







0000-0002-9583-4256 ORC ID

C-4019-2011 Researcher ID Thomson

MARIO DANIEL GLOSSMAN MITNIK

No.CVU 21082

INFORMACIÓN GENERAL

CURP

GOMM531006HNELTR00

RFC

 ${\mathcal P}$ GOMM531006ER9

SEXO

A Masculino

DOMICILIO

O CHIH , Cp. 31123

FECHA NACIMIENTO
1953-10-06

PAÍS DE NACIMIENTO

México

NACIONALIDAD

Argentine

__ ESTADO CIVIL

Casado(a)

DOCUMENTO DE NACIONALIDAD

Ver

CONTACTO

CORREO PRINCIPAL daniel.glossman@cimav. edu.mx

MÓVIL PRINCIPAL

TELÉFONO PRINCIPAL <u>\$\sigma\$ 52614439</u>1151

IDIOMAS

ENGLISH

Nivel universitario

ITALIAN

Intermedio

PORTUGUESE (BRAZIL)

Intermedio

SPANISH

Nivel universitario

CATALAN

Básico

ÁREA DE CONOCIMIENTO

ÁREA: Biología y Química

CAMPO: Química

DISCIPLINA: Química general **SUB DISCIPLINA:** Química teórica

SEMBLANZA

El Dr. Daniel Glossman-Mitnik es Licenciado en Ciencias Químicas por la Universidad de Buenos Aires, y Doctor en Ciencias Químicas Orientación Fisicoquímica, por la Universidad Nacional de La Plata, con estudios de posdoctorado en la University of North Carolina, Chapel Hill, USA, en la Universidad de Puerto Rico, y en la Universidad de Valladolid, España. Ha realizado varias estancias como Profesor Invitado en la Universidad de las Islas Baleares, España. Actualmente se desempeña como Investigador Titular C del Centro de Investigación en Materiales Avanzados – CIMAV, y es Investigador Nacional Emérito del Sistema Nacional de Investigadores e

Investigadoras (SNII) del CONAHCYT. Ha publicado más de 290 artículos en revistas científicas internacionales indexadas, y ha realizado más de 280 presentaciones en congresos científicos nacionales e internacionales. Ha dirigido numerosas Tesis de Maestría y Doctorado en Ciencia de los Materiales y en Medio Ambiente y Energías Renovables. Ha sido Evaluador del CONAHCYT de proyectos de investigación y de becarios postdoctorales. Ha sido miembro de numerosos Tribunales de Tesis en México y en el extranjero. Su especialidad es la Nanociencia Molecular Computacional, combinando Nanoinformática, Química Computacional y Modelado Molecular, para el estudio de Productos Naturales. Su trabajo se aplica al estudio de Nanomateriales para Energías Alternativas y Renovables, Fotosensibilizadores para Medicina, al Diseño de Inhibidores Moleculares del Proceso de Glicación Avanzada de Proteínas, y la Peptidología Computacional Basada en DFT Conceptual para el Estudio de Péptidos Cíclicos de Origen Marino. Se ha desempeñado durante 5 años como Coordinador del Programa Institucional de Nanotecnología en el CIMAV, así como Jefe del Departamento de Simulación Computacional y Modelado Molecular del CIMAV y Director del NANOCOSMOS Virtual Lab. Actualmente es miembro del Departamento de Medio Ambiente y Energía del CIMAV.

EMPLEO ACTUAL

2001-09-01

 INVESTIGADOR TITULAR C DE TIEMPO COMPLETO - INVESTIGADOR NACIONAL SNI EMÉRITO

CENTRO DE INVESTIGACION EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. (CIMAV) Investigador Titular C de Tiempo Completo -Investigador Nacional SNI Emérito

TRAYECTORIA ACADÉMICA

DOCTORADO DOCTOR EN CIENCIAS QUÍMICAS (ORIENTACIÓN FISICOQUÍMICA)

GRADO OBTENIDO

UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PLATA

Ver Documento

LICENCIATURA LICENCIADO EN CIENCIAS QUÍMICAS

GRADO OBTENIDO

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Ver Documento

LOGROS

2023	EMÉRITO
2022	UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO (UNAM)
	MÉXICO EDITOR INVITADO DE UN NÚMERO ESPECIAL DE LA REVISTA MUNDO NANO TITULADO: EL APORTE DE LOS CÁLCULOS TEÓRICOS A LAS NANOCIENCIAS Y LA NANOTECNOLOGÍA.
	Editor Invitado de un Número Especial de la Revista Mundo Nano titulado: El Aporte de los Cálculos Teóricos a las Nanociencias y la Nanotecnología.
2022	INTERNATIONAL ACADEMIC PROJECTS UNITED KINGDOM
	EDITOR INVITADO PARA LA PUBLICACIÓN DEL LIBRO DENSITY FUNCTIONAL THEORY RECENT ADVANCES, NEW PERSPECTIVES AND APPLICATIONS, INTECHOPEN (2022) - LONDON, UK
	Editor Invitado para la publicación del Libro Density Functional Theory: Recent Advances, New Perspectives and Applications, IntechOpen (2022) - Print ISBN 978-1-83969-845-3Online ISBN 978-1-83969-846-0 - eBook (PDF) ISBN 978-1-83969-847-7 London, UK
2022	FRONTIERS MEDIA, S.A. SWITZERLAND
	EDITOR INVITADO DE UN NÚMERO ESPECIAL TEMÁTICO DE LA REVISTA FRONTIERS CHEMISTRY
	Editor Invitado de un Número Especial Temático de la Revista Frontiers in Chemistry
2022	FRONTIERS MEDIA, S.A. SWITZERLAND
	EDITOR ASOCIADO PERMANENTE DE LA REVISTA FRONTIERS IN CHEMISTRY - COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY SECTION
	Editor Asociado Permanente de la Revista Frontiers in Chemistry - Computational and Theoretical Chemistry section
2022	CONSEJO POTOSINO DE CIENCIA Y TECNOLOGIA MÉXICO
	MIEMBRO DEL COMITÉ EVALUADOR DEL PREMIO POTOSINO DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA 2022 EN EL ÁREA DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
	Miembro del Comité Evaluador del Premio Potosino de Ciencia y Tecnología 2022 en el área d Ciencias Exactas y Naturales
2022	INTELLECT BOOKS UNITED KINGDOM
	EDITOR INVITADO PARA LA PUBLICACIÓN DEL LIBRO CHEMINFORMATICS - FUNDAMENTALS, RECENT ADVANCES, NEW PERSPECTIVES AND APPLICATIONS, INTECHOPEN
	Editor Invitado para la publicación del Libro Cheminformatics - Fundamentals, Recent Advance New Perspectives and Applications, IntechOpen
2022	MULTIDISCIPLINARY DIGITAL PUBLISHING INSTITUTE MDPI SWITZERLAND
	EDITOR INVITADO DE UN NÚMERO TEMÁTICO ESPECIAL DE LA REVISTA MOLECULES COMPUTATIONAL CHEMICAL BIOLOGY
	Editor Invitado de un Número Temático Especial de la Revista Molecules: Computational

2021	CONSEJO POTOSINO DE CIENCIA Y TECNOLOGIA MÉXICO
	RECONOCIMIENTO COMO EVALUADOR DEL PREMIO POTOSINO DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y TECNOLÓGICA 2021
	Reconocimiento como Evaluador del Premio Potosino de Investigación Científica y Tecnológica 2021 otorgado por el Consejo Potosino de Ciencia y Tecnología - COPOCYT
2020	MULTIDISCIPLINARY DIGITAL PUBLISHING INSTITUTE MDPI SWITZERLAND
	BEST PAPER AWARD 2019
	Best Paper Award Winner 2019 - Marine Drugs and MDPI
2019	SNI 3
2015	HINDAWI PUBLISHING CORPORATION UNITED STATES OF AMERICA
	INTERNATIONAL JOURNAL OF PHOTOENERGY ¿ EGIPTO
	Reconocimiento otorgado por Hindawi Publishing Corporation como Editor Asociado de la Revista International Journal of Photoenergy ¿ Egipto
2014	SNI 3
2013	HINDAWI PUBLISHING CORPORATION UNITED STATES OF AMERICA
	EDITOR ASOCIADO DE LA REVISTA JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY
	Editor Asociado de la Revista Journal of Quantum Chemistry
2013	HINDAWI PUBLISHING CORPORATION UNITED STATES OF AMERICA
	EDITOR ASOCIADO DE LA REVISTA ADVANCES IN CHEMISTRY
	Editor Asociado de la Revista Advances in Chemistry
2013	UNIVERSITAT DE LES ILLES BALEARS SPAIN
	PROFESOR INVITADO EN CALIDAD DE CATEDRÁTICO DE UNIVERSIDAD
	Reconocimiento como Profesor Invitado en Calidad de Catedrático en el Departamento de Fisicoquímica de la Universitat de les Illes Balears, Palma de Mallorca España
2012	UNIVERSIDAD AUTONOMA DE SAN LUIS POTOSI MÉXICO

	EVALUADOR DEL PREMIO NACIONAL UASLP 2012
	Reconocimiento por la Participación como Evaluador del Premio Nacional a la Investigación Socio-Humanística, Científica y Tecnológica UASLP 2012
2012	UNIVERSIDAD AUTONOMA DE SAN LUIS POTOSI MÉXICO
	EVALUADOR DEL PREMIO UNIVERSITARIO UASLP 2012
	Reconocimiento por la Participación como Evaluador del Premio Unviersitario a la Investigación Socio-Humanística, Científica y Tecnológica UASLP 2012
2011	UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO (UNAM) MÉXICO
	RECONOCIMIENTO POR CONFERENCIA "MODELADO MOLECULAR DE NANOMATERIALES PARA FOTOVOLTAICA MOLECULAR"
	Reconocimiento por la la presentación de la Conferencia "Modelado Molecular de Nanomateriales para Fotovoltaica Molecular" y por la participación en la conformación de los Grupos Temáticos Interinstitucionales
2011	AMERICAN CHEMICAL SOCIETY UNITED STATES OF AMERICA
	CERTIFICADO DE APRECIACIÓN OTORGADO POR LA AMERICAN CHEMICAL SOCIETY
	Certificado de apreciación otorgado por la American Chemical Society (ACS) por la Valiosa Participación y Contribución en la Revisión de Manuscritos Sometidos a Revistas de la ACS
2011	CONSEJO NACIONAL DE CIENCIA Y TECNOLOGIA (CONACYT) MÉXICO
	PROGRAMA INNOVATEC 2011
	Reconocimiento por la Participación como Evaluador del Programa INNOVATEC 2011
2011	UNIVERSITAT DE VALENCIA SPAIN
Ĭ	HOPV 2011
	Reconocimiento otorgado por HOPV por la Participación en la 3rd Hybrid and Organic Photovoltaics Conference ¿ Valencia ¿ España
2011	UNIVERSITAT JAUME I SPAIN
	IV EUROPEAN SCHOOL OF MOLECULAR NANOSCIENCE
	Reconocimiento otorgado por el Comité Organizador de la IV European School of Molecular Nanoscience, Peñiscola, Castellón, ¿ España, por la presentación de la Conferencia: Computational Molecular Nanoscience in Mexico - The NANOCOSMOS Virtual Lab
2010	SECRETARIA DE DESARROLLO ECONOMICO Y TURISMO MUNICIPAL MÉXICO
	RECONOCIMIENTO POR LA VALIOSA APORTACIÓN AL CONOCIMIENTO CIENTÍFICO Y TECNOLÓGICO - PUEBLA 2010
	Reconocimiento por la valiosa aportación al conocimiento científico y tecnológico a través del proyecto "Simulación Computacional de la Estructura y Propiedades de Materiales Moleculares Potencialmente Útiles para la Fabricación de Dispositivos Fotovoltaicos y Celdas Solares"
2010	UNIVERSIDAD AUTONOMA DE SINALOA (UAS) MÉXICO
	RECONOCIMIENTO POR IMPARTICIÓN DE SEMINARIO EN FACULTAD DE INGENIERÍA MOCHIS - UAS

	Reconocimiento por impartición de Seminario "Modelación Molecular de Nanomateriales para Fotosíntesis Artificial" - Facultad de Ingeniería Mochis - Universidad Autónoma de Sinaloa - Los Mochis, Sinaloa - 7 de Diciembre de 2012
2010	CONSEJO NACIONAL DE CIENCIA Y TECNOLOGIA (CONACYT) MÉXICO
	PROGRAMA INNOVATEC 2010
	Reconocimiento por la Participación como Evaluador del Programa INNOVATEC 2010
2010	GOBIERNO DEL ESTADO MÉXICO
	CONFERENCIA "MODELADO MOLECULAR DE NANOMATERIALES PARA FOTOVOLTAICA MOLECULAR"
	Reconocimiento otorgado por el Gobierno del Estado Nuevo León y el Cluster de Nanotecnología de Monterrey por la presentación de la Conferencia "Modelado Molecular de Nanomateriales para Fotovoltaica Molecular" en el marco de la Reunión NanoMonterrey 2010
2010	CONSEJO NACIONAL DE CIENCIA Y TECNOLOGIA (CONACYT) MÉXICO
	ESTANCIAS POSTDOCTORALES CONACYT 2010
	Reconocimiento como Evaluador de Estancias Postdoctorales CONACYT 2010
2010	SNI 3
2010	CENTRO DE INVESTIGACION EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. (CIMAV) MÉXICO
	JEFE DE DEPARTAMENTO - CIMAV
	Jefe del Departamento de Simulación Computacional y Modelado Molecular del CIMAV
2010	SOCIEDAD MEXICANA DE MATERIALES, A.C. MÉXICO
	RECONOCIMIENTO SOCIEDAD MEXICANA DE MATERIALES, AC
	Reconocimiento otorgado por la Sociedad Mexicana de Materiales, AC por la Presentación del Trabajo ¿Density Functional Theory Study of Spectroscopic Properties of Chlorophyll a and Analogues Molecules¿ en el marco del Theory and Computer Simulation of Materials Symposium del XIX International Materials Research Congress ¿ Cancún, Quintana Roo ¿ México
2010	UNIVERSIDAD AUTONOMA DEL ESTADO DE HIDALGO MÉXICO
	IX RMFQT
	Reconocimiento otorgado por el Área Académica de Química y el Cuerpo Académico de Química Inorgánica Experimental y Computacional de la Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo por la Contribución como Ponente en el marco de la IX Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica ¿ Pachuca, Hidalgo ¿ México
2010	UNIVERSITA DEGLI STUDI DI ROMA ITALY

ISOPHOS 2010

Reconocimiento otorgado por CHOSE and DYERS por la Participación en la International School on Organic Photovoltaics - ISOPHOS 2010 ¿ Ventotene, Lt ¿ Italia

2010 CENTRO DE INVESTIGACION EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. (CIMAV)
MÉXICO

7MO CONGRESO DE MATERIALES, AMBIENTAL Y ENERGÍAS RENOVABLES

Reconocimiento otorgado por el Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC por la Participación en el 7mo Congreso de Materiales, Ambiental y Energías Renovables ¿ Chihuahua, Chih. ¿ México

2009 UNIVERSIDAD AUTONOMA DE CHIHUAHUA MÉXICO

XXXIV SEMANA DE QUÍMICA DE LA UACH

Reconocimiento como Evaluador de Carteles en la XXXIV Semana de Química de la UACH - Universidad Autónoma de Chihuahua

CONSEJO ESTATAL DE INVESTIGACION CIENTIFICA Y DESARROLLO TECNOLOGICO MÉXICO

PROGRAMA COMECYT 2009

Renocimiento como Evaluador del Programa de Inversión en Investigación, Desarrollo Tecnológico e Innovación del Estado de México

CONSEJO NACIONAL DE CIENCIA Y TECNOLOGIA (CONACYT)
MÉXICO

TALLER TEMÁTICO DE EXPERTOS EN NANOCIENCIAS Y NANOTECNOLOGÍA

Reconocimiento por la Participación en Taller Temático de Expertos en Nanociencias y Nanotecnología

CONSEJO NACIONAL DE CIENCIA Y TECNOLOGIA (CONACYT) MÉXICO

IV RMFQT

Subsidio otorgado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología para la Organización de la IV Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica (IV RMFQT) - Chihuahua - México

2005 SNI 2

2009

2009

2005

2005

2005

CONSEJO NACIONAL DE CIENCIA Y TECNOLOGIA (CONACYT)
MÉXICO

CONAECQ 2005

Miembro del Comité Evaluador del Consejo Nacional de la Enseñanza y el Ejercicio Profesional de las Ciencias Químicas (CONAECQ)

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE CHIHUAHUA MÉXICO

CONSEJO EDITORIAL UACH

Miembro del Consejo Editorial de la Universidad Autónoma de Chihuahua

2004	CENTRO DE INVESTIGACION EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. (CIMAV) MÉXICO
	PRINATEC
	Coordinador Responsable del Programa Académico Institucional de Nanotecnología - PRINATEC, del Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC - CIMAV - Chihuahua - México
2004	CENTRO DE INVESTIGACION EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. (CIMAV) MÉXICO
	CAI - CIMAV
	Miembro del Consejo Académico Interno del CIMAV
2004	CENTRO DE INVESTIGACION EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. (CIMAV) MÉXICO
	COMITÉ DEL ADMISIÓN AL DOCTORADO - CIMAV
	Coordinador del Comité de Admisión al Doctorado en Ciencia de Materiales del CIMAV
2004	CENTRO DE INVESTIGACION EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. (CIMAV) MÉXICO
	COMITÉ DE POSGRADO - CIMAV
	Miembro del Comité de Posgrado del CIMAV
2001	SNI 2
1999	CONICET ARGENTINA INVESTIGADOR INDEPENDIENTE - CONICET Investigador Independiente - CONICET
1999	CONSEJO NACIONAL DE CIENCIA Y TECNOLOGIA (CONACYT) MÉXICO CÁTEDRA PATRIMONIAL DE EXCELENCIA - NIVEL II - CONACYT Cátedra Patrimonial de Excelencia - Nivel II - CONACYT
1999	CENTRO DE INVESTIGACION EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. (CIMAV) MÉXICO INVESTIGADOR TITULAR C Investigador Titular C

1995	UNIVERSIDAD FEDERAL DE SÃO CARLOS BRAZIL 3ER SBQT
	Invitación financiada por el Comité Organizador para participar en el 3er Simposio Brasileiro de Química Teórica
1994	CONICET ARGENTINA FUNDACIÓN ANTORCHAS - PROGRAMA PARA CIENTÍFICOS JÓVENES
	Beca otorgada por la Fundación Antorchas dentro del Programa de Subsidios a la Investigación para Científicos Jóvenes
1993	UNIVERSITA DELLA CALABRIA ITALY
	NATO-ADVANCED STUDY INSTITUTE - METAL-LIGAND INTERACTIONS
	Invitación financiada por la OTAN para participar en el NATO-Advanced Study Institute - Metal- Ligand Interactions: From Atoms, to Clusters, to Surfaces - Cetraro, Calabria, Italia
1993	SECRETARIA DE CIENCIA Y TECNOLOGIA ARGENTINA
	SECYT - RESOLUCIÓN 041/93
	Beca otorgada por la Secretaría de Ciencia y Tecnología (SECYT), por Resolución N° 041/93, para la realización de investigaciones relacionadas con el Proyecto: "Diseño y Desarrollo de Drogas y Moléculas Bioactivas por Medio de Técnicas de Computación y Quí
1993	CONICET ARGENTINA DFT 1993 - COMO, ITALIA
	Beca otorgada por el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) por Resolución N° 1585/93 para atender la 5th International Conference on the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physicss - Como - Italia
1993	CONICET ARGENTINA XXI CHITEL
	Beca otorgada por el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) para atender el XXI Congres International des Chimistes Theoriciens d'Expression Latine - Grenoble - Francia
1993	CONICET ARGENTINA
	VISITA CIENTÍFICA - UVA
	Beca otorgada por el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, por Resolución 1585/93 para realizar una Visita Científica al Departamento de Física Teórica de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Valladolid - Valladolid - España
1993	UNIVERSIDAD DE VALLADOLID SPAIN
	PROFESOR VISITANTE DE LA UNIVERSIDAD DE VALLADOLID - VALLADOLID - ESPAÑA
	Profesor Visitante en el Departamento de Física Teórica de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Valladolid - Valladolid - España
1992	CONICET ARGENTINA

1	INVESTIGADOR ADJUNTO - CONICET
	Investigador Adjunto - CONICET
	ç ,
1990	MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA, DE ESPAÑA SPAIN
	BECA POSTDOCTORAL - UVA
	Beca Postdoctoral - UVA - España
1990	UNIVERSIDAD DE PUERTO RICO PUERTO RICO
	WORKSHOP ON CALCULATION METHODS IN XAFS ANALYSIS - BROOKHAVEN NATIONAL LABORATORY
	Invitación financiada por la Universidad de Puerto Rico para participar en el Workshop on
	Calculation Methods in XAFS Analysis - Brookhaven National Laboratory
1990	SAPIENZA UNIVERSITA DI ROMA
1930	ITALY
	XIX QUITEL
	Invitación financiada por la Comunidad Económica Europea para participar en el XIX QUITEL
1989	UNIVERSIDAD DE PUERTO RICO PUERTO RICO
	BECA POSTDOCTORAL - UPR
	Beca Postdoctoral - UPR
1989	INSTITUTO DE INVESTIGACIONES FISICOQUIMICAS TEORICAS Y APLICADAS
1303	ARGENTINA
	XVII QUITEL
	Invitación financiada por el Comité Organizador para participar en el XVII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina
	de Quillicos Teoricos de Expresion Latina
1989	INSTITUTO DE INVESTIGACIONES FISICOQUIMICAS TEORICAS Y APLICADAS ARGENTINA
T	MIEMBRO DEL COMITÉ ORGANIZADOR DEL XVIII QUITEL
	Miembro del Comité Organizador del XVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de
	Expresión Latina - Argentina - 1989
1988	CONICET
1900	ARGENTINA
	BECA EXTERNA - CONICET
	Beca Externa - CONICET
1988	THE UNIVERSITY OF NORTH CAROLINA AT CHAPEL HILL UNITED STATES OF AMERICA
T	DECA DOCTORAL LINE AT CHART LINE

BECA POSTDOCTORAL - UNC AT CHAPEL HILL

	Beca Postdoctoral - UNC at Chapel Hill
1987	UNIVERSIDAD NACIONAL DE MAR DEL PLATA ARGENTINA V CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Invitación financiada por el Comité Organizador para participar en el V Congreso Argentino de Fisicoquímica
1985	CONICET ARGENTINA BECARIO DE PERFECCIONAMIENTO - CONICET Becario de Perfeccionamiento - CONICET
1983	CONICET ARGENTINA BECARIO DE INICIACIÓN - CONICET Becario de Iniciación - CONICET

TRAYECTORIA PROFESIONAL

IRATECION	RIA PROFESIONAL
2001-09-01	CENTRO DE INVESTIGACION EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. (CIMAV) INVESTIGADOR TITULAR C DE TIEMPO COMPLETO - INVESTIGADOR NACIONAL SNI EMÉRITO
	Investigador Titular C de Tiempo Completo - Investigador Nacional SNI Emérito
2001-01-02	CONSEJO NACIONAL DE CIENCIA Y TECNOLOGIA (CONACYT) INVESTIGADOR NACIONAL SNI NIVEL II
	Investigador Nacional SNI Nivel II
1999-09-15	CONSEJO NACIONAL DE CIENCIA Y TECNOLOGIA (CONACYT) CÁTEDRA PATRIMONIAL DE EXCELENCIA NIVEL II Catedrático CONACYT
	Caleuratico CONACTT
1994-01-01	UNIVERSIDAD NACIONAL DE LUJAN
1994-01-01	PROFESOR ADJUNTO CON DEDICACIÓN EXCLUSIVA
	Profesor Adjunto con dedicación Exclusiva

