesor: Dr. Guillermo del Conde Pontones.

2. Maestría en Ciencias Químicas (Fisicoquímica).
Institución: División de Estudios de Posgrado, Facultad de Química, UNAM.
Fecha del Examen de Grado: 23 de Mayo de 1984.
Título de la Tesis: *Efectos No-Aditivos en el Sistema H2S-(H2O)2*.
Asesor: Dr. Octavio Novaro Peñaloza.

3. Doctorado en Ciencias
Institución: División de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa.
Fecha de Examen de Grado: 13 de Diciembre de 1988.
Título de la Tesis: *Reactividad Química: El Punto de Vista de la Teoría de Funcionales de la Densidad*.
Asesor: Dr. José Luis Gázquez Mateos.

ESTANCIAS EN INSTITUCIONES O CENTROS DE INVESTIGACIÓN

1. Científico Visitante, Departamento de Física, Instituto Tecnológico de Massachusetts (agosto de 1991 a agosto de1993)
2. Profesor Visitante, Departamento de Química, Universidad de Hyderabad, Hyderabad, India, Enero-Febrero de 1999.
3. Profesor Visitante, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile, Marzo de 1999.
4. Profesor Visitante, Instituto Fritz-Haber de la Sociedad Max Planck, Berlin, Alemania, Agosto-Septiembre de 2000.
5. Profesor Visitante, Laboratorio Cavendish, Departamento de Física, Universidad de Cambridge, Sept-2004 a Agosto de 2005.
6. Profesor Visitante, Instituto de Investigación en Materiales, UNAM, México, febrero de 2024-abril de 2025.

DISTINCIONES Y PREMIOS

1. Miembro Regular de la Academia Mexicana de Ciencias, Octubre de 1999.
2. Medalla al Merito Académico, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, México, D.F. 1991.
3. Editor Invitado del International Journal of Quantum Chemistry para el número especial dedicado a las Reuniones Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Noviembre 2011-Julio de 2012.
4. Miembro del Sistema Nacional de Investigadores desde su fundación en el área de Ciencias Exactas. Nombramiento actual: Investigador Nacional Nivel III del 1 de enero de 2019 al 31 de diciembre de 2028.

PARTICIPACIÓN EN COMISIONES EVALUADORAS Y EN EVALUCIONES

1.Participación como jurado del premio "Andrés Manuel del Rio" en el ramo de investigación, premio que otorga la Sociedad Química de México, 1999.

2. Miembro de la Comisión Dictaminadora de Ciencias Básicas de la Universidad Autónoma Metropolitana, 2005-2007.

3. Participación en la evaluación de proyectos sometidos ante el CONACYT, 1995-a la fecha.

3. Participación en la evaluación del programa de posgrado en Química del CINVESTAV, dentro de la Actualización 1996 del Padrón de Posgrado del CONACYT.

4. Árbitro para las revistas, Journal of the American Chemical Society, Journal of Physical Chemistry, Journal of Chemical Physics, Chemical Physics Letters, Journal of Chemical Theory and Computation, Journal of Molecular Structure (THEOCHEM), Educación Química.

5. Evaluador de proyectos de investigación para el CONICYT-Chile.

6. Evaluador de proyectos de investigación para COLCIENCIAS del gobierno de Colombia.

7. Miembro de la comisión evaluadora de Laboratorios Nacionales del CONACYT, 2017.

8. Miembro de la Comisión Evaluadora del PRIDE de la Escuela Nacional de Estudios Superiores, Unidad Morelia , UNAM, 2021-a la fecha

FORMACIÓN DE RECURSOS HUMANOS

Tesis concluidas de maestría

1. Rubicelia Vargas Fosada
Maestría en Química
Departamento de Química, UAM-I.
Análisis de los Cambios de Multiplicidad en Átomos
Marzo de 1992.

2. Joel Ireta Moreno
Maestría en Química
Departamento de Química, UAM-I,
Pseudopotenciales y Bases de Ondas Planas Para el Cálculo de Biomoléculas
Junio de 1995.

3. Rodolfo Álvarez Bustamante
Maestría en Química
Departamento de Química, UAM-I,
Aplicación de la Teoría de Funcionales de la Densidad en el Cambio de Multiplicidad en Moléculas
Diciembre de 1996.

4. Angélica Beatriz Raya Rangel
Maestría en Química
Departamento de Química UAM-I
Estudio de la Estructura Electrónica de Caribdotoxina Monoiodada.
Diciembre de 1997

5. María Luisa Roxana Licona Ibarra
Maestría en Química
Departamento de Química, UAM-I
Cálculo de la estructura Electrónica de la Superficie de TiO2(110)-(2x1)/H2SO4.
Enero de 1999

6. Cicerón Ayala
Maestría en Química
Departamento de Química, UAM-I
Análisis de Cambios Conformacionales de Polipéptidos y Proteínas
Mayo de 2009

7. Claudia Gabriela Islas Vargas
Maestría en Química
Departamento de Química, UAM-I
Estructura Electrónica de $Na_2Zn_3[Fe(CN)_6]_2$
Enero de 2018.