1992-09-01	INVESTIGADOR INDEPENDIENTE DEL CONICET - CEQUINOR Investigador Independiente del CONICET - CEQUINOR
1990-09-01	UNIVERSIDAD DE VALLADOLID INVESTIGADOR ASOCIADO POSTDOCTORAL Investigador Asociado Postdoctoral
1989-10-01	UNIVERSIDAD DE PUERTO RICO INVESTIGADOR ASOCIADO POSTDOCTORAL Investigador Asociado Postdoctoral
1988-09-01	UNIVERSIDAD DE CAROLINA DEL NORTE EN CHAPEL HILL INVESTIGADOR ASOCIADO POSTDOCTORAL Investigador Asociado Postdoctoral
1985-01-01	INSTITUTO DE INVESTIGACIONES FISICOQUIMICAS TEORICAS Y APLICADAS BECARIO DE PERFECCIONAMIENTO CONICET - INIFTA Becario de Perfeccionamiento CONICET - INIFTA
1983-01-01	INSTITUTO DE INVESTIGACIONES FISICOQUIMICAS TEORICAS Y APLICADAS BECARIO DE INICIACIÓN DEL CONICET - INIFTA Becario de Iniciación del CONICET - INIFTA
1982-04-01	QUIMICA ESTRELLA SA AYUDANTE DE INVESTIGACIÓN Estudio de métodos de síntesis orgánica para su aplicación en la producción de herbicidas y pesticidas.
1981-10-01	SA ALBA AYUDANTE DE INVESTIGACIÓN Estudio de polímeros y su aplicación en la preparación de pinturas en polvo.
1977-01-01	QUIMICA ESTRELLA SA AYUDANTE DE INVESTIGACIÓN Estudio de métodos de síntesis orgánica para su aplicación en la producción de herbicidas y

ESTANCIAS DE INVESTIGACIÓN

1999-09-01 - 2001-08-

CENTRO DE INVESTIGACION EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. (CIMAV)

ACADÉMICA

CÁTEDRA PATRIMONIAL DE EXCELENCIA NIVEL II

Cátedra Patrimonial de Excelencia Nivel II

1993-09-01 - 1993-10-01 **UNIVERSIDAD DE VALLADOLID**

ACADÉMICA

ESTANCIA ACADÉMICA - UVA

Estancia Académica

1989-09-01 - 1990-08-01 UNIVERSIDAD DE PUERTO RICO

POSDOCTORAL

ESTANCIA POSTDOCTORAL - UPR

Estancia Postdoctoral

) 1988-08-01 - 1989-08-01 UNIVERSIDAD DE CAROLINA DEL NORTE EN CHAPEL HILL

POSDOCTORAL

ESTANCIA POSTDOCTORAL - UNC CHAPEL HILL

Estancia Postdoctoral

1990-09-15 - 1992-09-30 UNIVERSIDAD DE VALLADOLID

POSDOCTORAL

ESTANCIA POSTDOCTORAL - UVA

Estancia Postdoctoral

2013-09-01 - 2013-11-

UNIVERSITAT DE LES ILLES BALEARS

ACADÉMICA

ESTANCIA ACADÉMICA - UIB EN CALIDAD DE PROFESOR INVITADO

Descriptores de reactividad química relacionados con los inhibidores moleculares de los productos finales de la glicación avanzada (AGEs) Resultados publicados en revistas científicas internacionales indizadas

2016-02-02 - 2017-02-01 **UNIVERSITAT DE LES ILLES BALEARS**

SABÁTICA

ESTANCIA SABÁTICA - UIB

Descriptores de reactividad química relacionados con los inhibidores moleculares de los productos finales de la glicación avanzada (AGEs) Resultados publicados en revistas científicas internacionales indizadas

2017-09-01 - 2017-11-30

UNIVERSITAT DE LES ILLES BALEARS

ACADÉMICA

ESTANCIA ACADÉMICA - UIB EN CALIDAD DE PROFESOR INVITADO

Descriptores de reactividad química relacionados con colorantes de tipo melanoidínico -

Resultados publicados en revistas científicas internacionales indizadas

2018-09-01 - 2018-11-30

UNIVERSITAT DE LES ILLES BALEARS

ACADÉMICA

ESTANCIA ACADÉMICA - UIB EN CALIDAD DE PROFESOR INVITADO

DFT Conceptual y Quimionformática Aplicada al Estudio de Péptidos de Origen Marino y Vegetal

2019-09-01 - 2019-11-30

UNIVERSITAT DE LES ILLES BALEARS

ACADÉMICA

ESTANCIA ACADÉMICA - UIB EN CALIDAD DE PROFESOR INVITADO

DFT Conceptual y Quimionformática Aplicada al Estudio de Péptidos de Origen Marino y Vegetal

DOCENCIA

CURSOS IMPARTIDOS

INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA COMPUTACIONAL

8247524760

2012-09-05 / 2012-12-08

SNP

INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA COMPUTACIONAL

8247524760

2012-09-05 / 2012-12-08

SNP

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE LA ESTRUCTURA Y PROPIEDADES MOLECULARES DE FTALOCIANINAS Y SUS 8357000000 COMPLEJOS METÁLICOS - DR. ZEFERINO RAMÍREZ-

RAMIREZ

2009-01-02 / 2010-12-31 **POSTDOCTORADO**

NO SNP

INTRODUCCIÓN A LA NANOTECNOLOGÍA

2006-09-05 / 2006-12-09

SNP

INTRODUCCIÓN A LA NANOTECNOLOGÍA

8247524760

2006-09-05 / 2006-12-09

SNP

QUÍMICA COMPUTACIONAL PARA NANOTECNOLOGÍA

8247524760

2006-09-01 / 2006-12-06

SNP

QUÍMICA COMPUTACIONAL DE AMINOÁCIDOS. DIPÉPTIDOS Y TRIPÉPTIDOS - DRA. AMELIA VALDEZ **AGUIRRE**

2006-01-02 / 2006-12-31 **POSTDOCTORADO**

NO_SNP

QUÍMICA COMPUTACIONAL DE MATERIALES MOLECULARES DERIVADOS DE LA CAPSAICINA - DR. RAMÓN OLIVAS-VARGAS

2006-01-02 / 2006-12-31 **POSTDOCTORADO**

NO_SNP

QUÍMICA COMPUTACIONAL DE MATERIALES MOLECULARES AUTOENSAMBLADOS - DR. MARCO GALLO-ESTRADA

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE MATERIALES **MOLECULARES**

8247524760

2006-01-02 / 2007-12-31 POSTDOCTORADO

NO_SNP

INTRODUCCIÓN A LA NANOCIENCIA Y LA NANOTECNOLOGÍA

8247524760

2005-02-08 / 2005-05-31

SNP

NANOTECNOLOGÍA COMPUTACIONAL

8247524760

2005-02-02 / 2005-06-03

SNP

QUÍMICA ORGÁNICA FUNDAMENTAL

8247524760

2003-02-06 / 2003-06-01

SNP

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE FÁRMACOS

8247524760

2003-02-04 / 2018-05-31

Doctorado SNP

INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA COMPUTACIONAL

8247524760

2001-02-13 / 2001-06-15

SNP

FISICOQUÍMICA DEL MEDIO AMBIENTE NATURAL

1998-08-04 / 1998-12-02

LICENCIATURA EN INFORMACIÓN AMBIENTAL

NO_SNP

QUÍMICA GENERAL

1997-08-01 / 1997-12-02 INGENIERÍA INDUSTRIAL

NO_SNP

QUÍMICA GENERAL

1996-08-01 / 1996-12-01 INGENIERÍA INDUSTRIAL

NO_SNP

QUÍMICA GENERAL

1995-08-01 / 1995-12-01 **INGENIERÍA INDUSTRIAL**

NO SNP

FISICOQUÍMICA II

1994-08-02 / 1994-12-01

LICENCIATURA EN CIENCIAS QUÍMICAS

NO_SNP

FISICOQUÍMICA II

2005-02-12 / 2005-06-09

SNP

INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA COMPUTACIONAL

8247524760

2005-02-04 / 2005-06-11

SNP

INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA COMPUTACIONAL

8247524760

2003-02-07 / 2003-06-05

SNP

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE INHIBIDORES DE

CORROSIÓN

8247524760

2003-02-04 / 2003-06-30

SNP

MODELADO MOLECULAR DE ESTRUCTURAS Y

PROPIEDADES DE LOS POLÍMEROS

8247524760

2003-02-04 / 2003-05-31

SNP

ELEMENTOS DE QUÍMICA AMBIENTAL

1999-03-02 / 1999-06-30

LICENCIATURA EN INFORMACIÓN AMBIENTAL

NO_SNP

ELEMENTOS DE QUÍMICA AMBIENTAL

1998-03-03 / 1998-07-01

LICENCIATURA EN INFORMACIÓN AMBIENTAL

NO_SNP

INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA

1997-03-04 / 1997-06-30

INGENIERÍA EN ALIMENTOS

NO_SNP

INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA

1996-03-01 / 1996-07-02

INGENIERÍA EN ALIMENTOS

NO_SNP

INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA

1995-03-02 / 1995-07-01

INGENIERÍA EN ALIMENTOS

NO_SNP

FISICOQUÍMICA I

1994-02-02 / 1994-07-01

LICENCIATURA EN CIENCIAS QUÍMICAS

NO_SNP

FISICOQUÍMICA I

1993-08-02 / 1993-12-01

LICENCIATURA EN CIENCIAS QUÍMICAS

NO_SNP

QUÍMICA FÍSICA II

1987-08-03 / 1987-12-01

LICENCIATURA EN CIENCIAS QUÍMICAS

NO SNP

QUÍMICA FÍSICA I

1987-03-03 / 1987-07-01

LICENCIATURA EN CIENCIAS QUÍMICAS

NO SNP

1993-03-02 / 1993-06-30

LICENCIATURA EN CIENCIAS QUÍMICAS

NO_SNP

QUÍMICA FÍSICA III

1987-08-03 / 1987-12-01

LICENCIATURA EN CIENCIAS QUÍMICAS

NO SNP

TRABAJOS DE TITULACIÓN

ESTUDIO DE PROPIEDADES ESTRUCTURALES, ELÉCTRICAS, OPTICAS Y TERMOQUÍMICAS DE OLIGOTIADIAZOLES $2002-11-02 \cdot 2002-11-02$

Maestría

Terminada

ESTUDIO COMPUTACIONAL DE HÍBRIDOS DE FULLERENO OLIGOFENILENVINILENO

2007-03-02 - 2007-03-02

Maestría

Terminada

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE NANOMATERIALES BASADOS EN EL SNO2

2008-02-02 - 2008-02-02

Maestría

Terminada

MODELACIÓN MOLECULAR DE SISTEMAS FOTOSENSIBLES PARA CELDAS SOLARES SENSIBILIZADAS POR COLORANTE

2010-12-02 - 2010-12-02

Maestría

Terminada

DESARROLLO DE UNA METODOLOGÍA DE ESTABLECIMIENTO Y MULTIPLICACIÓN IN VITRO UTILIZANDO DIFERENTES EXPLANTES DE VITIS VINIFERA

2011-12-02 · 2011-12-02

Maestría

Terminada

ANÁLISIS QUÍMICO COMPUTACIONAL EN COLORANTES CT3S, CT300 Y CT325 UTILIZADOS EN CELDAS SOLARES SENSIBILIZADAS

2013-04-02 - 2013-04-02

Maestría

Terminada

CARACTERIZACIÓN MOLECULAR COMPUTACIONAL DE LOS COLORANTES CT-7 (C33H31IN2O2), CT-500 (C43H59IN2O4) Y CT-525 (C40H41IN2O2) PARA SU POSIBLE APLICACIÓN EN CELDAS SOLARES

2013-06-04 · 2013-06-04

Maestría

Terminada

0	
EFECTO DE LA VARIACIÓN DEL CONJUNTO DE BASE EN EL ANÁLISIS QUÍMICO TI ORGÁNICOS USADOS EN CELDAS SOLARES 2013-06-04 · 2013-06-04	EÓRICO DE COLORANTES
Maestría	
Terminada	
CALIDAD POLIFENÓLICA Y CARACTERIZACIÓN DE VINOS JÓVENES DE MESA PRO 2014-06-03 · 2014-06-03	DDUCIDOS EN CHIHUAHUA, MÉXICO
Maestría	
Terminada	
DISEÑO MOLECULAR DE UN GRUPO DONADOR DE ELECTRONES DERIVADO DE T QUINOXALINA CON POTENCIAL APLICACIÓN EN CELDAS SOLARES SENSIBILIZAD 2016-06-02 · 2016-06-02	
Maestría	
Terminada	
Terminada	
ESTUDIO QUÍMICO CUÁNTICO DEL EFECTO DEL PUENTE PI SOBRE LAS PROPIED DE SENSIBILIZADORES PARA DSSC INCORPORANDO UNIDADES DE DIOXITIOFEN 2016-06-02 · 2016-06-02 Maestría	
Terminada	
SIMULACIÓN COMPUTACIONAL Y DISEÑO MOLECULAR DE INHIBIDORES DE CORI 2005-10-04 · 2005-10-04	ROSIÓN
Doctorado	
Terminada	
ESTUDIO COMPUTACIONAL DEL MECANISMO ANTIOXIDANTE DE LOS FLAVONOIS CIANIDINA, BASADO EN SU SECUENCIA DE DESPROTONACIÓN 2006-11-02 · 2006-11-02 Doctorado Terminada	DES QUERCETINA, (+)-CATEQUINA Y
SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE ANTIPARASITARIOS BASADOS EN EL ANILLO 2007-01-16 · 2007-01-16	TIADIAZÓLICO
Doctorado	
Terminada	
ACTIVIDAD QUÍMICA DE FÁRMACOS CONTRA MYCOBACTERIUM TUBERCULOSIS FULLERENOS	FAVORECIDA POR NANOTUBOS Y
2008-01-15 · 2008-01-15	
Doctorado	
Terminada	
ESTUDIO TEÓRICO DE EFECTOS DE SUSTITUCIÓN POR GRUPOS FUNCIONALES E ANTRACENO DERIVADOS EN SEMICONDUCTORES ORGÁNICOS 2008-11-04 · 2008-11-04	N 4,9-DIFENILANTRAZOLINAS Y
Doctorado	
Terminada	
EVALUACIÓN TEÓRICA DE AGENTES DE POLIMERIZACIÓN RAFT USANDO CÁLCU 2009-04-02 · 2009-04-02	LOS DFT

CONAHCYT - RIZOMA - PERFIL ÚNICO

Doctorado Terminada

ANÁLISIS Y MODELADO MOLECULAR DEL FLUORÓFORO, INTERRUPTOR Y SONDA DE UN BIOSENSOR PARA DETECTAR MYCOBACTERIUM TUBERCULOSIS 2009-04-02 · 2009-04-02 Doctorado
Terminada
SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE LA ESTRUCTURA Y PROPIEDADES MOLECULARES DE PIGMENTOS CAROTENOIDES PARA SENSIBILIZACIÓN DE CELDAS SOLARES FOTOVOLTAICAS 2010-10-01 · 2010-10-01
Doctorado
Terminada
ESTUDIO TEÓRICO DE LOS EFECTOS DE IMPUREZAS DE SUBSTITUCIÓN DE AZUFRE EN ÓXIDO DE ZINC USANDO TEORÍA DE FUNCIONALES DE LA DENSIDAD 2011-07-01 · 2011-07-01
Doctorado
Terminada -
ESTUDIO COMPUTACIONAL DE TINTE INDIGO Y DERIVADOS, PARA USO EN CELDAS SOLARES 2013-02-05 · 2013-02-05
Doctorado Terminada
Terminada
ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE MATERIALES NANOESTRUCTURADOS DE ZNO 2013-07-03 · 2013-07-03
Doctorado
Terminada -
EVALUACIÓN DE LA EFICIENCIA DE UNA CELDA SOLAR SENSIBILIZADA POR COLORANTE MEDIANTE MODELADO MOLECULAR Y TEORÍA DE FUNCIONALES DE LA DENSIDAD 2014-06-03 · 2014-06-03
Doctorado
Terminada
SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE LA ESTRUCTURA Y PROPIEDADES MOLECULARES DE CUMARINAS Y DE ANTOCIANINAS Y FLAVONOIDES DERIVADOS DE LA VITIS VINIFERA 2015-12-02 · 2015-12-02
Doctorado
Terminada Terminada
ESTUDIO TEÓRICO SOBRE LAS PROPIEDADES ÓPTICAS, ELECTRÓNICAS Y DE REACTIVIDAD DE COLORANTES DERIVADOS DE CARBAZOL Y SU POTENCIAL USO EN DSSC 2022-02-17 · 2022-02-17
2022-02-17 · 2022-02-17 Doctorado
Terminada
EFECTO DEL GRUPO DE ANCLAJE EN LAS PROPIEDADES OPTOELECTRÓNICAS DE COLORANTES BASADOS EN TRIFENILAMINA Y CARBAZOL CON VARIANTES EN EL PUENTE PI: UN ESTUDIO TEÓRICO 2022-07-05 · 2022-07-05
Terminada

INCLUSIÓN DE AZOMETINA EN EL PUENTE PI COMO POTENCIADOR DE LA PROPIEDADES FISICOQUÍMICAS DE COLORANTES DERIVADOS DE CARBAZOL

2023-02-03 · 2023-02-03

PRODUCCIÓN CIENTÍFICA Y HUMANISTA

ARTÍCULOS

MARINE TOXINS AS PHARMACEUTICAL TREASURE TROVES: A FOCUS ON SAXITOXIN DERIVATIVES FROM A COMPUTATIONAL POINT OF VIEW

MOLECULES

Año: 2024

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 1420-3049

DOI: https://doi.org/10.3390/molecules29010275

Autor(es): Norma Flores Holguín, Joan S. Salas Leiva, Erick J. Núñez Vázquez, Dariel Tovar Ramírez,

AUTHOR CORRECTION: INTEGRATED APPROACH FOR STUDYING BIOACTIVE COMPOUNDS FROM CLADOSPORIUM SPP. AGAINST ESTROGEN RECEPTOR ALPHA AS BREAST CANCER DRUG TARGET

SCIENTIFIC REPORTS

Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 20452322 DOI: 10.1038/s41598-023-28772-0

Autor(es): Satish Anandan , Hittanahallikoppal Gajendramurthy Gowtham , C. S. Shivakumara , Anjana Thampy , Sudarshana Brijesh Singh , Mahadevamurthy Murali , Chandan Shivamallu , Sushma Pradeep , Natarajamurthy Shilpa , Ali A. Shati , Mohammad Y. Alfaifi , Serag Eldin I. Elbehairi , Joaquín Ortega Castro , Juan Frau , Norma Flores Holguín , Shiva Prasad Kollur ,

Daniel Glossman Mitnik,

PRELIMINARY EVALUATION OF LABLAB PURPUREUS PHYTOCHEMICALS FOR ANTI- BOHV1 ACTIVITY USING IN VITRO AND IN SILICO APPROACHES

ACS OMEGA Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 24701343

DOI: https://doi.org/10.1021/acsomega.3c01478

Autor(es): Smitha S Bhat , Sushma Pradeep , Sharanagouda S Patil , Norma Flores Holguín , Daniel Glossman Mitnik , Juan Frau , Sarana Rose Sommano , Nemat Ali , Mohamed Mohany , Chandan Shivamallu , Shashanka K Prasad , Shiva Prasad Kollur ,

Ver Documento

CDFTBASED CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES ANALYSIS OF THE FLUORINE SUBSTITUTION IN THE SELECTIVE ESTROGEN RECEPTOR MODULATOR (SERM) TAMOXIFEN

THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS

Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 1432881X

ISSN electrónico: 14322234

DOI: https://doi.org/10.1007/s00214-023-03018-4

Autor(es): Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

EXPLORING THE POTENTIAL AND LIMITATIONS OF CYCLOPEPTIDES AS PHARMACEUTICAL DRUGS: A COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY APPROACH TO THE STUDY OF GRASSYPEPTOLIDES AG

THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS

Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 1432881X ISSN electrónico: 14322234

DOI: https://doi.org/10.1007/s00214-023-03031-7

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

COMPUTATIONAL CHEMISTRY AND MOLECULAR MODELING TECHNIQUES FOR THE STUDY OF MICROPEPTIN EI-964: INSIGHTS INTO ITS CHEMICAL REACTIVITY AND POTENTIAL PHARMACEUTICAL PROPERTIES

COMPUTATIONAL MOLECULAR BIOSCIENCE

Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor de correspondencia

ISSN impreso: 21653445 ISSN electrónico: 21653453

DOI: https://doi.org/10.4236/cmb.2023.133003

Autor(es): Norma Flores Holguín , Juan Frau , Daniel Glossman Mitnik ,

TALAROLIDE A AND TALAROPEPTIDES A-D: POTENTIAL MARINE-DERIVED THERAPEUTIC PEPTIDES WITH INTERESTING CHEMISTRY AND BIOLOGICAL ACTIVITY

MOLECULES Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 14203049

DOI: https://doi.org/10.3390/molecules28186708

Autor(es): Norma Flores Holquín, Joan Sebastian Salas Leiva, Daniel Glossman Mitnik,

UNDERSTANDING THE CHEMICAL REACTIVITY AND BIOLOGICAL PROPERTIES OF PATELLAMIDES USING THEORETICAL AND COMPUTATIONAL METHODS

COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY

Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 2210271X ISSN electrónico: 22102728

DOI: https://doi.org/10.1016/j.comptc.2023.114329

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

SYNTHESIS OF A NEW DINUCLEAR CU(I) COMPLEX WITH A TRIAZINE LIGAND AND DIPHENYLPHOSPHINE METHANE: X-RAY STRUCTURE, OPTICAL PROPERTIES, DFT CALCULATIONS, AND APPLICATION IN DSSCS

INORGANICS

Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 23046740

DOI: https://doi.org/10.3390/inorganics11100379

Autor(es): Carlos A. Peñuelas , José J. Campos Gaxiola , Rody Soto Rojo , Adriana Cruz Enríquez , Edgar A. Reynoso Soto , Valentín Miranda Soto , Juventino J. García , Marcos Flores Álamo , Jesús Baldenebro López , Daniel Glossman Mitnik ,

COMPUTATIONAL DISCOVERY OF MARINE MOLECULES OF THE CYCLOPEPTIDE FAMILY WITH THERAPEUTIC POTENTIAL

PHARMACEUTICALS

Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 14248247

DOI: https://doi.org/10.3390/ph16101377

Autor(es): Norma Flores Holguín, Joan S. Salas Leiva, Daniel Glossman Mitnik,

EXPLORING MARINE TOXINS: COMPARATIVE ANALYSIS OF CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES AND POTENTIAL FOR DRUG DISCOVERY

FRONTIERS IN CHEMISTRY

Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 22962646

DOI: https://doi.org/10.3389/fchem.2023.1286804

Autor(es): Norma Flores Holguín, Joan S. Salas Leiva, Erick J. Núñez Vázquez, Dariel Tovar Ramírez, Daniel Glossman Mitnik

MOLECULAR INSIGHTS INTO THE IN SILICO DISCOVERY OF CORILAGIN FROM TERMINALIA CHEBULA AS A POTENTIAL DUAL INHIBITOR OF SARS-COV-2 STRUCTURAL PROTEINS

JOURNAL OF BIOMOLECULAR STRUCTURE AND DYNAMICS

Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 07391102 ISSN electrónico: 15380254

DOI: https://doi.org/10.1080/07391102.2022.2158943

Autor(es): Sushma Pradeep , Shashank M Patil , Chandan Dharmashekara , Anisha Jain , Ramith Ramu , Prithvi S Shirahatti , Subhankar P Mandal , Pruthvish Reddy , Chandrashekar Srinivasa , haranagouda S Patil , Joaquín Ortega Castro , Juan Frau ,

Norma Flores Holguín , Chandan Shivamallu , Shiva Prasad Kollur , Daniel Glossman Mitnik ,

INVESTIGATING THE CHEMICAL REACTIVITY OF KAHALALIDES: A PROMISING SOURCE OF THERAPEUTIC PEPTIDES FROM MARINE NATURAL PRODUCTS USING CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY

CHEMISTRYSELECT

Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor de correspondencia

ISSN electrónico: 23656549

DOI: https://doi.org/10.1002/slct.202303207

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

CONCEPTUAL DFT-BASED COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY, PHARMACOKINETICS STUDY AND ADMET REPORT OF THE VERAGUAMIDES AG FAMILY OF MARINE NATURAL DRUGS

MARINE DRUGS

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 16603397 DOI: 10.3390/md20020097

Autor(es): Norma Flores Holguín, Joaquín Ortega Castro, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

FOUR-COORDINATE MONOBORON COMPLEXES WITH 8-HYDROXYQUINOLIN-5-SULFONATE: SYNTHESIS, CRYSTAL STRUCTURES, DFT STUDIES AND LUMINESCENCE PROPERTIES

CRYSTALS

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 20734052 DOI: 10.3390/cryst12060783

Autor(es): Glenda Y. Ruelas Álvarez, A. Jaquelin Cárdenas Valenzuela, Luis L. Galaviz Moreno, Adriana Cruz, José J. Campos Gaxiola, Herbert Hopfl, Jesús Baldenebro López, Eva C. Vargas Olvera, Valentín Miranda Soto, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

PHYTOCONSTITUENTS OF WITHANIA SOMNIFERA UNVEILED ASHWAGANDHANOLIDE AS A POTENTIAL DRUG TARGETING BREAST CANCER: INVESTIGATIONS THROUGH COMPUTATIONAL, MOLECULAR DOCKING AND CONCEPTUAL DFT STUDIES

PLOS ONE

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 19326203 **DOI:** 10.1371/journal.pone.0275432

Autor(es): Hittanahallikoppal Gajendramurthy Gowtham, Mahadevamurthy Murali, Sudarshana Brijesh Singh, Chandan Shivamallu, Sushma Pradeep, C. S. Shivakumar, Satish Anandan, Anjana Thampy, Raghu Ram Achar, Ekaterina Silina, Victor Stupin, Joaquín Ortega Castro, Juan Frau, Norma Flores Holguín, Kestur Nagaraj Amruthesh Amruthesh, Shiva Prasad Kollur, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

INTEGRATED APPROACH FOR STUDYING BIOACTIVE COMPOUNDS FROM CLADOSPORIUM SPP. AGAINST ESTROGEN RECEPTOR ALPHA AS BREAST CANCER DRUG TARGET

SCIENTIFIC REPORTS

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 20452322 DOI: 10.1038/s41598-022-22038-x

Autor(es): Satish Anandan, Hittanahallikoppal Gajendramurthy Gowtham, C. S. Shivakumara, Anjana Thampy, Sudarshana Brijesh Singh, Mahadevamurthy Murali, Chandan Shivamallu, Sushma Pradeep, Natarajamurthy Shilpa, Ali A. Shati, Mohammad Y. Alfaifi, Serag Eldin I. Elbehairi, Joaquín Ortega Castro, Juan Frau, Norma Flores Holquín, Shiva Prasad Kollur,

,

Ver Documento

AN INSIGHT INTO REACTIVITY AND BIOACTIVITY PROPERTIES OF QUORUM SENSING PEPTIDES AGAINST PDE10A: A COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY APPROACH

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 09485023 ISSN electrónico: 16102940 DOI: 10.1007/s00894-022-05176-x

Autor(es): Bhargav Shreevatsa, Chandan Dharmasherkara, Anisha S. Jain, Raghavendra Amachawadi, Raghu Ram Achar,

Asad Syed, Chandan Shivamallu, Shiva Prasad Kolllur, Juan Frau, Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

EXPLORATION OF ANTI-HIV PHYTOCOMPOUNDS AGAINST SARS-COV-2 MAIN PROTEASE: STRUCTURE-BASED SCREENING, MOLECULAR SIMULATION, ADME ANALYSIS AND CONCEPTUAL DFT STUDIES

MOLECULES

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 14203049 DOI: 10.3390/molecules27238288

Autor(es): Mahadevamurthy Murali , Hittanahallikoppal Gajendramurthy Gowtham , Shilpa Natarajamurthy , Hemanth Kumar Naguvanahalli Krishnappa , Ana E. Ledesma , Anisha S. Jain , Ali A. Shati , Mohammad Y. Alfaifi , Serag Eldin I. Elbehairi , Joaquín Ortega Castro , Juan Frau , Norma Flores Holguín , Chandan Shivamallu , Shiva Prasad Kollur , Kestur Nagaraj

Amruthesh, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

EDITORIAL: LA CIENCIA COMPUTACIONAL EN LAS NYN

MUNDO NANO

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 24485691

DOI: https://doi.org/10.22201/ceiich.24485691e.2022.29

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Alfredo Tlahuice Flores, Ana E. Torres Hernández,

IN VITRO ANTICANCER SCREENING, MOLECULAR DOCKING AND ANTIMICROBIAL STUDIES OF TRIAZOLE-BASED NICKEL(II) METAL COMPLEXES

MOLECULES

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 14203049 DOI: 10.3390/molecules27196548

Autor(es): Sachin A Deodware, Umesh B. Barache, Pratibha C. Dhale, Kundalkesha S. Gaikwad, Chandan Shivamallu, Panchsheela A. Ubale, Ali A. Shati, Mohammad Y. Alfaifi, Serag Eldin I. Elbehairi, Raghu Ram Achar, Ekaterina Silina, Victor

Stupin, Norma Flores Holguín, Shashikant H. Gaikwad, Shiva Prasad Kollur, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

N-((1H-PYRROL-2-YL)METHYLENE)-6-METHOXYPYRIDIN-3-AMINE AND ITS CO(II) AND CU(II) COMPLEXES AS ANTIMICROBIAL AGENTS: CHEMICAL PREPARATION, IN VITRO ANTIMICROBIAL EVALUATION, IN SILICO ANALYSIS AND COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY INVESTIGATIONS

MOLECULES Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 14203049 DOI: 10.3390/molecules27041436

Autor(es): Vinusha H. Mariwany , Shiva Prasad Kollur , Bindya Shivananda , Muneera Begum , Chandan Shivamallu , Chandan Dharmashekara , Sushma Pradeep , Anisha S. Jain , Shashanka K. Prasad , Asad Syed , Abdallah M. Elgorban , Salim Al-Rejaie ,

Joaquín Ortega Castro, Juan Frau, Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

OXIDATION DEGREE OF A CELL MEMBRANE MODEL AND ITS RESPONSE TO STRUCTURAL CHANGES, A COARSE-GRAINED MOLECULAR DYNAMICS APPROACH

JOURNAL OF BIOMOLECULAR STRUCTURE AND DYNAMICS

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 07391102 ISSN electrónico: 15380254

DOI: 10.1080/07391102.2020.1833759

Autor(es): Hugo Aceves Luna, Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguín,

Ver Documento

VIRTUAL PROSPECTION OF MARINE CYCLOPEPTIDES AS THERAPEUTICS BY MEANS OF CONCEPTUAL DFT AND COMPUTATIONAL ADMET

PHARMACEUTICALS

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 14248247 DOI: 10.3390/ph15050509

Autor(es): Norma Flores Holquín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

ANTICHOLINESTERASE ACTIVITY OF ARECA CATECHU: IN VITRO AND IN SILICO GREEN SYNTHESIS APPROACH IN SEARCH FOR THERAPEUTIC AGENTS AGAINST ALZHEIMER'S DISEASE

FRONTIERS IN PHARMACOLOGY

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 16639812 DOI: 10.3389/fphar.2022.1044248

Autor(es): Sushma Pradeep , Samudyata C. Prabhuswaminath , Pruthvish Reddy , Sudhanva M. Srinivasa , Ali A. Shati , Mohammad Y. Alfaifi , Serag Eldin I. Elbehairi , Raghu Ram Achar , Ekaterina Silina , Victor Stupin , Natalia Manturova , Daniel

Glossman Mitnik, Chandan Shivamallu, Shiva Prasad Kollur,

Ver Documento

SYNTHESIS, CRYSTAL STRUCTURE, DFT STUDIES AND OPTICAL-ELECTRO-CHEMICAL PROPERTIES OF TWO NOVEL HETEROLEPTIC COPPER(I) COMPLEXES AND APPLICATIONS IN DSSC

CRYSTALS Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 20734352 DOI: 10.3390/cryst12091240

Autor(es): Samuel Soto Acosta, José Campos Gaxiola, Edgar Reynoso Soto, Adriana Cruz Enríquez, Jesús Baldenebro López

, Herbert Hopfl , Juventino García Alexandre , Marco Flores Alamo , Valentín Miranda Soto , Daniel Glossman Mitnik ,

Ver Documento

COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY APPROACH TO THE STUDY OF THE CHEMICAL REACTIVITY AND BIOACTIVITY PROPERTIES OF ASPERGILLIPEPTIDE D, A CYCLOPENTAPEPTIDE OF MARINE ORIGIN

SCIENTIFIC REPORTS

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 20452322 DOI: 10.1038/s41598-021-04513-z

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

COMPUTATIONAL NANOCHEMISTRY STUDY OF THE ALISPORIVIR AND CYCLOSPORIN ANTIMICROBIAL PEPTIDES THROUGH CONCEPTUAL DFT-BASED COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY AND PHARMACOKINETICS

MUNDO NANO

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 24485691

DOI: /10.22201/ceiich.24485691e.2022.29.69725

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

EDITORIAL: RECENT ADVANCES, NEW PERSPECTIVES AND APPLICATIONS OF CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY

FRONTIERS IN CHEMISTRY

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 22962646 DOI: 10.3389/fchem.2022.1003106

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

CORRECTION TO: AN INSIGHT INTO REACTIVITY AND BIOACTIVITY PROPERTIES OF QUORUM SENSING PEPTIDES AGAINST PDE10A: A COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY APPROACH

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 09485023 ISSN electrónico: 16102940 DOI: 10.1007/s00894-022-05344-z

Autor(es): Bhargav Shreevatsa, Chandan Dharmashekara, Anisha S. Jain, Raghavendra Amachawadi, Raghu Ram Achar,

Asad Syed, Chandan Shivamallu, Shiva Prasad Kollur, Juan Frau, Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik,

EVALUATION OF ANNONA MURICATA ACETOGENINS AS POTENTIAL ANTI-SARS-COV-2 AGENTS THROUGH COMPUTATIONAL APPROACHES

FRONTIERS IN CHEMISTRY

Año: 2021

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 22962646 DOI: 10.3389/fchem.2020.624716

Autor(es): Shashanka K. Prasad, Sushma Pradeep, Chandan Shimavallu, Shiva Prasad Kollur, Asad Syed, Najat Marraiki, Chukwuebuka Egbuna, Mihnea-Alexandru Gaman, Olga Kosakowska, William C. Cho, Kingsley Chukwuemeka Patrick-

Iwuanyanwu, Joaquín Ortega Castro, Juan Frau, Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

CHEMICAL SYNTHESIS, IN VITRO BIOLOGICAL EVALUATION AND THEORETICAL INVESTIGATIONS OF TRANSITION METAL COMPLEXES DERIVED FROM 2-(((5-MERCAPTO-1H-PYRROL-2-YL)IMINO)METHYL)6-METHOXYPHENOL

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Año: 2021

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 00222860

DOI: 10.1016/j.molstruc.2021.130920

Autor(es): Honnalagere Mariswamy Vinusha , Shiva Prasad Kollur , Muneera Begum , Chandan Shivamallu , Ramith Ramu , Prithvi S. Shirahatti , Nagendra Prasad , Ravindra Veerapur , Joaquín Ortega Castro , Juan Frau , Norma Flores Holguín , Daniel

Glossman Mitnik , Ver Documento

COMPUTATIONAL PHARMACOKINETICS REPORT, ADMET STUDY AND CONCEPTUAL DFT-BASED ESTIMATION OF THE CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF MARINE CYCLOPEPTIDES

CHEMISTRYOPEN

Año: 2021

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 21911363 DOI: 10.1002/open.202100178

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

A CDFT-BASED COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY (CDFT-CP) STUDY OF THE CHEMICAL REACTIVITY AND BIOACTIVITY OF THE MARINE-DERIVED ALTERNARAMIDE CYCLOPENTADEPSIPEPTIDE

JOURNAL OF CHEMISTRY

Año: 2021

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 20909063

ISSN electrónico: 20909071 DOI: 10.1155/2021/2989611

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

SYNTHESIS, COMPUTATIONAL PHARMACOKINETICS REPORT, CONCEPTUAL DFT-BASED CALCULATIONS AND ANTI-ACETYLCHOLINESTERASE ACTIVITY OF HYDROXYAPATITE NANOPARTICLES DERIVED FROM ACORUS CALAMUS PLANT EXTRACT

FRONTIERS IN CHEMISTRY

Año: 2021

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 22962646 DOI: 10.3389/fchem.2021.741037

Autor(es): Sushma Pradeep , Anisha S Jain , Chandan Dharmashekara , Shashanka K Prasad , Nagaraju Akshatha , R Pruthvish , Raghavendra G Amachawadi , Chandrashekar Srinivasa , Asad Syed , Abdallah M Elgorban , Abdulaziz A Al Kheraif , Joaquín Ortega Castro , Juan Frau , Norma Flores Holguín , Chandan Shivamallu , Shiva Prasad Kollur , Daniel Glossman Mitnik ,

Ver Documento

AN INTEGRATED MOLECULAR MODELING PROTOCOL FOR DRUG SCREENING BASED ON CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY AND CHEMOINFORMATICS FOR THE STUDY OF MARINE CYCLOPEPTIDES

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2021

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/s00894-021-04901-2

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

INVESTIGATION OF ANTIFUNGAL PROPERTIES OF SYNTHETIC DIMETHYL-4-BROMO-1-(SUBSTITUTED BENZOYL) PYRROLO[1,2-A] QUINOLINE-2,3-DICARBOXYLATES ANALOGUES: MOLECULAR DOCKING STUDIES AND CONCEPTUAL DFT-BASED CHEMICAL REACTIVITY DESCRIPTORS AND PHARMACOKINETICS EVAL

MOLECULES

Año: 2021

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 14203049 DOI: 10.3390/molecules26092722

Autor(es): Vijayakumar Uppar, Sandeep Chandrashekharappa, Chandan Shivamallu, Sushma P, Shiva Prasad Kollur, Joaquín Ortega Castro, Juan Frau, Norma Flores Holguín, Atiyaparveen I. Basarikatti, Mallikarjun Chougala, Mrudula Mohan M, Govindappa Banuprakash, Jayadev Jayadev, Katharigatta N. Venugopala, Belakatte P. Nandeshwarappa, Ravindra Veerapur, Abdulaziz A. Al-Kheraif, Abdallah M. Elgorban, Asad Syed, Kiran K. Mudnakudu Nagaraju, Basavaraj Padmashali, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

IN SILICO PHARMACOKINETICS, ADMET STUDY AND CONCEPTUAL DFT ANALYSIS OF TWO PLANT CYCLOPEPTIDES ISOLATED FROM ROSACEAE AS A COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY APPROACH

FRONTIERS IN CHEMISTRY

Año: 2021

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 22962646 DOI: 10.3389/fchem.2021.708364

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

VIRTUAL SCREENING FOR POTENTIAL PHYTOBIOACTIVES AS THERAPEUTIC LEADS TO INHIBIT NQO1 FOR SELECTIVE ANTICANCER THERAPY

MOLECULES

Año: 2021

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 14203049 DOI: 10.3390/molecules26226863

Autor(es): Bhargav Shreevatsa, Chandan Dharmashekara, , Vikas Halasumane Swamy, Meghana V. Gowda, Raghu Ram Achar, Vivek Hamse Kameshwar, Rajesh Kumar Thimmulappa, Asad Syed, Abdallah M. Elgorban, Norma Flores Holguín, Salim S. Al-

Rejaie, Joaquín Ortega Castro, Juan Frau, Chandan Shivamallu, Shiva Prasad Kollur, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

CONCEPTUAL DFT-BASED COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY OF MARINE NATURAL COMPOUNDS: DISCODERMINS A-H

PREPRINTS Año: 2020

Objetivo: Investigación Estado: Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 2310287X

DOI: 10.20944/preprints202008.0351.v1

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

KID PROCEDURE APPLIED ON THE [(PY5ME2)MOO]+ COMPLEX

ACS OMEGA Año: 2020

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 24701343 DOI: 10.1021/acsomega.0c04450

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Jorge Martínez Araya,

INFLUENCE ON THE REACTIVITY PROPERTIES OF THE SUBSTITUTION BY DIFFERENT HALOGENS ON THE CONJUGATED BACKBONE OF THE 1,3,5-TRIARYL-2-PYRAZOLINE SKELETON IN RELATION TO THE INCREASING ALKYLOXY CHAIN LENGTH: A CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY STUDY

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2020

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/s00894-020-04420-6

Autor(es): Norma Flores Holguín , Asghar Abbas , Daniel Glossman Mitnik ,

CONCEPTUAL DFT-BASED COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY OF MARINE NATURAL COMPOUNDS: DISCODERMINS A-H

MOLECULES

Año: 2020

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN electrónico: 14203049 DOI: 10.3390/molecules25184158

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

PREPARATION, SPECTROSCOPIC CHARACTERIZATION, THEORETICAL INVESTIGATIONS, AND IN VITRO ANTICANCER ACTIVITY OF CD(II), NI(II), ZN(II), AND CU(II) COMPLEXES OF 4(3H)-QUINAZOLINONE-DERIVED SCHIFF BASE

MOLECULES

Año: 2020

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 14203049 DOI: 10.3390/molecules25245973

Autor(es): Ubale Panchsheela Ashok, Shiva Prasad Kollur, Nishad Anil, Bansode Prakash Arun, Sanjay Namdev Jadhav, Sanjay Sarsamkar, Vasant Baburao Helavi, Asha Srinivasan, Sandeep Kaulage, Ravindra Veerapur, Sarah Al-Rashed, Asad

Syed, Joaquín Ortega Castro, Juan Frau, Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik,

A FAST AND SIMPLE EVALUATION OF THE CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF THE PRISTINAMYCIN FAMILY OF ANTIMICROBIAL PEPTIDES

CHEMICAL PHYSICS LETTERS

Año: 2020

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 00092614

DOI: 10.1016/j.cplett.2019.137021

Autor(es): Norma Flores Holguín , Juan Frau , Daniel Glossman Mitnik ,

Ver Documento

IN VITRO ANTICANCER ACTIVITY OF 4(3H)-QUINAZOLINONE DERIVED SCHIFF BASE AND ITS CU(II), ZN(II) AND CD(II) COMPLEXES: PREPARATION, X-RAY STRUCTURAL, SPECTRAL CHARACTERIZATION AND THEORETICAL INVESTIGATIONS

INORGANICA CHIMICA ACTA

Año: 2020

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00201693 DOI: 10.1016/j.ica.2020.119846

Autor(es): Ubale Panchsheela Ashok , Shiva Prasad Kollur , Bansode Prakash Arun , Chavan Sanjay , Karhale Shrikrishna Suresh

, Nishad Anil , Helavi Vasant Baburao , Datta Markad , Joaquín Ortega Castro , Juan Frau , Norma Flores Holguín , Daniel

Glossman Mitnik,

MOLECULAR DOCKING AND CONCEPTUAL DFT-BASED STUDY OF SOME POTENTIAL SARS-COV-2 INHIBITORS

COMPUTATIONAL MOLECULAR BIOSCIENCE

Año: 2020

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 21653445 ISSN electrónico: 21653453 DOI: 10.4236/cmb.2020.104008

Autor(es): Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik,

THEORETICAL STUDY OF THE EFFECT OF -BRIDGE ON OPTICAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF CARBAZOLE-BASED SENSITIZERS FOR DSSCS

MOLECULES Año: 2020

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 14203049 DOI: 10.3390/molecules25163670

Autor(es): Tomás Delgado Montiel, Jesús Baldenebro López, Rody Soto Rojo, Daniel Glossman Mitnik,

ASSESSMENT OF THE KID PROCEDURE ON A MOOXO COMPLEX, AN OPENSHELL SYSTEM

PREPRINTS Año: 2020

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 2310287X

DOI: 10.20944/preprints202007.0742.v1

Autor(es): Jorge Martínez Araya, Daniel Glossman Mitnik,

CRYSTAL STRUCTURE, HIRSHFELD SURFACE, DFT CALCULATIONS AND PHOTOPHYSICAL PROPERTIES OF 2,4,5-TRIS (4-PYRIDYL)IMIDAZOLE HYDROGEN CHLORIDE

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Año: 2020

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00222860

DOI: 10.1016/j.molstruc.2020.128175

Autor(es): María Edith Ruelas Avila, Adriana Cruz Enríquez, José J. Campos Gaxiola, Jesús Baldenebro López, Herbert Höpfl,

Valentín Miranda Soto, Daniel Glossman Mitnik,

THEORETICAL ASSESSMENT OF ANTIOXIDANT PROPERTY OF POLYPROPONOID AND ITS DERIVATIVES

STRUCTURAL CHEMISTRY

Año: 2020

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 10400400 ISSN electrónico: 15729001 DOI: 10.1007/s11224-019-01475-x

Autor(es): K Anbazhakan , K Sadasivam , R Praveena , Guillermo Salgado Morán , Wilson Cardona , Daniel Glossman Mitnik ,

Lorena Gerli , Ver Documento

VIRTUAL SCREENING OF MARINE NATURAL COMPOUNDS BY MEANS OF CHEMOINFORMATICS AND CDFT-BASED COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY

MARINE DRUGS

Año: 2020

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 16633097 ISSN electrónico: 16603397 DOI: 10.3390/md18090478

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

THEORETICAL MODIFICATIONS OF THE MOLECULAR STRUCTURE OF AURANTINIDIN AND BETANIDIN DYES TO IMPROVE THEIR EFFICIENCY AS DYE SENSITIZED SOLAR CELLS

JOURNAL OF COMPUTATIONAL ELECTRONICS

Año: 2020

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 15698025 ISSN electrónico: 15728137 DOI: 10.1007/s10825-020-01485-7

Autor(es): Aanuoluwapo Raphael Obasuyi, Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguín,

Ver Documento

AN ALTERNATIVE APPROACH TO COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY BASED ON CONCEPTUAL DFT AND EMPIRICAL BIOACTIVITY SCORES

MEDICINAL CHEMISTRY

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 21610444 DOI: 10.4172/2161-0444.1000531

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF STANDARD AROMATIC AMINO ACIDS STUDIED BY MEANS OF CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY

SOJ BIOCHEMISTRY

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 23764589

DOI: 10.15226/2376-4589/4/1/00132

Autor(es): Norma Flores Holguín , Juan Frau , Daniel Glossman Mitnik ,

ELECTRON INJECTION IN ANTHOCYANIDIN AND BETALAIN DYES FOR DYESENSITIZED SOLAR CELLS: A DFT APPROACH

JOURNAL OF COMPUTATIONAL ELECTRONICS

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 15698025 ISSN electrónico: 15728137 DOI: 10.1007/s10825-019-01331-5

Autor(es): Aanuoluwapo Raphael Obasuyi , Daniel Glossman Mitnik , Norma Flores Holguín ,

A COMPARISON OF CONCEPTUAL DFT AND MOLECULAR ELECTRON DENSITY THEORY (MEDT) DESCRIPTORS OF LOCAL CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES: OXYTOCIN AND VASOPRESSIN PEPTIDE HORMONES AS TEST CASES

MOJ BIOORGANIC AND ORGANIC CHEMISTRY

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 2574819X

DOI: 10.15406/mojboc.2019.03.00097

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

CHEMICAL-REACTIVITY PROPERTIES, DRUG LIKENESS, AND BIOACTIVITY SCORES OF SERAGAMIDES AF ANTICANCER MARINE PEPTIDES: CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY VIEWPOINT

COMPUTATION

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 20793197

DOI: 10.3390/computation7030052

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

CHEMICAL REACTIVITY AND BIOACTIVITY PROPERTIES OF THE PHALLOTOXIN FAMILY OF FUNGAL PEPTIDES BASED ON CONCEPTUAL PEPTIDOLOGY AND DFT STUDY

HELIYON Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 24058440

DOI: 10.1016/j.heliyon.2019.e02335

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

CONCEPTUAL DFT AS A NOVEL CHEMOINFORMATICS TOOL FOR STUDYING THE CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF THE AMATOXIN FAMILY OF FUNGAL PEPTIDES

OPEN CHEMISTRY

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 23915420 DOI: 10.1515/chem-2019-0129

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL PREDICTION OF BIOACTIVITY SCORES AND CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF THE PARASIN I THERAPEUTIC PEPTIDE OF MARINE ORIGIN THROUGH THE CALCULATION OF GLOBAL AND LOCAL CONCEPTUAL DFT DESCRIPTORS

THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 1432881X ISSN electrónico: 14322234 DOI: 10.1007/s00214-019-2469-3

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

PREPARATION, SPECTROSCOPIC INVESTIGATIONS AND CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF A NEW SCHIFF BASE LIGAND AND ITS COPPER (II) COMPLEXES

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00222860

DOI: 10.1016/j.molstruc.2019.03.101

Autor(es): Shiva Prasad Kollur, Joaquín Ortega Castro, Juan Frau, Norma Flores Holguín, Govindaraju Shruthi, Chandan

Shimavallu, Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL STUDY OF THE CHEMICAL REACTIVITY AND BIOACTIVITY RATES OF MARINE PEPTIDES HEMIASTERLIN AND ITS A AND B DERIVATIVES USED IN THE CANCER TREATMENT THROUGH CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY

COMPUTATIONAL MOLECULAR BIOSCIENCE

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 21653445 ISSN electrónico: 21653453 DOI: 10.4236/cmb.2019.94008

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

ESTUDIO DET A MOLÉCULAS DERIVADAS DE BENZIMIDAZOL Y PIRIDINA CON CAPACIDAD INHIBIDORA DE CORROSIÓN

REVISTA DE CIENCIAS TECNOLÓGICAS

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 25941925

DOI: 0

Autor(es): J Reyes Corrales, Rody Soto Rojo, Daniel Glossman Mitnik, Jesús Baldenebro López,

CHEMICAL SYNTHESIS, SPECTROSCOPIC STUDIES, CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES AND BIOACTIVITY SCORES OF AN AZEPIN-BASED MOLECULE

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00222860

DOI: 10.1016/j.molstruc.2018.11.061

Autor(es): Shiva Prasad Kollur, Joaquín Ortega Castro, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY STUDY OF THE CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES AND BIOACTIVITY SCORES OF THE LEU-ENKEPHALIN OPIOID PEPTIDE NEUROTRANSMITTER

COMPUTATIONAL MOLECULAR BIOSCIENCE

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 21653445 ISSN electrónico: 21653453 DOI: 10.4236/cmb.2019.91002

Autor(es): Juan Frau, Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik,

CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES, SOLUBILITIES, AND BIOACTIVITY SCORES OF SOME PIGMENTS DERIVED FROM CAROTENOIDS OF MARINE ORIGIN THROUGH CONCEPTUAL DFT DESCRIPTORS

JOURNAL OF CHEMISTRY

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 20909063 ISSN electrónico: 20909071 DOI: 10.1155/2019/9624108

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

CONCEPTUAL DFT AS A CHEMOINFORMATICS TOOL FOR THE STUDY OF THE TALTOBULIN ANTICANCER PEPTIDE

BMC RESEARCH NOTES

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 17560500 DOI: 10.1186/s13104-019-4478-7

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTED LOCAL CHEMICAL REACTIVITY OF MELANOIDINS RED M1 AND RED M2 USING CONCEPTUAL DFT

SDRP JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY AND MOLECULAR MODELLING

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 24736260

DOI: 10.25177/JCCMM.3.1.RA.460

Autor(es): Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

CDFT-BASED REACTIVITY DESCRIPTORS AS A USEFUL MEDT CHEMOINFORMATICS TOOL FOR THE STUDY OF THE VIROTOXIN FAMILY OF FUNGAL PEPTIDES

MOLECULES Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 14203049 **DOI:** 10.3390/molecules24152707

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

THEORETICAL STUDY OF THE EFFECT OF DIFFERENT -BRIDGES INCLUDING AN AZOMETHINE NOVEL GROUP IN TRIPHENYLAMINE BASED DYE FOR DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS

MOLECULES

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 14203049

DOI: 10.3390/molecules24213897

Autor(es): Tomás Delgado Montiel, Rody Soto Rojo, Jesús Baldenebro López, Daniel Glossman Mitnik,

CHEMICAL REACTIVITY THEORY AND EMPIRICAL BIOACTIVITY SCORES AS COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY ALTERNATIVE TOOLS FOR THE STUDY OF TWO ANTICANCER PEPTIDES OF MARINE ORIGIN

MOLECULES

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 14203049

DOI: 10.3390/molecules24061115

Autor(es): Juan Frau, Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik,

CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES, DRUG-LIKENESS FEATURES AND BIOACTIVITY SCORES OF THE CHOLECYSTOKININ PEPTIDE HORMONE

COMPUTATIONAL MOLECULAR BIOSCIENCE

Año: 2019

Objetivo: Investigación Estado: Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 21653445 ISSN electrónico: 21653453 DOI: 10.4236/cmb.2019.92004

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

CALCULATION OF THE GLOBAL AND LOCAL CONCEPTUAL DFT INDICES FOR THE PREDICTION OF THE CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF PAPUAMIDES A-F MARINE DRUGS

MOLECULES Año: 2019

Objetivo: Investigación Estado: Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 14203049

DOI: 10.3390/molecules24183312

Autor(es): Norma Flores Holguín , Juan Frau , Daniel Glossman Mitnik ,

COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY ASSISTED BY CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY FOR THE STUDY OF FIVE NEW ANTIFUNGAL TRIPEPTIDES

ACS OMEGA Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 24701343 **DOI:** 10.1021/acsomega.9b01463

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

MOLECULAR REACTIVITY OF SOME MAILLARD REACTION PRODUCTS STUDIED THROUGH CONCEPTUAL DFT

CONTEMPORARY CHEMISTRY

Año: 2018

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 00000000

DOI: 0

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Juan Frau Munar,

CHEMICAL REACTIVITY THEORY APPLIED TO THE CALCULATION OF THE LOCAL REACTIVITY DESCRIPTORS OF A COLORED MAILLARD REACTION PRODUCT

CHEMICAL SCIENCE INTERNATIONAL JOURNAL

Año: 2018

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 2456706X **DOI**: 10.9734/CSJI/2018/40983

Autor(es): Juan Frau , Daniel Glossman Mitnik ,

CHEMICAL REACTIVITY THEORY (CRT) STUDY OF THE MELANOIDIN M8: LOCAL CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY DESCRIPTORS

COMPUTATIONAL MOLECULAR BIOSCIENCE

Año: 2018

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 21653445 ISSN electrónico: 21653453 DOI: 10.4236/cmb.2018.82004

Autor(es): Juan Frau, Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik,

ASSESSMENT OF TEN DENSITY FUNCTIONALS THROUGH THE USE OF LOCAL HYPER-SOFTNESS TO GET INSIGHTS ABOUT THE CATALYTIC ACTIVITY. IRON-BASED ORGANOMETALLIC COMPOUNDS FOR ETHYLENE POLYMERIZATION AS TESTING MOLECULES

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2018

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/s00894-017-3576-5

Autor(es): Jorge Ignacio Martínez Araya, Daniel Glossman Mitnik,

MOLECULAR REACTIVITY AND ABSORPTION PROPERTIES OF MELANOIDIN BLUE-G1 THROUGH CONCEPTUAL DFT

MOLECULES Año: 2018

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 14203049

DOI: 10.3390/molecules23030559

Autor(es): Juan Frau, Mario Daniel Glossman Mitnik,

SUPRAMOLECULAR ARRANGEMENT AND PHOTOPHYSICAL PROPERTIES OF A DINUCLEAR CYANOPHENYLBORONIC ACID ESTER

ACTA CRYSTALLOGRAPHICA SECTION C

Año: 2018

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 20532296

DOI: 10.1107/S2053229618003583

Autor(es): A. Jaquelin Cárdenas Valenzuela, Jesús Baldenebro López, Jorge A. Guerrero Alvarez, Herbert Höpfl, Daniel

Glossman Mitnik, José J. Campos Gaxiola, Adriana Cruz Enríquez,

CONCEPTUAL DFT STUDY OF THE LOCAL CHEMICAL REACTIVITY OF THE DILYSYLDIPYRROLONES A AND B INTERMEDIATE MELANOIDINS

THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS

Año: 2018

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 1432881X ISSN electrónico: 14322234 DOI: 10.1007/s00214-018-2244-x

Autor(es): Juan Frau , Daniel Glossman Mitnik ,

COMPUTATIONAL STUDY OF THE CHEMICAL REACTIVITY OF THE BLUE-M1 INTERMEDIATE MELANOIDIN

COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY

Año: 2018

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 2210271X

DOI: 10.1016/j.comptc.2018.04.018

Autor(es): Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES, PKA VALUES, AGES INHIBITOR ABILITIES AND BIOACTIVITY SCORES OF THE MIRABAMIDES AH PEPTIDES OF MARINE ORIGIN STUDIED BY MEANS OF CONCEPTUAL DFT

MARINE DRUGS

Año: 2018

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 16603397 ISSN electrónico: 16603397

DOI: http://sci-hub.tw/10.3390/md16090302

Autor(es): Juan Frau, Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik,

BLUE M2: AN INTERMEDIATE MELANOIDIN STUDIED VIA CONCEPTUAL DFT

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2018

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/s00894-018-3673-0

Autor(es): Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

INTERACTION OF TAMOXIFEN ANALOGS WITH THE POCKET SITE OF SOME HORMONE RECEPTORS. A MOLECULAR DOCKING AND DENSITY FUNCTIONAL THEORY STUDY

FRONTIERS IN CHEMISTRY

Año: 2018

Objetivo: Investigación

Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 22962646 DOI: 10.3389/fchem.2018.00293

Autor(es): Linda-Lucila Landeros Martínez, Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguín,

CONCEPTUAL DFT STUDY OF THE LOCAL CHEMICAL REACTIVITY OF THE COLORED BISARG MELANOIDIN AND ITS PROTONATED DERIVATIVE

FRONTIERS IN CHEMISTRY

Año: 2018

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 22962646 DOI: 10.3389/fchem.2018.00136

Autor(es): Juan Frau , Daniel Glossman Mitnik ,

LOCAL MOLECULAR REACTIVITY OF THE COLORED DANSYLGLYCINE IN WATER AND DIOXANE STUDIED THROUGH CONCEPTUAL DFT

JOURNAL OF CHEMISTRY

Año: 2018

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 20909063 ISSN electrónico: 20909071 DOI: 10.1155/2018/3172412

Autor(es): Juan Frau , Daniel Glossman Mitnik ,

STUDYING THE CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF THE TARGET TUMOR-ENVIRONMENT TRIPEPTIDES NGR (ASPARAGINE-GLYCINE-ARGININE) AND RGD (ARGININE-GLYCINE-ASPARTIC ACID) IN THEIR INTERACTIONS WITH TAMOXIFEN THROUGH CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2018

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/s00894-018-3868-4

Autor(es): Linda Lucila Landeros Martínez, Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguín,

CHEMICAL REACTIVITY THEORY STUDY OF ADVANCED GLYCATION ENDPRODUCTS INHIBITORS

MOLECULES

Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 14203049

DOI: 10.3390/molecules22020226

Autor(es): Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL PREDICTION OF THE PREFERRED GLYCATION SITES OF MODEL HELICAL PEPTIDES DERIVED FROM HUMAN SERUM ALBUMIN (HSA) AND LYSOZYME HELIX 4 (LH4)

THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS

Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 1432881X ISSN electrónico: 14322234 DOI: 10.1007/s00214-017-2070-6

Autor(es): Juan Frau, Rafael Ramis, Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL PREDICTION OF THE REACTIVITY SITES OF ALZHEIMER AMYLOID BETA-PEPTIDES ABETA40 AND ABETA42

CHEMXPRESS

Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 23201967

DOI: 0

Autor(es): Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

COMPARATIVE STUDY OF THE CHEMICAL REACTIVITY OF HELICAL PEPTIDE MODELS FOR PROTEIN GLYCATION

COMPUTATIONAL CHEMISTRY

Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 23325968 ISSN electrónico: 23325984 DOI: 10.4236/cc.2017.52006

Autor(es): Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL PREDICTION OF THE PKAS OF SMALL PEPTIDES THROUGH CONCEPTUAL DFT DESCRIPTORS

CHEMICAL PHYSICS LETTERS

Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 00092614 ISSN electrónico: 18734448 DOI: 10.1016/j.cplett.2017.01.038

Autor(es): Juan Frau, Noemí Hernández Haro, Daniel Glossman Mitnik,

APPLICATION OF DFT CONCEPTS TO THE STUDY OF THE CHEMICAL REACTIVITY OF SOME RESVERATROL DERIVATIVES THROUGH THE ASSESSMENT OF THE VALIDITY OF THE "KOOPMANS IN DFT" (KID) PROCEDURE

JOURNAL OF THEORETICAL AND COMPUTATIONAL CHEMISTRY

Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 02196336 ISSN electrónico: 17936888 DOI: 10.1142/S0219633617500067

Autor(es): Juan Frau, Francisco Muñoz, Daniel Glossman Mitnik,

THEORETICAL CALCULATION OF UV-VIS, IR SPECTRA AND REACTIVITY PROPERTIES OF TAMOXIFEN DRUG: A

METHODOLOGY COMPARISON

MOJ BIOORGANIC & ORGANIC CHEMISTRY

Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 2574819X

DOI: 10.15406/mojboc.2017.01.00017

Autor(es): Linda Landeros Martínez, Daniel Glossman Mitnik, Erasmo Orrantia Borunda, Norma Flores Holguín,

EXPERIMENTAL AND THEORETICAL STUDY ON THE MOLECULAR STRUCTURE, COVALENT AND NON-COVALENT INTERACTIONS OF 2,4-DINITRODIPHENYLAMINE: X-RAY DIFFRACTION AND QTAIM APPROACH

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00222860

DOI: 10.1016/j.molstruc.2017.03.087

Autor(es): Javier Hernández Paredes, Roberto C. Carrillo Torres, Ofelia Hernández Negrete, Rogerio R. Sotelo Mundo, Daniel

Glossman Mitnik, Hilda E. Esparza Ponce, Mario E. Alvarez Ramos,

NEW METHODS OF ESTERIFICATION OF NANODIAMONDS IN FIGHTING BREAST CANCER - A DENSITY FUNCTIONAL THEORY APPROACH

MOLECULES Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 14203049

DOI: 10.3390/molecules22101740

Autor(es): Linda Lucila Landeros Martínez, Daniel Glossman Mitnik, Erasmo Orrantia Borunda, Norma Flores Holguín,

CONCEPTUAL DFT DESCRIPTORS OF AMINO ACIDS WITH POTENTIAL CORROSION INHIBITION PROPERTIES CALCULATED WITH THE LATEST MINNESOTA DENSITY FUNCTIONALS

FRONTIERS IN CHEMISTRY

Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 22962646 DOI: 10.3389/fchem.2017.00016

Autor(es): Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

HETEROLEPTIC CU(I) COMPLEXES CONTAINING POLYPYRIDYL LIGANDS AND TRIPHENYLPHOSPHINE: SYNTHESIS, STRUCTURE, PHOTOPHYSICAL PROPERTIES, DFT STUDIES AND APPLICATIONS IN CO-SENSITIZED SOLAR CELLS

INORGANICA CHIMICA ACTA

Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00201693 DOI: 10.1016/j.ica.2017.07.007

Autor(es): Alberto Báez Castro, Jesús Baldenebro López, Adriana Cruz Enríquez, Herbert Hopfl, Daniel Glossman Mitnik,

Valentín Miranda Soto, Miguel Parra Hake, Egard Reynoso Soto, José J. Campos Gaxiola,

VIBRATIONAL SPECTROSCOPIC STUDY, STRUCTURAL ANALYSIS, PHOTOPHYSICAL PROPERTIES AND THEORETICAL CALCULATIONS OF CIS-(±)-2,4,5-TRIS(PYRIDIN-2-YL)IMIDAZOLINE

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00222860

DOI: 10.1016/j.molstruc.2016.10.075

Autor(es): Jesús Baldenebro López, Alberto Báez Castro, Daniel Glossman Mitnik, Herbert Höpfl, Adriana Cruz Enríquez,

Valentín Miranda Soto, Miguel Parra Hake, José J. Campos Gaxiola,

A COMPARATIVE STUDY OF THE GLYCATING POWER OF SIMPLE CARBOHYDRATES IN THE MAILLARD REACTION BY MEANS OF CONCEPTUAL DFT DESCRIPTORS

BRITISH JOURNAL OF APPLIED SCIENCE AND TECHNOLOGY

Año: 2017

Objetivo: Investigación Estado: Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 22310843 DOI: 10.9734/BJAST/2017/32795

Autor(es): Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

A CONCEPTUAL DFT STUDY OF THE MOLECULAR PROPERTIES OF GLYCATING CARBONYL COMPOUNDS

CHEMISTRY CENTRAL JOURNAL

Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 1752153X DOI: 10.1186/s13065-017-0239-7

Autor(es): Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

SYNTHESIS, CRYSTAL STRUCTURE, DFT STUDIES AND PHOTOPHYSICAL PROPERTIES OF A COPPER(I) TRIPHENYLPHOSPHINE COMPLEX BASED ON TRANS-(±)-2,4,5-TRIS(PYRIDIN-2-YL)-2-IMIDAZOLINE

ACTA CRYSTALLOGRAPHICA SECTION C

Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 20532296

DOI: 10.1107/S2053229617002522

Autor(es): Alberto Baez Castro, Jesús Baldenebro López, Laura Ceballos Mendivil, Perla P. Román Bravo, Herbert Hopfl,

Valentín Miranda Soto, Daniel Glossman Mitnik, Adriana Cruz Enríquez, José J. Campos Gaxiola,

COMPUTATIONAL PREDICTION OF THE PROTONATION SITES OF AC-LYS-(ALA)N-LYS-NH2 PEPTIDES THROUGH CONCEPTUAL DFT DESCRIPTORS

MOLECULES Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 14203049

DOI: 10.3390/molecules22030458

Autor(es): Sebastián Sastre, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

THEORETICAL INVESTIGATION OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND SPECTROSCOPIC PROPERTIES OF OXICAMS

JOURNAL OF STRUCTURAL CHEMISTRY

Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 00224766 ISSN electrónico: 15738779 DOI: 10.1134/S0022476617020068

Autor(es): Alison Geraldo Pacheco, Guillermo Salgado Morán, Lorena Gerli Candia, Rodrigo Ramírez Tagle, Daniel Glossman

Mitnik, Ajay Misra, Antonio Flavio Carvalho Alcántara,

A CONCEPTUAL DFT STUDY OF THE CHEMICAL REACTIVITY OF MAGNESIUM OCTAETHYLPORPHYRIN (MGOEP) AS PREDICTED BY THE MINNESOTA FAMILY OF DENSITY FUNCTIONALS

QUÍMICA NOVA

Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 01004042 ISSN electrónico: 16787064

DOI: 10.21577/0100-4042.20170004

Autor(es): Juan Frau, Francisco Muñoz, Daniel Glossman Mitnik,

A COMPARISON OF THE MINNESOTA FAMILY OF DENSITY FUNCTIONALS FOR THE CALCULATION OF CONCEPTUAL DFT DESCRIPTORS: CITRUS FLAVONOIDS AS A TEST CASE

RESEARCH JOURNAL OF CHEMICAL SCIENCES

Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 2231606X

DOI: 0

Autor(es): Juan Frau, Francisco Muñoz, Daniel Glossman Mitnik,

A DFT STUDY OF THE CHEMICAL REACTIVITY OF CIMETIDINE A, C AND D IN THE GAS, H2O, MEOH AND ETOH SOLVENTS

JOURNAL OF THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY

Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 03525139 ISSN electrónico: 18207421 DOI: 10.2298/JSC160512077M

Autor(es): Luis A. Mendoza Huízar, Guillermo Salgado Morán, Wilson Cardona Villada, Alison Pacheco, Daniel Glossman Mitnik

MOLECULAR MODELING OF THE STRUCTURES, PROPERTIES AND GLYCATING POWER OF SOME REDUCING DISACCHARIDES

MOJ DRUG DESIGN DEVELOPMENT & THERAPY

Año: 2017

Objetivo: Investigación

Estado: Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 25759094

DOI: 10.15406/mojddt.2017.01.00003

Autor(es): Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

PYRIDOXAMINE DERIVATIVES AS NONENZYMATIC GLYCATION INHIBITORS: THE CONCEPTUAL DFT VIEWPOINT

RESEARCH JOURNAL OF LIFE SCIENCES, BIOINFORMATICS, PHARMACEUTICAL AND CHEMICAL SCIENCES

Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 24546348 DOI: 10.26479/2017.0206.09

Autor(es): Juan Frau , Daniel Glossman Mitnik ,

A THEORETICAL QUANTUM STUDY OF THE INTRAMOLECULAR INTERACTIONS AND CHEMICAL REACTIVITY OF POLYMORPHS A AND B OF FAMOTIDINE IN THE GAS, DMSO, AND AQUEOUS PHASES

COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY

Año: 2016

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 2210271X

DOI: 10.1016/j.comptc.2015.11.007

Autor(es): Luis Humberto Mendoza Huízar, Guillermo Salgado Morán, Rodrigo Ramírez Tagle, Daniel Glossman Mitnik,

PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF CERIUM (III) DOPED CAPTOPRIL NANOPARTICLES AND STUDY OF THEIR PHOTOLUMINESCENCE PROPERTIES

OPEN CHEMISTRY

Año: 2016

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 23915420 DOI: 10.1515/chem-2016-0008

Autor(es): Shariar Ghammami, Sanaz Kazemzade Anari, Masome Bakhshi, Amir Lashgari, Guillermo Salgado Morán, Daniel

Glossman Mitnik,

A THEORETICAL STUDY OF THE CHEMICAL REACTIVITY OF NEOHESPERIDIN DIHYDROCHALCONE THROUGH CONCEPTUAL DFT DESCRIPTORS

SDRP JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY AND MOLECULAR MODELLING

Año: 2016

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 24736260 **DOI**: 10.25177/JCCMM.1.2.3

Autor(es): Juan Frau , Francisco Muñoz , Daniel Glossman Mitnik ,

A MOLECULAR ELECTRON DENSITY THEORY STUDY OF THE CHEMICAL REACTIVITY OF CIS- AND TRANS-RESVERATROL

MOLECULES Año: 2016

Objetivo: Investigación

Estado: Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 14203049

DOI: 10.3390/molecules21121650

Autor(es): Juan Frau, Francisco Muñoz, Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL STUDY OF THE INFLUENCE OF THE PI-BRIDGE CONJUGATION ORDER OF NOVEL MOLECULAR DERIVATIVES OF COUMARINS FOR DYE SENSITIZED SOLAR CELLS USING DFT

THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS

Año: 2016

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 1432881X ISSN electrónico: 14322234 DOI: 10.1007/s00214-016-1826-8

Autor(es): Rody Soto Rojo, Jesús A. Baldenebro López, Daniel Glossman Mitnik,

CORRECTION: TOWARDS THE RATIONALIZATION OF CATALYTIC ACTIVITY VALUES BY MEANS OF LOCAL HYPER-SOFTNESS ON THE CATALYTIC SITE: A CRITICISM ABOUT THE USE OF NET ELECTRIC CHARGES

PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS

Año: 2016

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 14639084 DOI: 10.1039/C5CP90197A

Autor(es): Jorge Ignacio Martínez Araya, André Grand, Daniel Glossman Mitnik,

STUDY OF LOW BAND GAP DSSCS BASED ON BRIDGING BITIOPHENE AND BIPHENYL: THEORETICAL INVESTIGATION

JOURNAL OF THE IRANIAN CHEMICAL SOCIETY

Año: 2016

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 1735207X ISSN electrónico: 17352428 DOI: 10.1007/s13738-015-0709-6

Autor(es): Y.A. Sadiki, S.M. Bouzzine, L. Bejjit, Guillermo Salgado Morán, M. Hamidi, M. Bouachrine, F. Serein Spirau, J.P.