8. Josseline Leonor Aguilar López
Maestría en Química
Departamento de Química UAM-I
Estructura electrónica del sistema $Co_3[Co(CN)_6]$-$6H_2O$ utilizado para la elaboración de ánodos de baterías de intercalación
Octubre de 2021.

Tesis concluidas de doctorado

1. Joel Ireta Moreno
Doctor en Ciencias
Departamento de Química UAM-I
Métodos tipo Car-Parrinello en el Estudio de Biomoléculas y Superficies.
Julio de 1999.

2. Myrna Henrández Matus
Doctora en Ciencias
Departamento de Química UAM-I
Reactividad Química y Estructura Electrónica de Enlaces Dobles: Un Estudio Detallado desde Moléculas Pequeñas hasta Polímeros.
Julio de 2004.

3. Felipe Aparicio Platas
Doctor en Ciencias
Departamento de Química UAM-I
Estudio Teórico Sobre la Reactividad Química de Biomoléculas
Julio de 2004.

4. María de los Ángeles Cuán Hernández
Doctora en Ciencias
Departamento de Química UAM-I
Estudio Teórico de la Reactividad de Catalizadores Modelo Representativos de la Zeolita HZSM-5.
Abril de 2006.

5. Alexandre Tkatchenko
Doctor en Ciencias
Departamento de Química UAM-I
Estudio del potencial átomo superficie y su influencia sobre la estructura de monocapas adsorbidas
28 de Mayo de 2007.

6. Juan Radilla Chávez
Doctor en Ciencias
Departamento de Química UAM-I
Simulación de Imágenes de Microscopía de Barrido por Efecto Túnel (STM) de Moléculas Orgánicas Adsorbidas en Superficies Metálicas.

17 de Diciembre de 2007.

7. Anaid Gabriela Flores Huerta
Doctor en Ciencias
Departamento de Química UAM-I
La naturaleza de las interacciones Intermoleculares en el cristal de L-Cistina
10 de Noviembre de 2016.

8. Mayra Lozano Espinosa
Doctor en Ciencias
Departamento de Química UAM-I
Efectos del Confinamiento y de Entornos Polipeptídicos en la Reactividad Intrínseca de Cationes de Metales de Transición
9 de Marzo de 2017.

9. Luis Ignacio Perea Ramírez
Doctor en Ciencias
Departamento de Química UAM-I
Estudio teórico de Cupratos de Litio como Posibles Materiales Catódicos para Baterías de Litio.
1 de Julio de 2019.

10. Claudia Gabriela Islas Vargas
Doctora en Ciencias
Departamento de Química, UAM-I
Estudio Teórico de la Reactividad de Sistemas Electroquímicos en Función del Potencial Aplicado.
Mayo de 2022

Cursos Impartidos

De 1983 a la fecha ha impartido globalmente mas de 150 cursos en la Licenciatura y el Posgrado en Química de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería de la UAM-Iztapalapa. Entre los cursos impartidos se pueden mencionar Química General, Fisicoquímica, Química Cuántica, Estructura Atómica, Simetría y Teoría de Grupos, Termodinámica, Mecánica Estadística, Estructura de la Materia y Teoría de Funcionales de la Densidad

PROYECTOS Y SUBVENCIONES PARA LA INVESTIGACIÓN

1. Responsable de un proyecto financiado por el CONACYT que se denomina " Estructura Electrónica en una Computadora Masivamente Paralela"; No. 400200-5-4875E. Vigencia 1994-1997.

2. Participación en un proyecto conjunto de las Áreas de Catálisis y de Fisicoquímica Teórica de la UAM-I e investigadores de la Facultad de Química de la UNAM y del Instituto Mexicano del Petróleo. Proyecto Financiado por el Instituto Mexicano del Petróleo:

"Investigación Básica Sobre el Desarrollo y Evaluación de Zirconia, Titania y óxidos Mixtos en la Isomerización de Hidrocarburos C4-C6", Vigencia 1996-1999.

3. Responsable del proyecto financiado por CONACYT, "Efectos de la Autointeracción en el Estudio de Polipéptidos y de Reacciones en Superficies", Vigencia 1999-2001.

4. Responsable del proyecto de Cooperación Internacional CONACYT/MEXICO-INDIA, "La Teoría de Funcionales de la Densidad en el Estudio de átomos Moléculas y Sólidos", Vigencia 1998-2000.

5. Corresponsable del Proyecto de Cooperación Internacional México-Chile, CONACYT-CONICYT, "Funciones de Respuesta Globales y Locales en Moléculas y Sólidos Dentro del Formalismo de Funcionales de la Densidad", Vigencia 1997-1998.

6. Responsable del Proyecto financiado por el CONACYT "Estructura Electrónica de Proteínas y Relaciones Estructura Función", Vigencia 2003-2005.

7. Responsable Institucional del Proyecto "Construcción de una Grid Interinstitucional para el cómputo de alto rendimiento (GRAMA)". Financiado por CUDI, Vigencia 2004.

8. Responsable del Proyecto financiado por CONACYT, Estructura Electrónica y Estados Excitados en la Teoría de Funcionales de la Densidad, Clave 24675, Vigencia 16-Sept-2006 a15-Sept-2009.

9. Responsable del Proyecto financiado por CONACYT, Estructura Electrónica y Estados Excitados en la Teoría de Funcionales de la Densidad, Clave CB-2010-01 155698, Vigencia 16-Nov-2012 a1 15-NOV-2014.

10. Responsable del Proyecto Grupal de Cátedras Conacyt, "Diseño y construcción de sistemas sustentables de generación y almacenamiento de energía", 2016 a la fecha.

11. Responsable del Proyecto Grupal financiado por CONAHCYT, "Diseño de materiales para el almacenamiento electroquímico de energía a gran escala, basado en la "sintetizabilidad" y en un espacio químico de especies abundantes en la minería mexicana." Vigencia: agosto de 2023-diciembre de 2025.

PUBLICACIONES

Artículos publicados en revistas de circulación internacional con arbitraje

1.Theoretical Study of Three-Body Non additive Interactions for The H2S-(H2O)2 System, O. Novaro, A. Les, M. Galván y G. del Conde, Theoret. Chim. Acta (Berl) 64, 65 (1983).

2. Use of Unrestricted Hartree-Fock Method in The Study of Clusters of Metal Atoms., J. García-Prieto, G. del Conde, M. Galván y O. Novaro, Phys. Rev. B 30, 1030 (1984).

3. Behavior of The Chemical Potential of Neutral Atoms in The Limit of Large Nuclear

Charge., J. L. Gázquez, A. Vela y M. Galván, Phys. Rev. Lett., 56, 2606 (1986).

4. Fukui Function: Spin-Density and Chemical Reactivity, M. Galván, J. L. Gázquez y A. Vela, J. Chem. Phys., 85, 2337 (1986).

5. Gradient Expansion of The Exchange Energy From an Approximate Density-Potential Relation., M. Galván y J.L. Gázquez, J. Chem. Phys., 85, 4203 (1986).

6. Fukui Function Electronegativity and Hardness in The Kohn-Sham Theory., J. L. Gázquez, A. Vela y M. Galván, Structure and Bonding, 66, 80 (1987).

7. Chemical Reactivity in Spin-Polarized Density Functional Theory., M. Galván, A. Vela y J.L. Gázquez, J. Phys. Chem., 92, 6470 (1988).

8. On The Oscillatory Behavior of The Chemical Potential of Neutral Atoms, A. Vela, M. Galván y J.L. Gázquez, Int. J. Quant. Chem. (Quant. Chem. Symp.), 22,329 (1988).

9. Chemical Reactivity in Density Functional Theory: The N-differentiability Problem., J. L. Gázquez, M. Galván y A. Vela, J. Mol. Struc. (TEOCHEM), 210, 29 (1990).

10. Spin-potential in Kohn-Sham Theory, M. Galván y R. Vargas, J. Phys. Chem., 96, 1625 (1992).

11. Local Softness and Chemical Reactivity of Maleimide: Nucleophilic Addition, F. Méndez, M. Galván, A. Garritz, A. Vela y J.L. Gázquez, J. Mol. Struc. (TEOCHEM), 277, 81 (1992).

12. Local Softness, Scanning Tunneling Microscopy and Surface Reactivity, M. Galván, A.Dal Pino Jr., J.Wang and J.D. Joannopoulos, J. Phys. Chem., 97, 783 (1993).

13. Chemical Softness and Impurity Segregation at Grain Boundaries, A.Dal Pino Jr, M. Galván, T.A. Arias and J.D. Joannopoulos, J. Chem. Phys., 98 1606 (1993).

14. Hardness and Softness in The Ab-Initio Study of Polyatomic Systems M. Galván, A. Dal Pino Jr., and J. D. Joannopoulos, Phys. Rev. Lett., 70, 21 (1993).

15. Theory of Adsorption of Atoms and Molecules on Si(111)-(7·7), K.D. Brommer, M. Galván, A. Dal Pino, Jr. y J.D. Joannopoulos, Surface Science, 314, 57(1994).

16 On The Stability of Half Filled Shells, R. Vargas y M. Galván, J. Phys. Chem., 100, 14651 (1996).

17 Plane Waves Basis Sets in The Description of Diatomic Anions and Valence Charge Density, J. Ireta y M. Galván, J. Chem. Phys., 105, 8231 (1996).

18. Dynamic NMR and X-Ray diffraction study of (N-B)-diphenyl(2-amino-ethoxy)borane derivatives of ephedrines and pseudoephedrines, H. Hopfl, N. Farfan, D. Castillo, R. Santillan, R. Contreras, F.J. Martinez-Martinez, M. Galván, R. Alvarez, L. Fernandez, S. Halut y J.C. Daran, J. Organomet. Chemistry, 544, 175-188 (1997).