Lere Porte, Lorena Gerli Candia, J. Marc Sotiropoulos, Daniel Glossman Mitnik,

PREPARATION, IDENTIFICATION AND BIOLOGICAL PROPERTIES OF NEW FLUORIDE NANOCOMPOUNDS

JOURNAL OF THE CHILEAN CHEMICAL SOCIETY

Año: 2016

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 07179324 ISSN electrónico: 07179707

DOI: 10.4067/S0717-97072016000400010

Autor(es): Amir Lashgari, Shahriar Ghamami, Mojdeh Golzani, Guillermo Salgado Morán, Daniel Glossman Mitnik, Lorena Gerli

Candia,

QUANTUM CHEMICAL STUDY OF THE EFFECT OF PI-BRIDGE ON THE OPTICAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF SENSITIZERS FOR DSSCS INCORPORATING DIOXYTHIOPHENE AND THIOPHENE UNITS

THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS

Año: 2016

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 1432881X ISSN electrónico: 14322234 DOI: 10.1007/s00214-016-1989-3

Autor(es): Tomás Delgado Montiel, Jesús Baldenebro López, Rody Soto Rojo, Daniel Glossman Mitnik,

THEORETICAL STUDY OF THE PI-BRIDGE INFLUENCE WITH DIFFERENT UNITS OF THIOPHENE AND THIAZOLE IN COUMARIN DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS

INTERNATIONAL JOURNAL OF PHOTOENERGY

Año: 2016

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 1110662X ISSN electrónico: 1687529X DOI: 10.1155/2016/6479649

Autor(es): Rody Soto Rojo, Jesús Baldenebro López, Daniel Glossman Mitnik,

CHEMINFORMATICS TO PROMPT THE PROCESS OF DRUG DISCOVERY

CHEMICAL INFORMATICS JOURNAL

Año: 2016

Objetivo: Trabajos de difusión

Estado: Publicado

Rol de participación: Autor (a) único (a)

ISSN impreso: 24706973

DOI: 10.21767/2470-6973.100019 **Autor(es):** Daniel Glossman Mitnik,

VALIDATION OF THE KOOPMANS' THEOREM IN DFT BY MEANS OF THE CALCULATION OF THE CONCEPTUAL DFT DESCRIPTORS OF THREE FLUORESCENT DNA STAINING DYES

CHEMICAL INFORMATICS

Año: 2016

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 24706973

DOI: 10.21767/2470-6937.100021

Autor(es): Juan Frau, Francisco Muñoz, Daniel Glossman Mitnik,

NOVEL SYNTHESIS, CHARACTERIZATION, PHOTOPHYSICAL PROPERTIES AND THEORETICAL STUDIES OF 2,4,5-TRIS (2-PYRIDYL)IMIDAZOLE

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Año: 2015

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00222860

DOI: 10.1016/j.molstruc.2015.05.055

Autor(es): Alberto Báez Castro, Jesús Baldenebro López, Daniel Glossman Mitnik, Herbert Hopflt, Adriana Cruz Enríquez,

Valentín Miranda Soto, Miguel Parra Hake, José J. Campos Gaxiola,

STUDY OF CHEMICAL REACTIVITY IN RELATION TO THE EXPERIMENTAL PARAMETERS OF EFFICIENCY IN COUMARIN DERIVATIVES FOR DYE SENSITIZED SOLAR CELLS USING DFT

PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS

Año: 2015

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 14639076 ISSN electrónico: 14639084 DOI: 10.1039/C5CP01387A

Autor(es): Rody Soto Rojo, Jesús Baldenebro López, Daniel Glossman Mitnik,

SOLVATION THERMODYNAMIC PROPERTIES OF HYDROGEN SULFIDE IN [C4MIN][PF6], [C4MIN][BF4], AND [C4MIN][CL] IONIC LIQUIDS, DETERMINED BY MOLECULAR SIMULATIONS

THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B

Año: 2015

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 15206106 ISSN electrónico: 15205207 DOI: 10.1021/acs.jpcb.5b06525

Autor(es): Joel Sánchez Badillo , Marco Gallo , Sandra Alvarado , Daniel Glossman Mitnik ,

FRACTAL DIMENSION CALCULATION OF A MANGANESE-CHROMIUM BIMETALLIC NANOCOMPOSITE USING IMAGE PROCESSING

JOURNAL OF NANOMATERIALS

Año: 2015

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 16874110 ISSN electrónico: 16874129 DOI: 10.1155/2015/384835

Autor(es): Amir Lashgari, Shahriar Ghamami, Saeedehb Shahbazkhany, Guillermo Salgado Morán, Daniel Glossman Mitnik,

TOWARDS A RATIONALIZATION OF CATALYTIC ACTIVITY VALUES BY MEANS OF LOCAL HYPER-SOFTNESS ON THE CATALYTIC SITE. A CRITICISM ABOUT THE USE OF NET ELECTRICAL CHARGES

PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS

Año: 2015

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 14639076 ISSN electrónico: 14639084 DOI: 10.1039/C5CP03822G

Autor(es): Jorge Ignacio Martínez Araya, André Grand, Daniel Glossman Mitnik,

MORPHOLOGICAL INVESTIGATION AND FRACTAL PROPERTIES OF REALGAR NANOPARTICLES

JOURNAL OF NANOMATERIALS

Año: 2015

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 16874110

ISSN electrónico: 16874129 DOI: 10.1155/2015/130698

Autor(es): Amir Lashgari, Shahriar Ghamami, Zahra Bahrami, Farzaneh Shomossi, Guillermo Salgado Morán, Daniel Glossman

Mitnik,

DFT STUDY OF POLYTHIOPHENE ENERGY BAND GAP AND SUBSTITUTION EFFECTS

JOURNAL OF CHEMISTRY

Año: 2015

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 20909063 ISSN electrónico: 20909071 DOI: 10.1155/2015/296386

Autor(es): Si Mohammed Bouzzine, Guillermo Salgado Morán, Mohamed Hamidi, Mohammed Bouachrine, Alison Geraldo

Pacheco, Daniel Glossman Mitnik,

GEOMETRIC DESCRIPTION AND ELECTRONIC PROPERTIES OF THE PRINCIPAL PHOTOSYNTHETIC PIGMENTS OF HIGHER PLANTS: A DFT STUDY

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2015

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/s00894-015-2796-9

Autor(es): Francisco Torres Rivas, Manuel Alberto Flores Hidalgo, Daniel Glossman Mitnik, Diana Barraza Jiménez,

THE SUBSTITUENT EFFECT FROM THE PERSPECTIVE OF LOCAL HYPER-SOFTNESS. AN EXAMPLE APPLIED ON NORMELOXICAM, MELOXICAM AND 4-MELOXICAM: NON-STEROIDAL ANTI-INFLAMMATORY DRUGS

CHEMICAL PHYSICS LETTERS

Año: 2015

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00092614

DOI: 10.1016/j.cplett.2014.11.004

Autor(es): Jorge Martínez Araya, Daniel Glossman Mitnik,

THEORETICAL CALCULATION ON THE MAXIMUM ABSORPTION WAVELENGTH FOR CYANIDIN MOLECULES WITH SEVERAL METHODOLOGIES

COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY

Año: 2015

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 2210271X

DOI: 10.1016/j.comptc.2015.06.002

Autor(es): Nora Aydeé Sánchez Bojorge, Luz María Rodríguez Valdez, Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguín,

SYNTHESIS, STRUCTURE, CHARACTERIZATION AND PHOTOPHYSICAL PROPERTIES OF COPPER (I) COMPLEXES CONTAINING POLYPIRIDYL LIGANDS

RSC ADVANCES

Año: 2014

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 20462069 **DOI**: 10.1039/C4RA06512C

Autor(es): Alberto Báez Castro, Jesús Baldenebro López, Adriana Cruz Enríquez, Herbert Höpfl, Daniel Glossman Mitnik,

Valentín Miranda Soto, Miguel Parra Hake, José J. Campos Gaxiola,

CHEMICAL REACTIVITY THEORY WITHIN DFT APPLIED TO THE STUDY OF THE PRUNIN FLAVONOID

EUROPEAN INTERNATIONAL JOURNAL OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Año: 2014

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) único (a)

ISSN impreso: 23049693

DOI: 0

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik,

COMPARATIVE STUDY OF COPPER COMPLEXES WITH DIFFERENT ANCHORING GROUPS BY MOLECULAR MODELING AND ITS APPLICATION TO DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS

POLYHEDRON

Año: 2014

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 02775387 ISSN electrónico: 18733719 DOI: 10.1016/j.poly.2014.04.044

Autor(es): Jesús Baldenebro López, José Castorena González, Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL CHEMISTRY OF NATURAL PRODUCTS: A COMPARISON OF THE CHEMICAL REACTIVITY OF ISONARINGIN CALCULATED WITH THE M06 FAMILY OF DENSITY FUNCTIONALS

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2014

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) único (a)

ISSN impreso: 16102940
ISSN electrónico: 09485023
DOI: 10.1007/s00894-014-2316-3
Autor(es): Daniel Glossman Mitnik,

COMPARISON OF SEVERAL PROTOCOLS FOR THE COMPUTATIONAL PREDICTION OF THE MAXIMUM ABSORPTION WAVELENGTH OF CHRYSANTHEMIN

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2014

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1155/2015/296386

Autor(es): Jesús Baldenebro López, Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguín, Rody Soto Rojo,

QUANTUM CHEMICAL STUDY OF A NEW CLASS OF SENSITIZERS: INFLUENCE OF THE AROMATIC RING ON THE

PROPERTIES OF COPPER COMPLEXES

MOLECULAR PHYSICS

Año: 2014

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 00268976 ISSN electrónico: 13623028

DOI: 10.1080/00268976.2013.825340

Autor(es): Jesús Baldenebro López, José Castorena González, Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik,

A BRIEF PERFORMANCE TEST OF THE M06 FAMILY OF DENSITY FUNCTIONALS FOR THE PREDICTION OF THE MAXIMUM ABSORPTION WAVELENGTH OF THIOINDIGO IN SEVERAL SOLVENTS

JOURNAL OF THE MEXICAN CHEMICAL SOCIETY

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 1870249X ISSN electrónico: 16659686

DOI: https://doi.org/10.29356/jmcs.v57i1.231

Autor(es): Francisco Cervantes Navarro, Daniel Glossman Mitnik,

DENSITY FUNCTIONAL STUDY OF THE EFFECTS OF SUBSTITUENTS ON THE CHEMICAL REACTIVITY OF THE INDIGO MOLECULE

JOURNAL OF THEORETICAL AND COMPUTATIONAL CHEMISTRY

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 02196336 ISSN electrónico: 17936888 DOI: 10.1142/S0219633613500132

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Francisco Cervantes Navarro,

DENSITY FUNCTIONAL THEORY STUDY OF INDIGO AND ITS DERIVATIVES AS PHOTOSENSITIZERS FOR DYESENSITIZED SOLAR CELLS

JOURNAL OF PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY A: CHEMISTRY

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 10106030

DOI: 10.1016/j.jphotochem.2013.01.011

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Francisco Cervantes Navarro,

DOCKING STUDIES OF BINDING OF ETHAMBUTOL TO THE C TERMINAL DOMAIN OF THE ARABINOSYLTRANSFERASE MYCOBACTERIUM TUBERCULOSIS

JOURNAL OF CHEMISTRY

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 20909063 ISSN electrónico: 20909071 DOI: 10.1155/2013/601270

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Pran Kishore Deb, Marta Bunster Balocchi, Rodrigo Ramírez Tagle, Francisco Lobos

González, Guillermo Salgado Morán, Samuel Ruiz Nieto,

THEORETICAL STUDY OF COPPER COMPLEXES: MOLECULAR STRUCTURE, PROPERTIES AND ITS APPLICATION TO SOLAR CELLS

INTERNATIONAL JOURNAL OF PHOTOENERGY

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 1110662X ISSN electrónico: 1687529X DOI: 10.1155/2013/613064

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguín, José Castorena González, Jorge Almaral Sánchez, Jesús

Baldenebro López,

EXPERIMENTAL AND QUANTUM CHEMICAL STUDIES OF A NOVEL SYNTHETIC PRENYLATED CHALCONE

CHEMISTRY CENTRAL JOURNAL

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 1752153X DOI: 10.1186/1752-153X-7-17

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, J.C. Espinoza Hicks, Luz María Rodríguez Valdez, Norma Flores Holguín, G.V. Nevarez

Moorillón, A. Camacho Dávila,

COMPUTATIONAL STUDY OF CAGE LIKE (ZNO)12 CLUSTER USING HYBRID AND HYBRID META DENSITY FUNCTIONALS

JOURNAL OF THE CHINESE CHEMICAL SOCIETY

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00094536 ISSN electrónico: 21926549 DOI: 10.1002/jccs.201200439

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Donald Homero Galván Martínez, Diana Barraza Jiménez, Manuel Alberto Flores Hidalgo,

COMPUTATIONAL NANOCHEMISTRY STUDY OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND PROPERTIES OF THE CHLOROPHYLL A MOLECULE

INTERNATIONAL JOURNAL OF PHOTOENERGY

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 1110662X ISSN electrónico: 1687529X DOI: 10.1155/2013/424620

Autor(es): Norma Flores Holguín, Mónica Alvarado González, Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL NANOCHEMISTRY STUDY OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND PROPERTIES OF ETHAMBUTOL

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/s00894-013-1884-y

Autor(es): Guillermo Salgado Morán, Samuel Ruiz Nieto, Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik, Lorena Gerli Candia,

Alejandra Favila Pérez,

AB INITIO THEORETICAL STUDY OF THE HO + CO --> CO2 + H ENVIRONMENTAL CHEMICAL REACTION

INTERNATIONAL JOURNAL OF PHARMA AND BIO SCIENCES

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 09756299

DOI: 0

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Guillermo Salgado Morán, Nahara Ortiz Vergara, Lorena Gerli Candia,

A COMPARISON OF THE CHEMICAL REACTIVITY OF NARINGENIN CALCULATED WITH THE M06 FAMILY OF DENSITY FUNCTIONALS

CHEMISTRY CENTRAL JOURNAL

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) único (a)

ISSN impreso: 1752153X

DOI: 10.1186/1752-153X-7-155

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik ,

VIRTUAL SCREENING: USING MOLECULAR DOCKING AND 3D-QSAR ANALYSIS OF MATRIX METALLOPROTEINASE INHIBITORS

JOURNAL OF THE CHINESE CHEMICAL SOCIETY

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 00094536 ISSN electrónico: 21926549 DOI: 10.1002/jccs.201200459

Autor(es): Verónica Valdiris Avila, Ricardo Vivas Reyes, Guillermo Salgado Morán, Daniel Glossman Mitnik, Rosa Baldiris Avila

, Daniela Rodríguez Clavijo , Laura Amador Falcón ,

COMPUTATIONAL NANOCHEMISTRY REPORT ON THE OXICAMS - CONCEPTUAL DFT AND CHEMICAL REACTIVITY

THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 15206106 ISSN electrónico: 15205207 DOI: 10.1021/jp400241q

Autor(es): Jorge Ignacio Martínez Araya, Guillermo Salgado Morán, Daniel Glossman Mitnik,

OXICAMS: COMPUTATIONAL THERMOCHEMICAL PARAMETERS AND SOLUBILITY

INTERNATIONAL JOURNAL OF PHARMA AND BIO SCIENCES

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 09756299

DOI: 0

Autor(es): Jorge Ignacio Martínez Araya, Lorena Gerli Candia, Guillermo Salgado Morán, Rodrigo Ramírez Tagle, Daniel

Glossman Mitnik,

MOLECULAR DESIGN OF COPPER COMPLEXES AS SENSITIZERS FOR EFFICIENT DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS

JOURNAL OF PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY A: CHEMISTRY

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 10106030

DOI: 10.1016/j.jphotochem.2013.06.005

Autor(es): José Castorena González, Jesús Baldenebro López, Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguín,

COMPUTATIONAL NUTRACEUTICS: CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF THE FLAVONOID NARINGIN BY MEANS OF CONCEPTUAL DFT

JOURNAL OF CHEMISTRY

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 20909063 ISSN electrónico: 20909071 DOI: 10.1155/2013/850297

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Guillermo Salgado Morán, Jorge Ignacio Martínez Araya,

COMPUTATIONAL STUDY OF THE CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF THE RHODAMINE B MOLECULE

PROCEDIA COMPUTER SCIENCE

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) único (a)

ISSN impreso: 18770509

DOI: 10.1016/j.procs.2013.05.246 **Autor(es):** Daniel Glossman Mitnik,

THE INDIGO MOLECULE REVISITED AGAIN: ASSESSMENT OF THE MINNESOTA FAMILY OF DENSITY FUNCTIONALS FOR THE PREDICTION OF ITS MAXIMUM ABSORPTION WAVELENGTH

JOURNAL OF CHEMISTRY

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 20909063 ISSN electrónico: 20909071 DOI: 10.1155/2013/153126

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Francisco Cervantes Navarro,

CORRIGENDUM TO "COMPUTATIONAL STUDY OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND REACTIVE SITES OF THE R AND

S ISOMERS OF PERSIN DIENE", JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM 869 (2008) 67-74

COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY

Año: 2012

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 2210271X

DOI: 10.1016/j.comptc.2012.03.007

Autor(es): Graciela Dolores Avila Quezada, Ana María Mendoza Wilson, René Renato Balandrán Quintana, Daniel Glossman

Mitnik,

AB-INITIO STUDY OF ELECTRON TRANSPORT IN 4-(3-NITRO-4-PENTAFLUOROPHENYL-ETHYNYL-PHENYLETHYNYL) BENZENETHIOL (FNPPB-O)

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2012

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/s00894-011-1106-4

Autor(es): Lilia E. Serrato Villegas, Marcos Delgado Ríos, Daniel Glossman Mitnik, Marco Gallo, María T. Romero,

DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT) STUDY OF THREE TRIPHENYLAMINE DYES FOR THEIR USE AS SENSITIZERS IN MOLECULAR PHOTOVOLTAICS

INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES

Año: 2012

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 16616596 ISSN electrónico: 14220067 DOI: 10.3390/ijms13044418

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguín, Jesús Baldenebro López, Jorge Almaral Sánchez, José Castorena

González,

A THEORETICAL STUDY OF THE CARBOCATION FORMATION ENERGY INVOLVED IN THE ISOMERIZATION OF ALPHAPINENE

CHEMICAL PHYSICS LETTERS

Año: 2012

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 00092614

DOI: 10.1016/j.cplett.2012.07.071

Autor(es): Luz María Rodríguez Valdez, Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik, Alfredo Aguilar Elguézabal,

DFT STUDY OF THE EFFECT OF SUBSTITUENTS ON THE ABSORPTION AND EMISSION SPECTRA OF INDIGO

CHEMISTRY CENTRAL JOURNAL

Año: 2012

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 1752153X DOI: 10.1186/1752-153X-6-70 Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Francisco Cervantes Navarro,

COMPUTATIONAL MOLECULAR NANOSCIENCE STUDY OF COPPER COMPLEXES FOR DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS

INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES

Año: 2012

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 16616596 ISSN electrónico: 14220067 DOI: 10.3390/ijms131216005

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguín, Jesús Baldenebro López, José Castorena González, Jorge Almaral

Sánchez,

COMPUTATIONAL CHARACTERIZATION OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND PROPERTIES OF DYE-7 FOR ORGANIC PHOTOVOLTAICS

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2012

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/s00894-011-1120-6

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Joel Calderón Guillén, Norma Flores Holguín, José Castorena González, Jesús Baldenebro

López,

COMPUTATIONAL STUDY OF AU_4 CLUSTER ON A CARBON NANOTUBE WITH AND WITHOUT DEFECTS USING QM/MM METHODOLOGY

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2012

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 09485023 ISSN electrónico: 16102940 DOI: 10.1007/s00894-012-1490-4

Autor(es): Diana Barraza Jiménez, Donald Homero Galván, Alvaro Posada Amarillas, Manuel Alberto Flores Hidalgo, Daniel

Glossman Mitnik, Miguel José Yacamán,

DFT STUDY OF THE INTERACTION BETWEEN THE CONJUGATED FLUORESCEIN AND DABCYL SYSTEM, USING FLUORESCENCE QUENCHING METHOD

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2012

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/s00894-012-1413-4

Autor(es): Mónica Alvarado González, Pablo López Albarrán, Norma Flores Holguín, Marco Gallo, Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL CHARACTERIZATION OF SODIUM SELENITE USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2011

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/s00894-010-0766-9

Autor(es): Donald Homero Galván Martínez, Alberto Flores Hidalgo, Martha Hermosillo Cereceres, Daniel Glossman Mitnik,

Diana Barraza Jiménez,

EFFECTS OF SULFUR SUBSTITUTIONAL IMPURITIES ON (ZNO)N CLUSTERS (N = 4-12) USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY

COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY

Año: 2011

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 2210271X

DOI: 10.1016/j.comptc.2011.01.037

Autor(es): Manuel Alberto Flores Hidalgo, Diana Barraza Jiménez, Daniel Glossman Mitnik,