19. Ab-Initio study of Substituted 2-Aminoethylborinates, H. Hopfl, M. Galván, N. Farfán y R. Santillan, J. Mol. Struct. (THEOCHEM), 427, 1-13, 1998.

20. Singlet-Triplet Gaps and Spin Potentials, R. Vargas, M. Galván, y A. Vela, J. Phys. Chem A102, 3134-3140 (1998).

21. Local reactivity of Charybdotoxin, a K+ channel blocker, J. Ireta, M. Galvan, K. Cho, J.D. Joannopoulos, J. Am. Chem. Soc., 120, 9771 (1998).

22. A Direct Evaluation of Regional Fukui Functions in Molecules, R.R. Contreras, P. Fuentealba, M. Galvan y P. Perez, Chem. Phys. Lett., 304, 405(1999).

23. Markonikov regioselectivity rule in the light of site activation models, A. Aizman, R. Contreras, M. Galván, A. Cedillo, E. Chamorro y J.C. Santos, *J. Phys. Chem* A 106 7844-7849 (2002).

24. Density functional theory of the cooperativity of hydrogen bonds in an infinite alpha-helix, J. Ireta, J. Neugebauer, M. Scheffler, A. Rojo y M. Galván, *J. Phys. Chem*. B, 107, 1432-1437, (2003).

25. On the existence of electronic states confined by charged groups in proteins, F. Aparicio, J. Ireta, A. Rojo, L. Escobar, A. Cedillo y M . Galván, *J. Phys. Chem*. B, 107, 1692-1697, (2003).

26. The role of the protons and the electrostatic potential in the reactivity of the (110) sulfated zirconia surface, Joel Ireta, Felipe Aparicio, Margarita Viniegra y Marcelo Galvan, J. Phys. Chem B, 107, 811-818, (2003).

27. Chemical Reactivity in the (N,Ns,v(r)) space, J. Melin, F. Aparicio, M. Galvan, P. Fuentealba, R. Contreras, J. Phys. Chem, A 107(19), 3831-3835, (2003).

28. Global and Local Reactivity and Activating Patterns of HOOX (X=H,NO2,CO2-,SO3-) peroxides with solvent effects, F. Aparicio, R. Contreras, A. Cedillo, M. Galvan, J. Phys.Chem. A 107(47), 10098-10104, (2003).

29. Wave Function instabilities in the cis-trans isomerization and singlet-triplet energy gaps in a push-pull compound, Myrna H. Matus, Renato Contreras, Andres Cedillo, Marcelo Galvan, J. Chem. Phys., 119, 4112-4116, (2003).

30. Spectrophotometric study of the system Hg(II)-thymol-blue-H2O and its evidence through electrochemical means, Balderas-Hernandez P., Rojas-Hernandez, A., Galvan, M. Ramirez-Silva M.T. Spectrochim Acta A60 (3), 569-577 (2004).

31. Is the fukui function a right descriptor of hard-hard interactions?, J. Melin, F. Aparicio, V. Subramanian, M. Galvan, P.K. Chattaraj, J. Phys. Chem. A, 108, 2487 (2004).

32. Basis set effects on frontier molecular energies and energy gaps: A comparative study between plane waves and localized basis functions in molecular systems., Myrna H. Matus, J. Garza and M. Galvan, J. Chem. Phys. 120, 10359-10363 (2004).

33. DFT-Quantum Chemical Study of the HZSM-5-cyclohexene interaction pathways. A. Cuan, J. M. Martinez Magadan, I. Garcia-Cruz y M. Galvan, J. Mol. Catal. A-Chemical, 236, 194-205, (2005).

34. Substituent Effects, P.K. Chattaraj, N. Gonzalez-Rivas, M.H. Matus y M. Galvan, J. Phys. Chem. A 109, 5602-5607 (2005).

35. Local HSAB principle in the conjugate addition of p-substituted thiophenols to cyclohexenone, R. Meza, B. Gordillo y M. Galvan, Int. J. Quant. Chem., 104, 29-37 (2005).

36. Charge Transfer and Adsorption energies in the iodine-Pt(111) interaction, A. Tkachenko, N. Batina, A. Cedillo y M. Galvan, Surf. Sci. 581, 58-65 (2005).

37. STM Image Simulation: Effect of the number of Tunneling States and the Isosurface Value, Juan Radilla, Marcelo Galván, Yolanda Trinidad-Reyes y Nikola Batina, in *Scanning-Probe and Other Novel Microscopies of Local Phenomena in Nanostructured Materials,* edited by S.V. Kalinin, B. Goldberg, L.M. Eng, and .D. Huey (Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **838E**, Warrendale, PA , 2005), 010.1

38. A Philicity based análisis of adsorption of small molecules in zeolites, Angeles Cuán, Marcelo Galván y Pratim Kumar Chattaraj, J. Chem. Sci. 117, 541-548 (2005).