EFFECTS OF SULFUR SUBSTITUTIONAL IMPURITIES ON ZNO STRUCTURE USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY

INTERNATIONAL JOURNAL OF NANOSCIENCE

Año: 2011

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 0219581X ISSN electrónico: 17933530 DOI: 10.1142/S0219581X11008113

Autor(es): Diana Barraza Jiménez, Manuel Alberto Flores Hidalgo, Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL MOLECULAR NANOSCIENCE: A STUDY OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND PROPERTIES OF A RAFT POLYMERIZATION AGENT

RESEARCH JOURNAL OF CHEMICAL SCIENCES

Año: 2011

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) único (a)

ISSN electrónico: 2231606X

DOI: 0

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik,

EFFECTS OF MODERATE AMMOUNTS OF SULFUR SUBSTITUTIONAL IMPURITIES ON ZNO STRUCTURE USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY

THE OPEN NANOSCIENCE JOURNAL

Año: 2011

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 18741401

DOI: 10.2174/1874140101105010001

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Manuel Alberto Flores Hidalgo, Diana Barraza Jiménez,

COMPUTATIONAL MOLECULAR CHARACTERIZATION OF THE FLAVONOID MORIN AND ITS PT(II), PD(II) AND ZN(II) COMPLEXES

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2011

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/s00894-010-0789-2

Autor(es): Antonino Pérez Hernández, Sergio A. Payán Gómez, Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik, Manuel Piñón

Miramontes,

COMPUTATIONAL STUDY OF 3,4-DIPHENYL-4-(4-METHOXYPHENYL)-1,2,5-THIADIAZOLINE 1,1-DIOXIDE FOR MOLECULAR PHOTOVOLTAICS

JOURNAL OF COMPUTATIONAL AND THEORETICAL NANOSCIENCE

Año: 2011

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 15461955 ISSN electrónico: 15461963 DOI: 10.1166/jctn.2011.1661

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguín, Luz María Rodríguez Valdez,

ELECTRONIC STRUCTURE STUDY USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY IN ORGANIC DENDRIMERS

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2011

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/s00894-010-0894-2

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Rocío Margarita Gutiérrez Pérez, Norma Flores Holguín, Luz María Rodríguez Valdez,

EXPLORATION OF THE KINETIC AND TERMOCHEMICAL ABILITIES FOR THE FREE RADICAL SCAVENGING OF TWO QUERCETIN CONFORMERS

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Año: 2010

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00222860

DOI: 10.1016/j.molstruc.2010.08.005

Autor(es): Karina D. García Orozco, Marco Antonio Sántiz Gómez, René R. Balandrán Quintana, Ana María Mendoza Wilson,

Rogerio L. Sotelo Mundo, Daniel Glossman Mitnik,

NANOMATERIALS FOR PHOTOELECTROCHEMICAL SOLAR CELLS: COMPUTATIONAL MOLECULAR CHARACTERIZATION OF 3,4-DIPHENYL-4-(4-HYDROYPHENYL)-1,2,5-THIADIAZOLINE 1,1-DIOXIDE

JOURNAL OF NEW MATERIALS FOR ELECTROCHEMICAL SYSTEMS

Año: 2010

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 14802422

DOI: 0

Autor(es): Luz María Rodríguez Valdez, Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik,

EXCITED STATES ANALYSIS OF SULFUR SUBSTITUTIONAL IMPURITIES ON (ZNO)6 CLUSTERS USING DFT AND TD-DFT

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2010

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2010.07.016

Autor(es): Manuel Alberto Flores Hidalgo, Daniel Glossman mitnik, Diana Barraza Jiménez,

TD-DFT/IEFPCM DETERMINATION OF THE ABSORPTION AND EMISSION SPECTRA OF DABCYL

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2010

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2010.01.014

Autor(es): Mónica Alvarado González, Norma Flores Holguín, Erasmo Orrantia Borunda, Marco Gallo, Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL MOLECULAR CHARACTERIZATION OF THE FLAVONOID RUTIN

CHEMISTRY CENTRAL JOURNAL

Año: 2010

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 1752153X **DOI:** 10.1186/1752-153X-4-12

Autor(es): Antonino Pérez Hernández, Manuel Piñón Miramontes, Sergio A. Payán Gómez, Norma Flores Holguín, Daniel

Glossman Mitnik,

NATURAL CAROTENOIDS AS PRECURSORS OF NANOMATERIALS FOR MOLECULAR PHOTOVOLTAICS: A COMPUTATIONAL DFT STUDY

MOLECULES Año: 2010

Objetivo: Investigación

Estado: Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 14203049

DOI: 10.3390/molecules15074490

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguín, Teresita Ruiz Anchondo,

THEORETICAL EVALUATION OF THE ORDER OF REACTIVITY OF TRANSFER AGENTS UTILIZED IN RAFT

POLYMERIZATION - PART 2: GROUP R

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2010

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 09485023 ISSN electrónico: 16102940 DOI: 10.1007/s00894-009-0524-z Autor(es): Isis Rodríguez Sánchez, Erasto Armando Zaragoza Contreras, Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL PREDICTION OF THE MELTING TEMPERATURE OF A DNA BIOSENSOR TO DETECT MYCOBACTERIUM TUBERCULOSIS

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2009

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2009.03.003

Autor(es): Paul S. Crozier, Erasmo Orrantia Borunda, Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguín, Mónica Alvarado

González,

COMPUTATIONAL CHARACTERIZATION OF THE BETA, BETA-CAROTENE MOLECULE

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2009

Objetivo: Investigación

Estado: Aceptado para su publicación

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2009.07.043

Autor(es): Teresita Ruiz Anchondo, Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL NOTE ON THE CHEMICAL REACTIVITY OF PYRROLE DERIVATIVES

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2009

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2009.07.037

Autor(es): Nora Sánchez Bojorge , Daniel Glossman Mitnik , Luz María Rodríguez Valdez , Norma Flores Holguín ,

THE THEORETICAL EVALUATION OF THE ORDER OF REACTIVITY OF TRANSFER AGENTS UTILIZED IN RAFT POLYMERIZATION. PART 2: GROUP R

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2009

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/s00894-009-0524-z

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik , Isis Rodríguez Sánchez , Armando Zaragoza Contreras ,

COMPUTATIONAL MOLECULAR CHARACTERIZATION OF COUMARIN-102

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2009

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) único (a)

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2009.07.006

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik,

THEORETICAL CALCULATIONS OF MOLECULAR DIPOLE MOMENT, POLARIZABILITY AND FIRST HYPERPOLARIZABILITY OF GLYCINE-SODIUM NITRATE

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2009

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2009.03.014

Autor(es): Javier Hernández Paredes, Norma Flores Holguín, Alberto Duarte Moller, Daniel Glossman Mitnik,

ACERCA DEL PROGRAMA INSTITUCIONAL DE NANOTECNOLOGÍA

INGENIERÍA CIVIL

Año: 2009

Objetivo: Trabajos de difusión

Estado: Publicado

Rol de participación: Autor (a) único (a)

ISSN impreso: 00000000

DOI: 0

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik,

THE THEORETICAL EVALUATION OF THE ORDER OF REACTIVITY OF TRANSFER AGENTS UTILIZED IN RAFT POLYMERIZATION: GROUP Z

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2009

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/s00894-009-0476-3

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Armando Zaragoza Contreras, Isis Rodríguez Sánchez,

FUEL GAS STORAGE AND SEPARATIONS BY METAL-ORGANIC FRAMEWORKS: SIMULATED ADSORPTION ISOTHERMS FOR H2, CH4 AND THEIR EQUIMOLAR MIXTURE

THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C

Año: 2009

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 19327447 ISSN electrónico: 19327455 DOI: 10.1021/jp809539w

Autor(es): Marco Gallo Estrada, Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL STUDY OF 3,4-DIPHENYL-1,2,5-THIADIAZOLE 1-OXIDE FOR ORGANIC PHOTOVOLTAICS

INTERNATIONAL JOURNAL OF PHOTOENERGY

Año: 2009

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) único (a)

ISSN impreso: 1110662X ISSN electrónico: 1687529X DOI: 10.1155/2009/806714

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik,

MOLECULAR MODELING OF THE MELTING TEMPERATURE OF A TUBERCULOSIS DNA NANOBIOSENSOR

NEW BIOTECHNOLOGY

Año: 2009

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 18716784 ISSN electrónico: 18764347 DOI: 10.1016/j.nbt.2009.06.075

Autor(es): Erasmo Orrantia Borunda , Mónica Alvarado González , Daniel Glossman Mitnik ,

CHARACTERIZATION OF THE SEMIQUINONES AND QUINONES OF (-)-EPICATECHIN BY MEANS OF COMPUTATIONAL

CHEMISTRY

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2009

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2008.11.008

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Saúl Ruiz Cruz, Ana María Mendoza Wilson, Rene Renato Balandrán Quintana, Graciela

Dolores Avila Quezada,

THEORETICAL ANALYSIS OF ANTHRACENE AND ITS CARBONYL AND CARBOXYL DERIVATIVES USING DFT AND TD-

DFT

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2009

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2008.09.041

Autor(es): Diana Barraza Jiménez, Alberto Flores Hidalgo, Daniel Glossman Mitnik,

THEORETICAL STUDY OF ELECTRONIC PROPERTIES OF ORGANIC PHOTOVOLTAIC MATERIALS

JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY

Año: 2009

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 01928651 ISSN electrónico: 1096987X DOI: 10.1002/jcc.21126

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Erika I. López Martínez, Alfredo Marquez Lucero, Luz María Rodríguez Valdez, Norma

Flores Holguín,

COMPUTATIONAL NOTE ON THE CALCULATION OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND PROPERTIES OF 3,4-

DIPHENYL-1,2,5-THIADIAZOLINE-1,1-DIOXIDE DERIVATIVES FOR ORGANIC PHOTOVOLTAICS

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2009

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2009.01.015

Autor(es): Isis Rodríguez Sánchez, Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL NOTE ON THE CALCULATION OF THE DIPOLE MOMENT, POLARIZABILITY AND HYPERPOLARIZABILITY OF SOLANIDINE

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2008

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2008.04.030

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik , Luz María Rodríguez Valdez , Norma Flores Holguín ,

COMPUTATIONAL NOTE ON THE CALCULATION OF THE PKA OF FLUORESCEIN

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2008

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2008.08.015

Autor(es): Mónica Alvarado González, Daniel Glossman Mitnik, Erasmo Orrantia Borunda,

THERMAL, MECHANICAL, AND ELECTRONIC PROPERTIES OF GLYCINE-SODIUM NITRATE CRYSTAL

JOURNAL OF PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLIDS

Año: 2008

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00223697 ISSN electrónico: 18792553 DOI: 10.1016/j.jpcs.2008.02.010

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Javier Hernández Paredes, Mario E. Alvarez Ramos, R. Rodríguez Mijangos, Alberto Duarte

Moller, Ofelia Hernández Negrete, Hilda Esparza Ponce,

BAND STRUCTURE, OPTICAL PROPERTIES AND INFRARED SPECTRUM OF GLYCINE-SODIUM NITRATE CRYSTAL

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2008

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.molstruc.2007.04.039

Autor(es): Javier Hernández Paredes, Hilda E. Esparza Ponce, Mario E. Alvarez Ramos, Daniel Glossman Mitnik, Alberto

Duarte Moller,

THEORETICAL STUDY OF CHEMICAL REACTIVITY OF THE MAIN SPECIES IN THE ALPHA-PINENE ISOMERIZATION REACTION

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2008

Objetivo: Investigación

Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2007.12.046

Autor(es): Norma Flores Holguín, Alfredo Aguilar Elguézabal, Luz María Rodríguez Valdez, Daniel Glossman Mitnik,

CHIH-DFT COMPUTATIONAL MOLECULAR CHARACTERIZATION OF PHENANTHRO[9,10-C]-1,2,5-THIADIAZOLE 1,1-DIOXIDE

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2008

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) único (a)

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2008.04.030 **Autor(es):** Daniel Glossman Mitnik ,

MOLECULAR STRUCTURE AND SUBSTITUTION EFFECTS ON DIPHENYLANTHRAZOLINES FOR ORGANIC SEMICONDUCTORS: A THEORETICAL STUDY

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2008

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2008.05.031

Autor(es): Luz María Rodríguez Valdez, Alberto Flores Hidalgo, Daniel Glossman Mitnik, Diana Barraza Jiménez,

COMPUTATIONAL STUDY OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND REACTIVE SITES OF THE R AND S ISOMERS OF PERSIN DIENE

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2008

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2008.08.029

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Graciela Dolores Avila Quezada, René Renato Balandrán Quintana, Ana María Mendoza

Wilson,

OPTIMIZED STRUCTURE AND THERMOCHEMICAL PROPERTIES OF FLAVONOIDS DETERMINED BY THE CHIH(MEDIUM)-DFT MODEL CHEMISTRY VERSUS EXPERIMENTAL TECHNIQUES

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Año: 2007

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 00222860

DOI: 10.1016/j.molstruc.2007.02.008

Autor(es): Daniel Lardizábal Gutiérrez, Ana María Mendoza Wilson, Enrique Torres Moye, Daniel Glossman Mitnik, Alejandro

Camacho Dávila, Armando Quintero Ramos, Luis Fuentes Cobas, René Renato Balandrán Quintana,

NANOTUBOS Y FULLERENOS FUNCIONALIZADOS CON FÁRMACOS

BOLETÍN DE LA SOCIEDAD QUÍMICA DE MÉXICO

Año: 2007

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 00000000

DOI: 0

Autor(es): Alejandra Favila Pérez, Daniel Glossman Mitnik, Marco Gallo Estrada,

CHIH-DFT DETERMINATION OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND INFRARED AND ULTRAVIOLET SPECTRA OF AZATHIOPHENES

THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS

Año: 2007

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) único (a)

ISSN impreso: 1432881X
ISSN electrónico: 14322234
DOI: 10.1007/s00214-006-0128-y
Autor(es): Daniel Glossman Mitnik,

CHIH-DFT DETERMINATION OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND IR AND UV SPECTRA OF SOLANIDINE

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2007

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) único (a)

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/s00894-006-0123-1 Autor(es): Daniel Glossman Mitnik,

DFT STUDIES OF FUNCTIONALIZED CARBON NANOTUBES AND FULLERENES AS NANOVECTORS FOR DRUG DELIVERY OF ANTITUBERCULAR COMPOUNDS

CHEMICAL PHYSICS LETTERS

Año: 2007

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 00092614

DOI: 10.1016/j.cplett.2007.08.098

Autor(es): Alejandra Favila, Marco Gallo, Daniel Glossman Mitnik,

CHIH-DFT DETERMINATION OF THE DIPOLE MOMENT, POLARIZABILITY AND HYPERPOLARIZABILITY OF GAMMA-SOLANINE

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2007

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2006.12.046 **Autor(es):** Daniel Glossman Mitnik,

CHIH-DFT DETERMINATION OF THE MOLECULAR STRUCTURE, INFRARED SPECTRA, UV SPECTRA AND CHEMICAL REACTIVITY OF THREE ANTITUBERCULAR COMPOUNDS: RIFAMPICIN, ISONIAZID AND PYRAZINAMIDE

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2007

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/s00894-007-0170-2

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Marco Gallo, Alejandra Favila,

CHIH-DFT COMPUTATIONAL MOLECULAR CHARACTERIZATION OF ACENAPHTO[1,2-C]-1,2,5-THIADIAZOLE 1,1-DIOXIDE

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2007

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) único (a)

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2007.02.025 **Autor(es):** Daniel Glossman Mitnik,

CHIH-DFT DETERMINATION OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND INFRARED AND ULTRAVIOLET SPECTRA OF GAMMA-SOLANINE

SPECTROCHIMICA ACTA PART A

Año: 2007

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) único (a)

ISSN impreso: 13861425 ISSN electrónico: 18733557 DOI: 10.1016/j.saa.2006.03.033 Autor(es): Daniel Glossman Mitnik,

CARACTERIZACIÓN MOLECULAR COMPUTACIONAL DE NANOMELFOS

BOLETÍN DE LA SOCIEDAD QUÍMICA DE MÉXICO

Año: 2007

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) único (a)

ISSN impreso: 00000000

DOI: 0

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik,

THEORETICAL STUDY OF THE MOLECULAR PROPERTIES AND CHEMICAL REACTIVITY OF (+)-CATECHIN AND (-)-EPICATECHIN RELATED TO THEIR ANTIOXIDANT PROPERTIES

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2006

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2006.01.001

Autor(es): Ana María Mendoza Wilson, Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL CHEMISTRY OF THE STRUCTURE AND REACTIVITY OF ORGANIC MOLECULAR MATERIALS

JOURNAL OF THE MEXICAN CHEMICAL SOCIETY

Año: 2006

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 1870249X ISSN electrónico: 16659686

DOI: 0

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL SIMULATION OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND CORROSION PROPERTIES OF AMIDOETHYL, AMINOETHYL AND HIDROXYETHYL IMIDAZOLINES INHIBITORS

CORROSION SCIENCE

Año: 2006

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 0010938X ISSN electrónico: 18790496 DOI: 10.1016/j.corsci.2006.05.036

Autor(es): J.G. González Rodríguez, Lorenzo Martínez, W. Villamisar, Luz María Rodríguez Valdez, Daniel Glossman Mitnik,

M. Casales, Alberto Martínez Villafañe,

CÁLCULOS TEÓRICOS DE REACTIVIDAD EN DERIVADOS DE TIADIAZOL COMO POSIBLES INHIBIDORES DE LA CORROSIÓN

JOURNAL OF THE MEXICAN CHEMICAL SOCIETY

Año: 2006

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 00000000

DOI: 0

Autor(es): Alberto Martínez Villafañe, Luz María Rodríguez Valdez, Amelia Valdez Aguirre, María E. Fuentes Montero, Daniel

Glossman Mitnik,

CBS-QB3 CALCULATION OF QUANTUM CHEMICAL MOLECULAR DESCRIPTORS OF ISOMERIC THIADIAZOLES

JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS AND MODELLING

Año: 2006

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 10933263
ISSN electrónico: 18734243
DOI: 10.1016/j.jmgm.2006.03.001
Autor(es): Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL SIMULATION OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND PROPERTIES OF HETEROCYCLIC ORGANIC COMPOUNDS WITH POSSIBLE CORROSION INHIBITION PROPERTIES

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2005

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2004.10.036

Autor(es): Luz María Rodríguez Valdez, Daniel Glossman Mitnik, Alberto Martínez Villafañe,

STUDY OF THE EFFECT OF SOLVENT INDUCED SWELLING ON THE RESISTIVITY OF BUTADIENE BASED ELASTOMERS FILLED WITH CARBON PARTICLES. PART I. ELUCIDATING SECOND ORDER EFFECTS

SENSORS AND ACTUATORS A

Año: 2005

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 09244247 DOI: 10.1016/j.sna.2004.09.008

Autor(es): Ignacio R. Martín Domínguez, A. Carrillo, Daniel Glossman Mitnik, Alfredo Márquez Lucero,

CHIH-DFT DETERMINATION OF THE ELECTRICAL, OPTICAL AND MAGNETIC PROPERTIES AND NICS AROMATICITY OF MEGAZOL

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2005

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2004.10.089

Autor(es): Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik,

G3-B3 CALCULATION OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND DESCRIPTORS OF ISOMERIC THIADIAZOLES

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2005

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2005.02.082 **Autor(es):** Daniel Glossman Mitnik,

CHIH-DFT DETERMINATION OF THE CHEMICAL REACTIVITY OF THE ANTIPARASITIC DRUG MEGAZOL

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2005

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 01662280

DOI: 10.1016/j.theochem.2005.02.048

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguín,

CHIH-DFT STUDY OF THE ELECTRONIC PROPERTIES AND CHEMICAL REACTIVITY OF QUERCETIN

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2005

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Asesor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2004.10.083

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Ana María Mendoza Wilson,

CHIH-DFT THEORETICAL STUDY OF ISOMERIC THIATRIAZOLES AND THEIR POTENTIAL ACTIVITY AS CORROSION

INHIBITORS

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2005

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2004.10.082

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Luz María Rodríguez Valdez, Alberto Martínez Villafañe,

SYNTHESIS OF TIO2 NANORODS IN THE PRESENCE OF LINEAR DNA PLASMID PBR322 BY A SOL-GEL PROCESS

NANOTECHNOLOGY

Año: 2005

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 09574484 ISSN electrónico: 13616528 DOI: 10.1088/0957-4484/16/8/048

Autor(es): Alberto Martínez Villafañe, Humberto A. Monreal Romero, José Chacón Nava, Daniel Glossman Mitnik, Perla G.

Casillas, Carlos A. Martínez,

OBTENCIÓN DE (NANOCILINDROS) DE TIO2 DIRIGIDO POR ADN MEDIANTE SOL-GEL

REVISTA DEL CENTRO DE INVESTIGACIÓN DE LA UNIVERSIDAD LA SALLE

Año: 2005

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 14056690 **ISSN electrónico**: 16658512

DOI: 0

Autor(es): Carlos A. Martínez, José Chacón Nava, Perla G. Casillas, Humberto A. Monreal Romero, Daniel Glossman Mitnik,

Alberto Martínez Villafañe,

CHIH-DFT DETERMINATION OF THE MOLECULAR STRUCTURE, INFRARED AND ULTRAVIOLET SPECTRA OF POTENTIALLY ORGANIC-CORROSION INHIBITORS

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2004

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2004.04.058

Autor(es): Luz María Rodríguez Valdez , Daniel Glossman Mitnik ,

CHIH-DFT DETERMINATION OF THE MOLECULAR STRUCTURE, INFRARED AND ULTRAVIOLET SPECTRA OF THE FLAVONOID QUERCETIN

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2004

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2004.04.054

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Ana María Mendoza Wilson,

CHIH-DFT DETERMINATION OF THE MOLECULAR STRUCTURE, INFRARED AND ULTRAVIOLET SPECTRA OF THE ANTIPARASITIC DRUG MEGAZOL

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2004

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2004.04.056

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguín,

AN INTRODUCTORY STUDY OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND PROPERTIES OF OLIGOTHIADIAZOLES

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2003

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/S0166-1280(03)00253-7

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguín,

INFLUENCE OF THE BASIS SET AND CORRELATION METHOD ON THE CALCULATION OF THE DIPOLE MOMENTS OF ISOME/RIC THIADIAZOLES

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2003

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/S0166-1280(03)00255-0 **Autor(es):** Daniel Glossman Mitnik,

CRYSTALLOGRAPHIC STUDY AND MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS OF THIADIAZOLE DERIVATIVES. 2. 3,4-DIPHENYL-1,2,5-THIADIAZOLINE 1,1-DIOXIDE

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Año: 2002

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00222860

DOI: 10.1016/S0022-2860(01)00605-6

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, O.E. Piro, José A. Caram, Alfredo Márquez Lucero, Silvia L. Aimone, E.E. Castellano,

Enrique J. Vasini, María V. Mirífico,

CRYSTALLOGRAPHIC STUDY AND MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS OF THIADIAZOLE DERIVATIVES. 3. 3,4-DIPHENYL-1,2,5-THIADIAZOLINE 1,1-DIOXIDE, 3,4-DIPHENYL 1,2,5-THIADIAZOLIDINE 1,1-DIOXIDE AND 4-ETHOXY-5-METHYL-3,4-DIPHENYL 1,2,5-THIADIAZOLINE 1,1-DIOXIDE

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Año: 2001

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00222860

DOI: 10.1016/S0022-2860(01)00605-6

Autor(es): E.E. Castellano, Silvia L. Aimone, O.E. Piro, Enrique J. Vasini, Alfredo Márquez Lucero, Daniel Glossman Mitnik, José A. Caram, María V. Mirífico,

AB INITIO STUDY OF THE ADDITIVITY CONCEPT APPLIED FOR THE EFFECTS OF ONE SUBSTITUENT WITHIN CYCLIC COMPOUNDS

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2001

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/S0166-1280(00)00709-0

Autor(es): Natalia A. Ogorodnikova, Daniel Glossman Mitnik,

LOCAL AND NONLOCAL DENSITY FUNCTIONAL CALCULATIONS OF THE MOLECULAR STRUCTURE OF THIADIAZOLE MONOXIDES

INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY

Año: 2001

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 00207608
ISSN electrónico: 1097461X
DOI: https://tinyurl.com/p9vdz7pf

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Alfredo Márquez Lucero,

INFLUENCE OF THE BASIS SET AND CORRELATION METHOD ON THE CALCULATION OF MOLECULAR STRUCTURES: THIADIAZOLES REVISITED

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2001

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/S0166-1280(01)00509-7 **Autor(es):** Daniel Glossman Mitnik,

A THEORETICAL STUDY ON THE AROMATICITY OF THIADIAZOLES AND RELATED COMPOUNDS

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2001

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/S0166-1280(01)00550-4 **Autor(es):** Daniel Glossman Mitnik ,

HF AND DFT CALCULATIONS OF THE MOLECULAR STRUCTURE OF ISOMERIC THIADIAZOLE DIOXIDES

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2001

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/S0166-1280(00)00605-9

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Alfredo Márquez Lucero,

CRYSTALLOGRAPHIC STUDY AND MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS OF THIADIAZOLE DERIVATIVES. 1. PHENANTHRO[9,10-C]-1,2,5-THIADIAZOLE 1,1-DIOXIDE AND ACENAPHTO[1,2-C]-1,2,5-THIADIAZOLE 1,1-DIOXIDE

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Año: 2001

Objetivo: Investigación

Estado: Aceptado para su publicación **Rol de participación:** Co-autor (a)

ISSN impreso: 00222860

DOI: 10.1016/S0022-2860(00)00870-X

Autor(es): Alfredo Márquez Lucero, María V. Mirífico, Silvia L. Aimone, E.E. Castellano, Daniel Glossman Mitnik, Enrique J.

Vasini, O.E. Piro, José A. Caram,

APPLICATION OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY CONCEPTS TO THE STUDY OF THE CHEMICAL REACTIVITY OF ISOMERIC THIADIAZOLINES

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2001

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/S0166-1280(00)00569-8

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik , Alfredo Márquez Lucero ,

HARTREE-FOCK (HF) AND LOCAL AND NONLOCAL DENSITY FUNCTIONAL (DFT) CALCULATIONS OF THE MOLECULAR STRUCTURE OF ISOMERIC THIADIAZOLIDINES

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2001

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/S0166-1280(00)00703-X

Autor(es): Alfredo Márquez Lucero, Daniel Glossman Mitnik,

UNEXPECTED PRODUCTION OF 2,4,6-TRIPHENYL-1,2,5-TRIAZINE IN THE ELECTROREDUCTION OF 3,4-DIPHENYL-1,2,5-THIADIAZOLE 1-OXIDE. THEORETICAL ESTIMATION OF REACTIVE SITES FOR 1-OXIDE AND 1,1-DIOXIDE 1,2,5-THIADIAZOLES

TETRAHEDRON LETTERS

Año: 2000

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00404039

DOI: 10.1016/S0040-4039(00)00449-4

Autor(es): E.E. Castellano, O.E. Piro, María V. Mirífico, Daniel Glossman Mitnik, José A. Caram, Silvia L. Aimone, Enrique J.

Vasini,

CRYSTAL STRUCTURE AND MO CALCULATIONS OF CONDENSED BENZENIC 1,2,5-THIADIAZOLE DERIVATIVES

ACTA CRYSTALLOGRAPHICA SECTION A

Año: 1999

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 20532733

DOI: 0

Autor(es): Eduardo Enrique Castellano, Oscar E. Piro, José Alberto Caram, María Virginia Mirífico, Enrique J. Vasini, Daniel

Glossman Mitnik,

CRYSTALLOGRAPHIC STUDY AND MOLECULAR ORBITAL CALCULATIONS OF 1,2,5-THIADIAZOLE 1,1-DIOXIDE DERIVATIVES

JOURNAL OF PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY

Año: 1998

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 08943230 ISSN electrónico: 10991395

DOI: 0

Autor(es): Silvia L. Aimone, Daniel Glossman Mitnik, O.E. Piro, José A. Caram, María V. Mirífico, Enrique J. Vasini, E.E.

Castellano,

LOCAL AND NONLOCAL DENSITY FUNCTIONAL CALCULATIONS OF THE MOLECULAR STRUCTURE OF ISOMERIC THIADIAZOLES

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 1997

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 0

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik,

MOLECULAR AND ELECTRONIC STRUCTURE OF 1,2,5-THIADIAZOLE DERIVATIVES

ACTA CRYSTALLOGRAPHICA SECTION A

Año: 1996

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 05677394 ISSN electrónico: 20532733 DOI: 10.1107/S0108767396088812

Autor(es): Enrique J. Vasini, María V. Mirífico, E.E. Castellano, O.E. Piro, Silvia L. Aimone, Daniel Glossman Mitnik, José A.

Caram,

APPLICATION OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY CONCEPTS TO THE STUDY OF THE CHEMICAL REACTIVITY OF THIADIAZOLES

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 1995

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/0166-1280(94)03865-I **Autor(es):** Daniel Glossman Mitnik ,

INCIPIENT MANIFESTATION OF THE SHELL STRUCTURE OF ATOMS WITHIN THE WDA MODEL FOR THE EXCHANGE AND KINETIC ENERGY FUNCTIONALS

CHEMICAL PHYSICS

Año: 1995

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 03010104 ISSN electrónico: 18734421

DOI: 10.1016/0301-0104(95)00129-C

Autor(es): Julio Alfonso Alonso , Daniel Glossman Mitnik , Luis Carlos Balbás ,

NONLOCAL EXCHANGE AND KINETIC ENERGY DENSITY FUNCTIONAL WITH CORRECT ASYMPTOTIC BEHAVIOR FOR ELECTRONIC SYSTEMS

INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY

Año: 1994

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 00207608 ISSN electrónico: 1097461X DOI: 10.1002/qua.560490309

Autor(es): Luis Carlos Balbás, Angel Rubio, Daniel Glossman Mitnik, Julio Alfonso Alonso,

ATOMIC STRUCTURE OF METALLIC CLUSTERS OF LARGE SIZE

PHILOSOPHICAL MAGAZINE B

Año: 1994

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 13642812

DOI: 10.1080/01418639408240173

Autor(es): María Pilar Iñiguez , Daniel Glossman Mitnik , Qiang Wang , Julio Alfonso Alonso ,

NONLOCAL APPROXIMATION TO THE EXCHANGE AND KINETIC ENERGY FUNCTIONALS. APPLICATION TO METALLIC CLUSTERS

INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY

Año: 1993

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 00207608 ISSN electrónico: 1097461X DOI: 10.1002/qua.560450402

Autor(es): Julio Alfonso Alonso , Daniel Glossman Mitnik , Luis Carlos Balbás , Llorenc Serra , Angel Rubio ,

STABILITIES OF LARGE SODIUM CLUSTERS FOR DIFFERENT ATOMIC ARRANGEMENTS

PHYSICAL REVIEW B

Año: 1993

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 24699950 ISSN electrónico: 1550235X DOI: 10.1103/PhysRevB.47.4747

Autor(es): Julio Alfonso Alonso , Daniel Glossman Mitnik , María Pilar Iñiguez ,

NONLOCAL EXCHANGE AND KINETIC ENERGY DENSITY FUNCTIONALS FOR ELECTRONIC SYSTEMS. APPLICATION

TO ATOMS AND IONS

PHYSICAL REVIEW A

Año: 1993

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 24699926 ISSN electrónico: 10941622 DOI: 10.1002/qua.560490309

Autor(es): Luis Carlos Balbás, Angel Rubio, Daniel Glossman Mitnik, Julio Alfonso Alonso,

ATOMIC STRUCTURE OF METALLIC CLUSTERS OF MEDIUM SIZE

INTERNATIONAL JOURNAL OF MODERN PHYSICS B

Año: 1992

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 02179792 ISSN electrónico: 17936578 DOI: 10.1080/01418639408240173

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, María Pilar Iñiguez, Julio Alfonso Alonso,

NONLOCAL APPROXIMATION TO THE EXCHANGE AND KINETIC ENERGY FUNCTIONALS. APPLICATION TO ATOMS

NEW JOURNAL OF CHEMISTRY

Año: 1992

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 11440546 ISSN electrónico: 13699261 DOI: 10.1002/qua.560450402

Autor(es): Julio Alfonso Alonso, Angel Rubio, Luis Carlos Balbás, Daniel Glossman Mitnik,

DISTRIBUTION OF INTERATOMIC DISTANCES IN LARGE METALLIC CLUSTERS

ZEITSCHRIFT FUR PHYSIK D

Año: 1992

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01787683 ISSN electrónico: 14315866 DOI: 10.1007/BF01426096

Autor(es): Julio Alfonso Alonso, Daniel Glossman Mitnik, María Pilar Iñiguez,

NONLOCAL EXCHANGE AND KINETIC ENERGY FUNCTIONALS FOR ELECTRONIC SYSTEMS

INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY, QUANTUM CHEMISTRY SYMPOSIUM

Año: 1992

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 00207608 ISSN electrónico: 1097461X DOI: 10.1002/qua.560440830

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Luis Carlos Balbás, Julio Alfonso Alonso, Angel Rubio,

VARIATIONAL STUDY OF A NEW APPROXIMATION FOR THE KINETIC ENERGY DENSITY FUNCTIONAL

CHEMICAL PHYSICS LETTERS

Año: 1992

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 00092614

DOI: 10.1016/0009-2614(92)90028-L **Autor(es):** Daniel Glossman Mitnik ,

ATOMIC PROPERTIES THROUGH THOMAS-FERMI-DIRACK-WEIZSACKER THEORY

ACTA PHYSICA HUNGARICA

Año: 1990

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 02314428 **DOI:** 10.1007/BF03054262

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Eduardo A. Castro,

CALCULATION OF <P> AND <P-1> FROM VARIATIONAL ATOMIC DENSITIES

CHEMICAL PHYSICS LETTERS

Año: 1990

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 00092614

DOI: 10.1016/0009-2614(90)87172-N

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Eduardo A. Castro,

SOME APPLICATIONS OF SCHEIDEMANN-DREIZLER'S SOLUTION OF THE TFDW EQUATION

CHEMICAL PHYSICS LETTERS

Año: 1990

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 00092614

DOI: 10.1016/0009-2614(90)87090-E

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik , Eduardo A. Castro ,

VARIATIONAL TREATMENT OF THE PARTICLE IN A ONE DIMENSIONAL BOX WITH CONVEX BOTTOM

BOLETÍN DE LA SOCIEDAD QUÍMICA DEL PERÚ

Año: 1990

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 00378623

DOI: 0

Autor(es): Francisco M. Fernández, Daniel Glossman Mitnik, Eduardo A. Castro,

UNA INTRODUCCIÓN ELEMENTAL A LA TEORÍA DE LOS FUNCIONALES DE LA DENSIDAD. II. APLICACIONES AL ESTUDIO DE PROPIEDADES ATÓMICAS

ANUARIO LATINOAMERICANO DE EDUCACIÓN QUÍMICA

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 0328087X

DOI: 0

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Eduardo A. Castro,

VARIATIONAL TEST ON THE RELATIONSHIP BETWEEN GRADIENT EXPANSION TERMS IN THE KINETIC ENERGY DENSITY FUNCTIONAL

PHYSICAL REVIEW A

Año: 1989

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 24699926 ISSN electrónico: 10941622 DOI: 10.1103/PhysRevA.39.4870

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik , Eduardo A. Castro ,

ATOMIC CALCULATIONS THROUGH A MODIFIED THOMAS-FERMI-DIRAC-WEIZSACKER THEORY

ZEITSCHRIFT FUR PHYSIK D

Año: 1989

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01787683

DOI: 0

Autor(es): Eduardo A. Castro, Daniel Glossman Mitnik,

VARIATIONAL PRINCIPLE FOR OBTAINING APPROXIMATE ANALYTICAL SOLUTIONS OF THE THOMAS-FERMI EQUATION FOR ATOMS IN A STRONG MAGNETIC FIELD

BULGARIAN JOURNAL OF PHYSICS

Año: 1988

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 13100157 ISSN electrónico: 13142666

DOI: 0

Autor(es): Eduardo A. Castro, Daniel Glossman Mitnik,

THE EXCHANGE CORRECTION IN THE THOMAS-FERMI MODEL FOR ATOMS IN STRONG MAGNETIC FIELDS

SOUTH AFRICAN JOURNAL OF PHYSICS

Año: 1988

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 00382310

DOI: 0

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Eduardo A. Castro,

QUALITY OF SIMPLE APPROXIMATE SOLUTIONS FOR THE THOMAS-FERMI MODEL OF ATOMS AND IONS IN STRONG MAGNETIC FIELDS

JOURNAL OF PHYSICS B

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 09534075 ISSN electrónico: 13616455 DOI: 10.1088/0953-4075/21/3/010

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Eduardo A. Castro,

TEORÍA DE LOS FUNCIONALES DE LA DENSIDAD Y REACTIVIDAD QUÍMICA

FOLIA CHIMICA THEORETICA LATINA

Año: 1988

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 00000000

DOI: 0

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Eduardo A. Castro,

AN INTERMEDIATE SOLUTION BETWEEN CSAVINZKY'S AND KESARWANI-VARSHNI'S TRIAL DENSITY FUNCTIONS

MATCH (COMMUNICATIONS IN MATHEMATICAL CHEMISTRY)

Año: 1987

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 03406253

DOI: 0

Autor(es): Eduardo A. Castro, Daniel Glossman Mitnik, María Cristina Donnamaría,

APPLICATION OF THE MODIFIED WU FUNCTION TO THE CALCULATION OF SOME NEUTRAL PROPERTIES

ACTA PHYSICA SLOVACA

Año: 1987

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 03230465 ISSN electrónico: 1336040X

DOI: 0

Autor(es): María Cristina Donnamaría, Francisco M. Fernández, Eduardo A. Castro, Daniel Glossman Mitnik,

APPROXIMATE ANALYTICAL SOLUTION OF THE THOMAS-FERMI EQUATION FOR POSITIVE IONS IN A STRONG MAGNETIC FIELD

ZEITSCHRIFT FUR PHYSIK D

Año: 1987

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01787683 ISSN electrónico: 14315866

DOI: 0

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Eduardo A. Castro,

A SHORT NUMERICAL TEST FOR LUDEÑA'S FUNCTIONAL

FEW-BODY SYSTEMS

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01777963 ISSN electrónico: 14325411

DOI: 0

Autor(es): Eduardo A. Castro, María Cristina Donnamaría, Daniel Glossman Mitnik,

ASYMMETRIC RARE GAS PAIR POTENTIALS WITH ENERGY DENSITY FUNCTIONALS

JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS

Año: 1986

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 00219606 ISSN electrónico: 10897690

DOI: 0

Autor(es): María Cristina Donnamaría, Julio Alfonso Alonso, Daniel Glossman Mitnik,

APPROXIMATE ANALYTICAL SOLUTION OF THE THOMAS-FERMI-AMALDI EQUATION FOR NEGATIVE IONS IN A SUPERSTRONG MAGNETIC FIELD

MATCH (COMMUNICATIONS IN MATHEMATICAL CHEMISTRY)

Año: 1986

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 03406253

DOI: 0

Autor(es): Eduardo A. Castro, Daniel Glossman Mitnik,

THE EXCHANGE AND SELF-INTERACTION CORRECTIONS IN THE THOMAS-FERMI CALCULATION OF DIAMAGNETIC SUSCEPTIBILITIES FOR IONS

JOURNAL DE PHYSIQUE

Año: 1985

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 11554304

DOI: 10.1051/jphys:01985004602017300

Autor(es): Eduardo A. Castro, Daniel Glossman Mitnik, María Cristina Donnamaría, Francisco M. Fernández,

MATRICES DE DENSIDAD. II. APLICACIONES DE LAS MATRICES DE DENSIDAD REDUCIDAS

FOLIA CHIMICA THEORETICA LATINA

Año: 1985

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 00000000

DOI: 0

Autor(es): Eduardo A. Castro, Daniel Glossman Mitnik, María Cristina Donnamaría, Francisco M. Fernández,

CÁLCULO DE Z VARIACIONAL CON LOS FUNCIONALES DE ENERGÍA DE THOMAS-FERMI-DIRAC Y THOMAS-FERMI-AMALDI-DIRAC PARA ÁTOMOS NEUTROS

BOLETÍN DE LA SOCIEDAD DE QUÍMICA DEL PERÚ

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 00378623

DOI: 0

Autor(es): Eduardo A. Castro, Francisco M. Fernández, María Cristina Donnamaría, Daniel Glossman Mitnik,

CALCULATION OF THERMODYNAMIC PROPERTIES THROUGH THE USE OF TWO NEW ANALYTICAL EXPRESSIONS FOR THE PARTITION FUNCTION OF THE MORSE OSCILLATOR

BULLETIN OF THE KOREAN CHEMICAL SOCIETY

Año: 1984

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 02532964 ISSN electrónico: 12295949

DOI: 0

Autor(es): Eduardo A. Castro, Francisco M. Fernández, Daniel Glossman Mitnik,

MATRICES DE DENSIDAD. I. LA MATRIZ DE DENSIDAD REDUCIDA Y EL PROBLEMA DE LA N-REPRESENTABILIDAD

FOLIA CHIMICA THEORETICA LATINA

Año: 1984

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 00000000

DOI: 0

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Eduardo A. Castro, María Cristina Donnamaría, Francisco M. Fernández,

A FURTHER TEST ON THE FERMI-AMALDI CORRECTION

BOLETÍN DE LA SOCIEDAD CHILENA DE QUÍMICA

Año: 1983

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 03661644

DOI: 0

Autor(es): María Cristina Donnamaría , Francisco M. Fernández , Eduardo A. Castro , Daniel Glossman Mitnik ,

Z VARIABLE CALCULATIONS WITH THE STATISTICAL THOMAS-FERMI, THOMAS-FERMI-AMALDI, THOMAS-FERMI-DIRAC AND THOMAS-FERMI-AMALDI-DIRAC MODELS FOR IONS

MATCH (COMMUNICATIONS IN MATHEMATICAL CHEMISTRY)

Año: 1983

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 03406253

DOI: 0

Autor(es): Francisco M. Fernández, Daniel Glossman Mitnik, Eduardo A. Castro, María Cristina Donnamaría,

LA TEORÍA DE PERTURBACIONES APLICADA AL MODELO DE LA PARTÍCULA EN UNA CAJA UNIDIMENSIONAL CON BASE CONVEXA

INGENIERÍA Y CIENCIA QUÍMICA

Año: 1983

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 00000000

DOI: 0

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Francisco M. Fernández, Eduardo A. Castro,

LIBROS

DENSITY FUNCTIONAL THEORY - RECENT ADVANCES, NEW PERSPECTIVES AND APPLICATIONS

INTECHOPEN

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Pais:** United Kingdom

Idioma: English (United Kingdom) **Rol de participación:** Editor (a)

Estado: Publicado **ISBN:** 978-1-83969-847-7

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik,

SOLVENTS, IONIC LIQUIDS AND SOLVENT EFFECTS

INTECHOPEN

Año: 2020

Objetivo: Investigación **Pais:** United Kingdom

Idioma: English (United Kingdom)
Rol de participación: Editor (a)

Estado: Publicado **ISBN:** 978-1-78985-281-3

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Magdalena Maciejewska,

DENSITY FUNCTIONAL THEORY

INTECHOPEN LIMITED

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Pais:** United Kingdom

Idioma: English (United Kingdom)
Rol de participación: Editor (a)

Estado: Publicado

ISBN: 978-1-78985-167-0

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik,

CAPÍTULOS

COMPUTATIONAL CHEMISTRY STUDY OF NATURAL APOCAROTENOIDS AND THEIR SYNTHETIC GLYCOPEPTIDE CONJUGATES AS THERAPEUTIC DRUGS

INTECHOPEN

Año: 2022

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Computational Chemistry Study of Natural Apocarotenoids and Their Synthetic Glycopeptide Conjugates as

Therapeutic Drugs **Número del capítulo:** 5

Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) DOI: 10.5772/intechopen.103130

ISBN: 9781803554242

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

REPURPOSING DRUGS FOR THE INHIBITION OF ADVANCED GLYCATION INHIBITION: A COMPUTATIONAL STUDY OF THE CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF THE MET-ENKEPHALIN NEUROTRANSMITTER PEPTIDE BY MEANS OF CONCEPTUAL DFT

NOVA SCIENCE PUBLISHERS

Año: 2021

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Repurposing Drugs for the Inhibition of Advanced Glycation Inhibition: A Computational Study of the Chemical

Reactivity Properties of the Met-Enkephalin Neurotransmitter Peptide by Means of Conceptual DFT

Número del capítulo: 8 Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

DOI: 0

ISBN: 9781536191769

Autor(es): Norma Flores Holguín , Juan Frau , Daniel Glossman Mitnik ,

A SHORT UPDATE ON CHEMINFORMATICS FOR PROMPTING THE PROCESS OF DRUG DESIGN AND DISCOVERY

BOOK PUBLISHER INTERNATIONAL

Año: 2021

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: A Short Update on Cheminformatics for Prompting the Process of Drug Design and Discovery

Número del capítulo: 4 Estado: Publicado

Rol de participación: Autor (a) único (a)

DOI: 10.9734/bpi/cacs/v2/2421F

ISBN: 9789391312077

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik,

DETERMINING THE INFORMATICS AND CONCEPTUAL DFT STUDY OF PIGMENTS DERIVED FROM CAROTENOIDS OF MARINE ORIGIN

BOOK PUBLISHER INTERNATIONAL

Año: 2021

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Determining the Informatics and Conceptual DFT Study of Pigments Derived from Carotenoids of Marine

Origin

Número del capítulo: 11 Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) DOI: 10.9734/bpi/nicb/v1/12158D

ISBN: 9789391473884

Autor(es): Norma Flores Holguín , Juan Frau , Daniel Glossman Mitnik ,

EVALUATION OF ANNONA MURICATA ACETOGENINS AS POTENTIAL ANTI-SARS-COV-2 AGENTS THROUGH COMPUTATIONAL APPROACHES

FRONTERS MEDIA SA

Año: 2021

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Evaluation of Annona muricata Acetogenins as Potential Anti-SARS-CoV-2 Agents Through Computational

Approaches

Número del capítulo: 1

Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) **DOI:** 10.3389/978-2-88971-872-6

ISBN: 9782889718726

Autor(es): Shashanka K Prasad , Pradeep Pradeep , Chandan Shivamallu , Shiva Prasad Kollur , Asad Syed , Najat Marraiki , Chukwuebuka Egbuna , Mihnea-Alexandru Gaman , Kosakowska Kosakowska , William C. Cho , Kingsley Chukwuemeka Patrick-

Iwuanyanwu, Joaquín Ortega Castro, Juan Frau, Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik,