39. Structural Transitions in the Polyalanine α-Helix under Uniaxial Strain, Joel Ireta, Jorg Neugebauer, Matthias Scheffler, Arturo Rojo y Marcelo Galván, J. Am. Chem. Soc., 127, 17241-17244 (2005).

40. The Effect of Double Bonds on the Conducting Properties of Ciguatoxin 3C and Tetrahydropyrane Based Polymers, Myrna H. Matus, Jorge Garza y Marcelo Galván, J. Phys. Chem. B, 110(3) 1172-1178 (2006).

41. Comparison between the frozen core and finite differences approximations for the generalized spin-dependent global and local reactivity descriptors in small molecules, Garza, J, Vargas, R., Cedillo, A., Galvan, M., Chattaraj, P.K. Theor. Chim Acc. 115, 257-265 (2006).

42. Adsorption site. Core level shifts and charge transfer on the Pd(111)-I(root3xroot3)surface, M. Gothelid, H. von Schenck, J. Weissendrieder, B.

Akerman, A. Tkatchenko, M. Galvan Surf. Sci. 600(15) 3093-3098 (2006).

43. Potential energy landscape of monolayer surface system governed by repulsive lateral interactions: the case of (3x3)-I-Pt(111), A. Tkatchenko, N. Batina, M. Galvan, Phys. Rev. Lett. 97(3) 036102 (2006).

44. Dimerization of thymol blue in solution: theoretical evidence, Patricia Balderas-Hernández, Rubicelia Vargas, Alberto Rojas-Hernández, Ma. Teresa Ramírez-Silva and Marcelo Galván, Talanta, 71 (3) 1061-1067 (2007).

45. Nucleophilicity index from perturbed electrostatic potentials**,** Cedillo A., Contreras R, Galvan, M., Aizman, A.Andres, J. Phys. Chem. A 111(12) 2442-2447 (2007).

46. Nuclear Fukui functions from nonintegral electron number calculations, Carlos Cárdenas , Eduardo Chamorro , Marcelo Galván , Patricio Fuentealba, Int. J. Quant. Chem. 107 (4) 807-815 (2007).

47. Determination of the complexation constants of Pb(II) and Cd(II) with thymol blue using spectrophotometry, SQUAD and the HSAB principle. Balderas-Hernandez, P., Rojas-Hernandez, A., Galvan, M., Romo, M. R., Palomar-Pardave, M., Ramirez-Silva, M. T., Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy 66 (1): 68-73 (2007).

48. Theoretical Investigations of Oxygen-17 NMR Chemical Shifts to Discriminate among Helical Forms, Itzam De Gortari, Marcelo Galvan, Joel Ireta, Matthew Segall, Chris J. Pickard, Mike Payne, J. Phys. Chem. A 111 13099-13105 (2007).

49. Two state reactivity mechanism for the rearrangement of hydrogen peroxynitrite to nitric acid. Renato Contreras, Marcelo Galván, Mónica Oliva, Vincent S. Safont, Juan Andrés, Doris Guerra, Arie Aizman. Chem. Phys. Lett., 457, 216-221, 2008.

50. Folded Conformations Of Maitotoxin, Myrna H. Matus, Laura Escobar y Marcelo Galván., J. Mex. Chem. Soc. 52, 73-76, 2008.

51. Conformational analysis of *p*-X-anilino dioxaphosphinanes. Substituent effects on ^{31}P and ^{15}N NMR signals and on negative hyperconjugation (n–σ*), Zaira Domínguez, Marcelo Galván, Ma. Teresa Cortez, Magali Salas, Rocío Meza, Marco A. Leyva-Ramírez y Bárbara Gordillo, Tetrahedron, 66 (11), 2066-2076 (2010).

52. Peptide sr11a from Conus spurius is a novel peptide blocker for Kv1 potassium channels, Aguilar Manuel B., Perez-Reyes Liliana I., Lopez Zinaeli, Heimer de la Cotera Edgar P., Falcon Andres, Ayala Ciceron, Galvan Marcelo, Salvador Carolina, Escobar Laura I., Peptides, 31(7), 1287-1291 (2010).

53. Application of the Active Space Self-Interaction Correction Method to Molecular Systems. Felipe Aparicio, Jorge Garza y Marcelo Galván, Journal of the Mexican Chemical Society, 56(3), 338-345 (2012).

54. Soft-Soft Interactions in the Protein-Protein Recognition Process: The K1 Channel-Charybdotoxin. Felipe Aparicio, Nelly González-Rivas, Joel Ireta, Arturo Rojo, Laura I. Escobar, Andrés Cedillo y Marcelo Galván, International Journal of Quantum Chemistry, 112(22), 3618-3623 (2012).

55. DFT study of adsorption of the corrosion inhibitor 2-mercaptoiidazole on to Fe(100) surface. Juan Radilla, Guillermo E. Negrón-Silva, Manuel Palomar-Pardavé, Mario Romero-Romo y Marcelo Galván, Electrochimica Acta, 112, 577-586 (2013).

56. Sensing polarization effects through the analysis of the effective C6 dispersion coefficients in NaCl solutions, Alfredo Guevara-García, Joel Ireta y Marcelo Galván, J. Chem. Phys. 142, 014504 (2014).

57. Experimental and Theoretical Analysis Accounting for Differences of Pyrite and Chalcopyrite Oxidative Behaviors for Prospective Environmental and Bioleaching Applications, René H. Lara, Jorge Vázquez-Arenas, Guadalupe Ramos-Sanchez, Marcelo Galvan, y Luis Lartundo-Rojas, J. Phys. Chem. C, 119, 18364-18379 (2015).

58. Delimiting the boron influence on the adsorptive properties of water and .OH radicals on H-terminated Boron Doped Diamond catalysts: A Density Functional Theory Analysis, Raciel Jaimes, Jorge Vazquez-Arenas , Ignacio González y Marcelo Galván, Surf. Sci., 663, 27 (2016).

59. Nature of Hydrogen Bonds and S···S Interactions in the L-Cystine Crystal, Anaid G. Flores-Huerta, Alexandre Tkatchenko, Journal of Physical Chemistry A, 120, 4223-4230 (2016).

60. Sensing the active site properties of enzymes as a function of the size of an effective peptidic environment using DFT reactivity parameters, Mayra Lozano-Espinosa, Alfredo Guevara-García y Marcelo Galván, Theoretical Chemistry Accounts, 135, 225-238, (2016).

61. Confinement effects on the spin potential of first row transition metal cations, Mayra Lozano-Espinosa, Jorge Garza y Marcelo Galván, Philosophical Magazine, DOI:10.1080/14786435.2016.1258498,(2016).

62. Theoretical study of the adsorption of substituted guaiacol and catechol radicals on a graphite surface, Luis Ignacio Perea-Ramírez, Rubicelia Vargas, Zaira Domínguez, Magali Salas-Reyes, Myrna H. Matus y Marcelo Galván, Electrochimica Acta, 242, 66-72, (2017).

63. Theoretical evidence of the relationship established between the HO radicals and H2O adsorptions and the electroactivity of typical catalysts used to oxidize organic compounds, Raciel Jaimes, Jorge Vazquez-Arenas, Ignacio González y Marcelo Galván, Electrochimica Acta, 229, 345-351, 2017.

64. Using local softness to reveal oxygen participation in redox processes in cathode materials, Luis Ignacio Perea-Ramírez Alfredo Guevara-García Marcelo Galván, J. Mol. Model. 24, 227 (2018).

65. Experimental and Theoretical Investigation on the Origin of the High Intercalation Voltage of K2Zn3[Fe(CN)6]2 Cathode, Claudia Islas-Vargas, Alfredo Guevara-García, M. Oliver-Tolentino, G. Ramos-Sánchez, I. González, Marcelo Galván, Journal of The Electrochemical Society, 166 (3) A5139-A5145 (2019).

67. Establishing the Relationship between Quantum Capacitance and Softness of N-Doped Graphene/Electrolyte Interfaces within the Density Functional Theory Grand Canonical Kohn–Sham Formalism, Alvaro Ochoa-Calle, Alfredo Guevara-García, Jorge Vazquez-Arenas, Ignacio González, and Marcelo Galván, J. Phys. Chem. A, 124, 573–581 (2020).

68. Electronic structure behavior of PbO2, IrO2, and SnO2 metal oxide surfaces (110) with dissociatively adsorbed water molecules as a function of the chemical potential, Claudia Islas-Vargas, Alfredo Guevara-García, Marcelo Galván, J. Chem. Phys. 174, 074704 (2021).

69. Determination of active sites on Na2SiO3 and Li2SiO3 catalysts for methanol dissociation and methoxide stabilization concerning biodiesel production, Cristina Cuautli, Issis Romero-Ibarra, Jorge Vazquez-Arenas, Marcelo Galvan, Fuel, 298, 15, 120840 (2021).

70. Effects of Intra-Structural Interactions of Indium Hexacyanoferrate on the Li+ and K+ Intercalation Potential, Jhon Harrison Sierra-Uribe, Claudia Islas-Vargas, Alfredo Guevara-García, M. Oliver-Tolentino, G. Ramos-Sánchez, Marcelo Galván, Ignacio González, Journal of The Electrochemical Society, 168, (10), 100511 (2021).

71. Activated layered double hydroxides: assessing the surface anion basicity and its connection with the catalytic activity in the cyanoethylation of alcohols. Guadalupe Castro, Jaime S Valente, Marcelo Galván, Joel Ireta, Physical Chemistry Chemical Physics, 24, (38), 23507-23516 (2022).

72. Conformational preference of dipeptide zwitterions in aqueous solvents, Francisco Adasme-Carreño, Alvaro Ochoa-Calle, Marcelo Galván, Joel Ireta, Physical Chemistry Chemical Physics, 26, 8210-8218 (2024). https://doi.org/10.1039/d3cp05742a

73. Redox properties of PbO2, IrO2 and SnO2 (110) surfaces with an adsorbed OH molecule: a chemical reactivity study in the grand canonical ensemble, Claudia Islas-Vargas, Alfredo Guevara-García, Marcelo Galván, Theoretical Chemistry Accounts, 143, 34, (2024). https://doi.org/10.1007/s00214-024-03103-2

74. Hydrodesulfurization of Dibenzothiophene: A Machine Learning Approach, Guadalupe

Castro, Julián Cruz-Borbolla, Marcelo Galván, Alfredo Guevara-García, Joel Ireta, Myrna H Matus, Amilcar Meneses-Viveros, Luis Ignacio Perea-Ramírez, Miriam Pescador-Rojas, ChemistryOpen, e202400062, (2024). https://doi.org/10.1002/open.202400062

75. Theoretical study of the oxidative desulfurization reaction in sulfur compounds present in crude oil, Luis Ignacio Perea-Ramírez, Paulino Zerón, Luis Ángel Zárate-Hernández, Guadalupe Castro, Marcelo Galván, Marco Franco-Pérez, Myrna H. Matus, Julián Cruz, Computational and Theoretical Chemistry 1241 (2024) 114887. https://doi.org/10.1016/j.comptc.2024.114887

76. Adsorption grand potential of OH on metal oxide surfaces, Claudia Islas-Vargas, Alfredo Guevara-García, Marcelo Galván, Journal of Molecular Modeling (2024) 30:379. https://doi.org/10.1007/s00894-024-06170-1

77. The Use of Grand Canonical Density Functional Theory Global and Local Reactivity Parameters to Study Electrochemical Processes in Energy Storage Materials, Claudia Islas-Vargas, Alfredo Guevara-García, Marcelo Galván, Journal of the Mexican Chemical Society, 69(1), 268-292 (2025). https://doi.org/10.29356/jmcs.v69i1.2289

Capítulos de libros

1. Atoms and Ions in The Limit of Large Nuclear Charge., J.L. Gázquez, M. Galván, E. Ortiz y A. Vela, en "Density Matrix and Density Functional Theory", Reidel Publishing Co., 1987.

2. Nucleophilic Attacks on Maleic Anhydride: A Density Functional Theory Approach., F. Méndez y M. Galván, en "Density Functional Theory Approaches to Chemistry", Eds. J.K. Labanowsky and J.W. Andzelm, Springer-Verlag, p. 387, 1991.

3. Reactivity Criteria in Spin-Polarized Density Functional Theory, R. Vargas, A. Cedillo, J. Garza y M. Galván, Reviews in Modern Quantum Chemistry, Editor, K.D. Sen, World Scientific, Singapore, 2002, p. 936.

4. The Multiplicative Potential of the Self-Interaction Corrected Approximation, Reviews in Modern Quantum Chemistry, Editor, K.D. Sen, World Scientific, Singapore, 2002, p. 755.

5. Impacto y perspectivas del Estudio de la Estructura Electrónica de Proteínas, M. Galván y J. Ireta, en "*La Física Biológica en México: Temas Selectos*", Coordinadores, L.

García-Colin Scherer, L. Dagdug, P. Miramontes y A. Rojo, El Colegio Nacional, México 2006, p.279-298.

6. Spin-Polarized Density Functional Theory: Chemical Reactivity, R. Vargas y M. Galván, en Chemical Reactivity Theory: A Density Functional View, Editor Pratim Kumar Chattaraj, CRC Press, Boca Raton, 2009, p. 137-153.

7. Química Teórica, Tomo IV (Química), Enciclopedia de las Ciencias y la Tecnología en México, pp 179-2013, Editores: Carlos Herrero B. y Antonio Campero Celis, UAM-Iztapalapa., 2009, ISBN978-607-477-137-4.

Reportes de Investigación

1. *Ab-Initio* Condensed Matter Calculations on the QCD Teraflops Computer, T. A. Arias, B. E. Larson, M. Galván y J. D. Joannopoulos, Technical Note, Research Laboratory of Electronics, Massachusetts Institute of Technology, 576, 1-16 (1993).

Memorias en extenso

1. Cocientes Entre Componentes de la Energía Total de Átomos, M. Galván, J.L. Gázquez, E. Ortiz y A. Vela, Memorias del III Simposio "Guillermo del Conde", México, 1985.

2. Potencial Químico y Periodicidad en Átomos Neutros, J. L. Gázquez, A. Vela y M. Galván, Memorias del III Simposio "Guillermo del Conde", México, 1985.

3. Polarización del Spin en Catálisis: El Punto de Vista de la Teoría de Funcionales de la Densidad, M. Galván, A. Garritz, A. Vela y J.L. Gázquez, Memorias del XI Simposio Iberoamericano de Catálisis, México, 1988.

4. El Potencial de Spin Como Una Medida de la Tendencia a Formar Complejos de Alto o de Bajo Spin, R. Vargas y M. Galván, Memorias del IV Simposio "Fernando Romo", México, 1990.

5 Un Programa Para el Cálculo de Propiedades Locales en Moléculas, R. Álvarez y M. Galván, Memorias del IV Simposio "Fernando Romo", México, 1990.

6 Interacción Enlazante Protón-Hidruro a través del Espacio. Acuerdo Entre Teoría y Experimento, J. Ireta, M. Galván, I. Padilla-Martinez y R. Contreras, Memorias del V Congreso Iberoamericano de Química Inorgánica, p. 174, Saltillo, México, 1995.

7 Reactividad y Estabilidad de la N-Metildihidroditiazina. Estudio Teòrico Experimental, L.M. Martinez-Aguilera, A. Flores-Parra, R. Álvarez y M. Galván, Memorias del V Congreso Iberoamericano de Química Inorgánica, p. 210, Saltillo, México, 1995.

8 El Potencial de Spin Como Parámetro de Reactividad Química en Moléculas, R. Álvarez,

R. Vargas y M. Galván, Memorias del V Congreso Iberoamericano de Química Inorgánica, p. 213, Saltillo, México, 1995.

9. Pseudopotenciales y bases de ondas planas en la descripción de geometrías y densidades. J. Ireta, y M. Galván, Memorias del Simposio Fernando Romo1995, p. 156.

10. Efectos del funcional de intercambio y correlación en las distribuciones de carga inducidas por el cambio en la multiplicidad. R. Álvarez, R. Vargas y M. Galván, Memorias del Simposio Fernando Romo1995, p. 178.

CONGRESOS Y SEMINARIOS

Pláticas Invitadas

1. La Teoría de Funcionales de la Densidad en la Química, M. Galván, XXVI Congreso Mexicano de Química Pura y Aplicada, Monterrey, N.L., México, septiembre de 1990.

2. Chemical Reactivity of Charybdotoxin: An electronic Structure Based Point of View, 12th World Congress on Animal, Plant and Microbial Toxins, Cuernavaca, Mexico, 1997.

3. Reactivity of Charybdotoxin, a Potassium Ion Channel Blocker, School of Chemistry, University of Hyderabad, Hyderabad, India, enero, 1999.

4. Hardness and Softness in Surfaces and Segregation at Grain Boundaries, Bhabha Atomic Research Centre, Bombay, India, Enero, 1999.

5. Estructura Electrónica de Polipéptidos: Reactividad y Precisión Químicas, Departamento de Química, Universidad Católica de Chile, Santiago de Chile, 1999.

6. Induced Changes in TiO2 and ZrO2 surfaces after H2SO4 Adsorption, International Materials Research Congress, Cancún, México, agosto 29-septiembre 2, 1999.

7. Efectos de la Adsorción en H2SO4 en las superficies de TiO2 y ZrO2, IV Seminario nacional de Catálisis Heterogénea, 21-25 de Noviembre, 1999, Pátzcuaro, Mich. México.

8. The Electronic Structure of Proteins as Obtained by First Principles Total Energy Calculations, 27 de enero de 2005, Laboratorio Cavendish, Universidad de Cambridge.

9. Ordered Structures of Iodine on Pt(111), 2007-Pan-American workshop on molecular and material sciences: theoretical and computational aspects, 9 a 11 de octubre de 2007, Cuernavaca, Mor.

10. Algunas Aplicaciones a sólidos y superficies de propiedades definidas y evaluadas mediante la TFD, 30 Congreso Latinoamericano de Química, 27-31 de Octubre de 2012, Cancún, QR, México.

11. El papel de la estructura electrónica en el estudio de proteínas con un enfoque interdisciplinario, Humboldt Kolleg Symposium "Proteins: at a crossroad between mathematics, physics, chemistry and biology", México D.F., 7-9 de noviembre de 2013.

12. Dispersion cooperative effects in the stabilization energy of formic acid and L-cystine, 10th congress of the world association of theoretical and computational chemists (WATOC), Santiago de Chile, 5 a 19 de Octubre de 2014.

13. Sensing Polypeptidic Chemical Environments Using Electronic Structure, 4th International Workshop, Frontiers in Protein Folding Evolution and Function, Oaxaca, México, 3 a 7 de Noviembre de 2015.

14. La Estructura Electrónica en el Estudio de Materiales para el Almacenamiento Electroquímico de Energía, Seminario Institucional, Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM, 5 de junio de 2024.

Participación en Congresos y reuniones

1. Estructura electrónica de compuestos de valencia mixta: el caso de Cr2F5 y Co3O4, Josseline Aguilar, Marcelo Galván, XXII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, 7 al 9 de noviembre de 2024, Chihuahua, México.
2. Blandura local en sistemas que presentan valencia mixta: el caso de Cr2F5 y Co3O4, Josseline Aguilar, Guadalupe Castro, Marcelo Galván, XXIII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, 13 al 15 de noviembre de 2025, Guanajuato, Gto. México.

Organización de Congresos y reuniones

1. Miembro del comité organizador nacional de las Reuniones Mexicanas de Fisicoquímica Teórica, 2005-2007.