CONCEPTUAL DFT AS A HELPFUL CHEMOINFORMATICS TOOL FOR THE STUDY OF THE CLAVANIN FAMILY OF ANTIMICROBIAL MARINE PEPTIDES

INTECHOPEN

Año: 2021

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Conceptual DFT as a Helpful Chemoinformatics Tool for the Study of the Clavanin Family of Antimicrobial

Marine Peptides

Número del capítulo: 3 Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) DOI: 10.5772/intechopen.78820

ISBN: 9781838810832

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

STUDY ON THE COMPUTATIONAL NUTRACEUTICS OF A CITRUS FLAVONOID: AN APPROACH USING CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY (CDFT)

BOOK PUBLISHER INTERNATIONAL

Año: 2021

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Study on the Computational Nutraceutics of a Citrus Flavonoid: An Approach Using Conceptual Density

Functional Theory (CDFT) **Número del capítulo:** 10

Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) DOI: 10.9734/bpi/nicb/v1/12157D

ISBN: 9789391473884

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

ABOUT THE COMPUTATIONAL PREDICTION OF THE MAXIMUM ABSORPTION WAVELENGTHS OF INDIGO IN DIFFERENT SOLVENTS WITH THE MINNESOTA FAMILY OF DENSITY FUNCTIONALS

BOOK PUBLISHER INTERNATIONAL

Año: 2021

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: About the Computational Prediction of the Maximum Absorption Wavelengths of Indigo in Different Solvents

with the Minnesota Family of Density Functionals

Número del capítulo: 8 Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) DOI: 10.9734/bpi/nicb/v1/12155D

ISBN: 9789391473884

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

DETERMINATION OF CHEMICAL REACTIVITIES OF OXYTOCIN AND VASOPRESSIN PEPTIDE HORMONES STUDIED THROUGH CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY (CDFT) AND MOLECULAR ELECTRON DENSITY THEORY (MEDT)

BOOK PUBLISHER INTERNATIONAL

Año: 2021

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Determination of Chemical Reactivities of Oxytocin and Vasopressin Peptide Hormones Studied through

Conceptual Density Functional Theory (CDFT) and Molecular Electron Density Theory (MEDT)

Número del capítulo: 3 Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) DOI: 10.9734/bpi/nicb/v2/4072F

ISBN: 9789391882280

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

THE REACTIVITY SITES OF AMYLOID BETA-PEPTIDES ABETA40 AND ABETA42 IN ALZHEIMER'S DISEASE: COMPUTATIONAL PREDICTION

BOOK PUBLISHER INTERNATIONAL

Año: 2021

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: The Reactivity Sites of Amyloid beta-Peptides Abeta40 and Abeta42 in Alzheimer's Disease: Computational

Prediction

Número del capítulo: 6 **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) DOI: 10.9734/bpi/cacs/v2/2424F

ISBN: 9789391312077

Autor(es): Juan Frau , Daniel Glossman Mitnik ,

STUDY ON THE MOLECULAR REACTIVITY OF THE DANSYLGLYCINE IN WATER AND DIOXANE ESTIMATED THROUGH CONCEPTUAL DFT

BOOK PUBLISHER INTERNATIONAL

Año: 2021

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Study on the Molecular Reactivity of the Dansylglycine in Water and Dioxane Estimated through Conceptual

DFT

Número del capítulo: 9 Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) DOI: 10.9734/bpi/nicb/v1/12156D

ISBN: 9789391473884

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

REVISITING THE VALIDATION OF THE KID METHODOLOGY THROUGH CDFT DESCRIPTORS OF FLUORESCENT DNA STAINING DYES

BOOK PUBLISHER INTERNATIONAL

Año: 2021

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Revisiting the Validation of the KID Methodology through CDFT Descriptors of Fluorescent DNA Staining Dyes

Número del capítulo: 5 Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) DOI: 10.9734/bpi/cacs/v2/2422F

ISBN: 9789391312077

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

CONCEPTUAL DFT AS A NOVEL CHEMOINFORMATICS TOOL FOR STUDYING THE CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF THE AMATOXIN FAMILY OF FUNGAL PEPTIDES

VIDE LEAF Año: 2020

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Conceptual DFT as a Novel Chemoinformatics Tool for Studying the Chemical Reactivity Properties of the

Amatoxin Family of Fungal Peptides

Número del capítulo: 14 Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

DOI: 0

ISBN: 9789390014088

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

CDFT-BASED REACTIVITY DESCRIPTORS AS A USEFUL MEDT CHEMOINFORMATICS TOOL FOR THE STUDY OF THE VIROTOXIN FAMILY OF FUNGAL PEPTIDES

VIDE LEAF Año: 2020

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: CDFT-Based Reactivity Descriptors as a Useful MEDT Chemoinformatics Tool for the Study of the Virotoxin

Family of Fungal Peptides Número del capítulo: 14 Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

DOI: 0

ISBN: 9788194517528

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES AND BIOACTIVITY SCORES OF THE ANGIOTENSIN II VASOCONSTRICTOR OCTAPEPTIDE

INTECHOPEN

Año: 2020

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Chemical Reactivity Properties and Bioactivity Scores of the Angiotensin II Vasoconstrictor Octapeptide

Número del capítulo: 4 Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) DOI: 10.5772/intechopen.83236

ISBN: 9781839625183

Autor(es): Norma Flores Holquín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

CONCEPTUAL DFT STUDY OF THE LOCAL CHEMICAL REACTIVITY OF THE COLORED BISARG MELANOIDIN AND ITS PROTONATED DERIVATIVE

AVIDSCIENCE

Año: 2019

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Conceptual DFT Study of the Local Chemical Reactivity of the Colored BISARG Melanoidin and Its Protonated

Derivative

Número del capítulo: 3 Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

DOI: 0

ISBN: 9789388170506

Autor(es): Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

REFLECTIONS ON THE USE OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY IN THE UNDERSTANDING OF THE EFFECTS OF MODERATE AMOUNTS OF SULFUR SUBSTITUTIONAL IMPURITIES ON ZNO

SCIENCEDOMAIN INTERNATIONAL

Año: 2019

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Reflections on the Use of Density Functional Theory in the Understanding of the Effects of Moderate Amounts

of Sulfur Substitutional Impurities on ZnO

Número del capítulo: 6 **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

DOI: 0

ISBN: 9789389246087

Autor(es): Manuel Alberto Flores Hidalgo, Diana Barraza Jiménez, Daniel Glossman Mitnik,

LOCAL MOLECULAR REACTIVITY OF THE COLORED DANSYLGLYCINE IN WATER AND DIOXANE STUDIED THROUGH CONCEPTUAL DFT

AVIDSCIENCE

Año: 2019

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Local Molecular Reactivity of the Colored Dansylglycine in Water and Dioxane Studied through Conceptual

DFT

Número del capítulo: 1 **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

DOI: 0

ISBN: 9789388170506

Autor(es): Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL ANALYSIS OF A COLORED MAILLARD REACTION PRODUCT FROM THE CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY VIEWPOINT

DOMAINSCIENCE INTERNATIONAL

Año: 2019

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Computational Analysis of a Colored Maillard Reaction Product from the Conceptual Density Functional

Theory Viewpoint **Número del capítulo:** 6 **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

DOI: 0

ISBN: 9788193422465

Autor(es): Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

MORPHOLOGICAL INVESTIGATION AND FRACTAL PROPERTIES OF REALGAR NANOPARTICLES

AVIDSCIENCE

Año: 2019

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Morphological Investigation and Fractal Properties of Realgar Nanoparticles

Número del capítulo: 3 Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

DOI: 0

ISBN: 9789388170529

Autor(es): Amir Lashgari, Shahriar Ghamami, Zahra Bahrami, Farzaneh Shomossi, Guillermo Salgado Morán, Daniel Glossman

Mitnik,

MOLECULAR REACTIVITY AND ABSORPTION PROPERTIES OF MELANOIDIN BLUE-G1 THROUGH CONCEPTUAL DFT

AVIDSCIENCE

Año: 2019

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Molecular Reactivity and Absorption Properties of Melanoidin Blue-G1 through Conceptual DFT

Número del capítulo: 5 **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

DOI: 0

ISBN: 9789388170536

Autor(es): Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

REFLECTIONS ON THE GLYCATING POWER OF SIMPLE CARBOHYDRATES IN THE MAILLARD REACTION: THE CONCEPTUAL DFT VIEWPOINT

DOMAINSCIENCE INTERNATIONAL

Año: 2019

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Reflections on the Glycating Power of Simple Carbohydrates in the Maillard Reaction: The Conceptual DFT

Viewpoint

Número del capítulo: 1 Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

DOI: 0

ISBN: 9789389246568

Autor(es): Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

ASSESSMENT OF THE VALIDITY OF SOME MINNESOTA DENSITY FUNCTIONALS FOR THE PREDICTION OF THE CHEMICAL REACTIVITY OF THE SYBR GREEN I AND ETHIDIUM BROMIDE NUCLEIC ACID STAINS

INTECHOPEN

Año: 2018

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Assessment of the Validity of Some Minnesota Density Functionals for the Prediction of the Chemical

Reactivity of the SYBR Green I and Ethidium Bromide Nucleic Acid Stains

Número del capítulo: 3 Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) DOI: 10.5772/intechopen.68548

ISBN: 9781789231335

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

A COMBINED MOLECULAR DOCKING AND ELECTRONIC STRUCTURE STUDY FOR A BREAST CANCER DRUG DESIGN

INTECHOPEN

Año: 2018

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: A Combined Molecular Docking and Electronic Structure Study for a Breast Cancer Drug Design

Número del capítulo: 7 Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) DOI: 10.5772/intechopen.72895

ISBN: 9781789233544

Autor(es): Linda-Lucila Landeros Martínez, Daniel Glossman Mitnik, Erasmo Orrantia Borunda, Norma Flores Holguín,

CONCEPTUAL DFT STUDY OF THE LOCAL CHEMICAL REACTIVITY OF THE COLORED BISARG MELANOIDIN AND ITS PROTONATED DERIVATIVE

FRONTIERS MEDIA SA

Año: 2018

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Conceptual DFT Study of the Local Chemical Reactivity of the Colored BISARG Melanoidin and its Protonated

Derivative

Número del capítulo: 6

Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

DOI: 0

ISBN: 9782889456260

Autor(es): Juan Frau, Danie Glossman Mitnik,

ELECTRONIC STRUCTURE OF CAROTENOIDS IN NATURAL AND ARTIFICIAL PHOTOSYNTHESIS

INTECHOPEN

Año: 2017

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Electronic Structure of Carotenoids in Natural and Artificial Photosynthesis

Número del capítulo: 2 Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

DOI: 10.5772/65523 **ISBN:** 9789535132127

Autor(es): Manuel Flores Hidalgo, Francisco Torres Rivas, Jesús Monzón Bensojo, Miguel Escobedo Bretado, Daniel Glossman

Mitnik, Diana Barraza Jiménez,

COMPUTATIONAL NANOCHEMISTRY REPORT OF THE MOLECULAR STRUCTURES, PROPERTIES AND CHEMICAL REACTIVITY OF PHEOPHORBIDE A

SPRINGER Año: 2014

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Computational Nanochemistry Report of the Molecular Structures, Properties and Chemical Reactivity of

Pheophorbide a

Número del capítulo: 8 Estado: Publicado

Rol de participación: Autor (a) único (a)

DOI: 0

ISBN: 9789401788472

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL NANOCHEMISTRY STUDY OF THE MOLECULAR STRUCTURE, SPECTRA AND CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF THE BFPF GREEN FLUORESCENT PROTEIN CHROMOPHORE

WILEY SCRIVENER PUBLISHING

Año: 2014

AIIU. 2014

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Computational Nanochemistry Study of the Molecular Structure, Spectra and Chemical Reactivity Properties

of the BFPF Green Fluorescent Protein Chromophore

Número del capítulo: 7 **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) único (a)

DOI: 0

ISBN: 9781118773512

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL MOLECULAR NANOSCIENCE STUDY OF THE PROPERTIES OF COPPER COMPLEXES FOR DYESENSITIZED SOLAR CELLS

SOCIETY FOR NANOMOLECULAR PHOTOVOLTAICS (SEFIN)

Año: 2012

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Computational Molecular Nanoscience Study of the Properties of Copper Complexes for Dye-Sensitized Solar

Cells

Número del capítulo: 2.11

Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

DOI: 0

ISBN: 9788494018992

Autor(es): Jesús Baldenebro López, Daniel Glossman Mitnik,

MOLECULAR DESIGN OF ORGANIC NONLINEAR OPTICS: DIPOLE MOMENT, POLARIZABILITY AND HYPERPOLARIZABILITIES OF THIADIAZOLE OLIGOMERS INVESTIGATED BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY METHODS

SOCIETY OF PHOTO OPTICAL (SPIE)

Año: 2002

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Molecular Design of Organic Nonlinear Optics: Dipole Moment, Polarizability and Hyperpolarizabilities of

Thiadiazole Oligomers Investigated By Density Functional Theory Methods

Número del capítulo: 0 **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

DOI: 0

ISBN: 9780819445667

Autor(es): Alfredo Márquez Lucero, Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik,

CHARGE SENSITIVITY ANALYSIS OF SUBSTITUTED THIADIAZOLES

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATALINA PRESS

Año: 1996

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Charge Sensitivity Analysis of Substituted Thiadiazoles

Número del capítulo: 0 Estado: Publicado

Rol de participación: Autor (a) único (a)

DOI: 0

ISBN: 1414-0314

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik,

ATOMIC STRUCTURE OF METALLIC CLUSTERS OF MEDIUM SIZE

WORLD SCIENTIFIC

Año: 1993

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Atomic Structure of Metallic Clusters of Medium Size

Número del capítulo: 4 Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

DOI: 0

ISBN: 9789810210847

Autor(es): Julio Alfonso Alonso, Daniel Glossman Mitnik, María Pilar Iñiguez,

IMPROVED VARIATIONAL CALCULATIONS WITH ATOMIC ENERGY FUNCTIONALS USING AN ADDITIONAL RESTRICTION ON THE DENSITY

SPRINGER-VERLAG

Año: 1991

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Improved Variational Calculations with Atomic Energy Functionals Using an Additional Restriction on the

Density

Número del capítulo: 22

Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

DOI: 0

ISBN: 0387975128

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Eduardo A. Castro,

DIFUSIÓN

ARTÍCULOS

A FAST AND SIMPLE APPROACH TO COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY

ADVANCES IN ENGINEERING

Año: 2020

ISSN electrónico: 00000000

Autor(es): Norma Flores Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

PARTICIPACIÓN EN CONGRESOS

REUNIÓN NACIONAL DE FÍSICA

Introducción de la Variación de Z en el Cálculo de Energías y Susceptibilidades Diamagnéticas Atómicas por Medio de los Métodos de los Funcionales de la Densidad

1982-01-01

ARGENTINA

III CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA

Introducción de la Variación de Z en los Métodos Estadísticos de Thomas-Fermi, Thomas-Fermi-Amaldi, Thomas-Fermi-Dirac y Thomas-Fermi-Amaldi-Dirac para Iones

1983-09-29

ARGENTINA

CONGRESO IBEROAMERICANO DE CIENCIAS QUÍMICAS

Aplicación de las Correcciones de Autorrepulsión e Intercambio a una Nueva Solución de la Ecuación Variacional de Thomas-Fermi

1983-10-22

PERU

CONGRESO IBEROAMERICANO DE CIENCIAS QUÍMICAS

Un Nuevo Método Variacional Aplicado al Oscilador Anarmónico Cuártico

1983-10-22

PERU

CONGRESO IBEROAMERICANO DE CIENCIAS QUÍMICAS

Determinación de las Propiedades Termodinámicas a partir de Dos Nuevas Formulaciones Analíticas para la Función de Partición del Oscilador de Morse

1983-10-22

PERU

XVI CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA

Potenciales Heteroatómicos y Funcionales de la Densidad

1984-10-20

BRAZIL

PRIMER CONGRESO PANAMERICANO DE QUÍMICA

Una Función de Prueba para la Descripción de Propiedades Atómicas Mediante Funcionales de la Densidad 1985-10-19

PUERTO RICO

IV CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA

Interacciones Repulsivas entre Átomos de Distintos Gases Nobles Utilizando Funcionales de la Densidad 1985-10-21

ARGENTINA

XVII CONGRESO ARGENTINO DE QUÍMICA

Llenado de la Tabla Periódica Mediante Funcionales de la Densidad

1985-10-10

ARGENTINA

XVII CONGRESO ARGENTINO DE QUÍMICA

Función de Wu Modificada para el Cálculo de Algunas Propiedades Atómicas

1985-10-10

ARGENTINA

3ER SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUÍMICA TEÓRICA

Un Nuevo Principio Variacional para la Obtención de Soluciones Analíticas de Ecuación de Thomas-Fermi para Átomos en Campos Magnéticos Intensos

1985-12-11

BRAZIL

XVII CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA

Validez del Nuevo Principio Variacional para el Modelo de Thomas-Fermi en Campos Magnéticos Fuertes

1986-10-19

COLOMBIA

XVII CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA

Solución Analítica Aproximada de la Ecuación de Thomas-Fermi para lones Positivos en Campos Magnéticos Fuertes 1986-10-19

COLOMBIA

V CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA

La Corrección por Intercambio Estadístico en el Modelo de Thomas-Fermi para Átomos en Campos Magnéticos Fuertes 1987-04-30

ARGENTINA

V CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA

Aplicación de la Teoría Thomas-Fermi-Dirac-Weizsacker al Cálculo de Propiedades Atómicas

1987-04-30

ARGENTINA

40 SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUÍMICA TEÓRICA

Atomic Properties Through Extended Thomas-Fermi-Dirac-Weizsacker Theory

1987-11-11

BRAZIL

XVIII CONGRESO ARGENTINO DE QUÍMICA

Una Introducción Elemental a la Teoría de los Funcionales de la Densidad. Ii. Aplicaciones Al Estudio De Átomos 1987-09-25

ARGENTINA

REUNIÓN NACIONAL DE FÍSICA Estructura Cristalina y Funcionales de la Densidad 1987-09-19 **ARGENTINA** 10TH CANADIAN SYMPOSIUM ON THEORETICAL CHEMISTRY Variational Principle for Obtaining Approximate Analytical Solutions of the Thomas-Fermi Equation for Atoms in a Strong Magnetic Field 1989-08-30 **CANADA** XVIII CONGRESO INTERNACIONAL DE QUÍMICOS TEÓRICOS DE EXPRESIÓN LATINA Un Estudio Preliminar del Modelo de Funcionales de la Densidad Superlocalizado 1989-09-22 **ARGENTINA** OHIO SUPERCOMPUTER CENTER WORKSHOP ON THEORY AND APPLICATIONS OF DENSITY FUNCTIONAL APPROACHES TO CHEMISTRY Some Applications of Scheidemann-Dreizler's Solution of the TFDW Equation 1990-05-09 **UNITED STATES OF AMERICA** XIX CONGRESSO INTERNAZIONALE DEI CHIMICHI TEORICI DEI PAESI DI EXPRESSIONE LATINA Estudio Variacional del Funcional de Energía Cinética de Plindov y Pogrebnya 1990-09-14 **ITALY** III CONGRESO BOLIVIANO DE QUÍMICA Análisis de la Solución de Scheidemann-Dreizler de la Ecuación de Thomas-Fermi-Dirac-Weizsacker 1990-09-29 **BOLIVIA** XIII INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON MOLECULAR BEAMS **Distribution of Interatomic Distances in Large Metallic Clusters** 1991-06-07

SPAIN

XIII INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON MOLECULAR BEAMS

Nonlocal Approximation to the Exchange and Kinetic Energy Functionals. Aplication to Metallic Clusters

1991-06-15

SPAIN

NATO ADVANCED STUDY INSTITUTE - METAL LIGAND INTERACTIONS: FROM ATOMS, TO CLUSTERS, TO SURFACES Distribution of Interatomic Distances in Large Metallic Clusters

1991-06-21

ITALY

4TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON THE APPLICATIONS OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY IN CHEMISTRY AND PHYSICS

Nonlocal Approximation to the Exchange and Kinetic Energy Functionals. Application to Atoms

1991-09-27

SWITZERLAND

REUNIÓN BIENAL DE LA SOCIEDAD ESPAÑOLA DE FÍSICA

Nonlocal Approximation to the Exchange and Kinetic Energy Functionals. Application to Metallic Clusters

1991-06-07

SPAIN

II REUNIÓN NACIONAL SOBRE FÍSICA DE MICROPARTÍCULAS

Funcional No Local ee Energía Cinética: Na_N (N<800)

1991-10-04

SPAIN

SANIBEL SYMPOSIA ON ATOMIC, MOLECULAR AND CONDENSED MATTER THEORY

Nonlocal Exchange And Kinetic Energy Density Functionals For Electronic Systems

1992-03-16

UNITED STATES OF AMERICA

ADRIATICO RESEARCH CONFERENCE ON CLUSTERS AND FULLERENES

Atomic Structure of Metallic Clusters of Medium Size

1992-06-26

ITALY

6TH INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON SMALL PARTICLES AND INORGANIC CLUSTERS

Asymptotic Properties of Metallic Clusters with the Nonlocal Approximation to the Exchange and Kinetic Energy

Functional

1992-09-22

UNITED STATES OF AMERICA

NORMAN MARCH 65TH BIRTHDAY CELEBRATION - APPLICATIONS OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Atomic Structure of Metallic Clusters of Large Size

1992-09-19

UNITED KINGDOM

VIII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA

Funcionales No Locales de la Densidad de Energía Cinética y de Intercambio con Comportamiento Asintótico Correcto.

Aplicación Al Estudio De Átomos Y Especies Iónicas

1993-04-22

ARGENTINA

5TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON THE APPLICATIONS OF THE DENSITY FUNCTIONAL THEORY IN CHEMISTRY AND PHYSICS

Study of the Relation Between the Chemical Potential of Atoms and Electrostatic Potentials Using Nonlocal Exchangeand Kinetic-Energy Density Functionals

1993-09-16

ITALY

XXIE CONGRES INTERNATIONAL DES CHIMISTES THEORETICIENS D'EXPRESSION LATINE

Aplicación de la Teoría del Funcional de la Densidad Al Estudio De La Reactividad Química De Los Tiadiazoles

1993-09-24

FRANCE

VII SIMPOSIO BRASILEIRO DE QUÍMICA TEÓRICA

Sensitivity Analysis of Subtituted Thiadiazoles

1993-11-24

BRAZIL

SANIBEL SYMPOSIUM

Electronic Structure and Charge Sensitivity Analysis of 3,4-Diphenyl-1,2,5-Thiadiazole 1,1-Dioxide

1994-02-19

UNITED STATES OF AMERICA

THIRTY YEARS OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY: CONCEPTS AND APPLICATIONS - SATELLITE SYMPOSIUM OF THE 8TH INTERNATIONAL CONGRESS OF QUANTUM CHEMISTRY

Charge Sensitivity Analysis of 1,2,5-Thiadiazoles and their Benzo Derivatives

1994-06-16

POLAND

XX CONGRESO ARGENTINO DE QUÍMICA

Comparación de Métodos Computacionales Aplicados al Estudio de los Tiadiazoles y Compuestos Relacionados

1994-11-18

ARGENTINA

XX CONGRESO ARGENTINO DE QUÍMICA

Cálculos del Funcional de la Densidad No Locales: Comparación de Diferentes Esquemas de Implementación para el

Cálculo de Geometrías y otras Propiedades de los Tiadiazoles

1994-11-18 **ARGENTINA**

XX CONGRESO ARGENTINO DE QUÍMICA

Determinación de la Reactividad Química en Diferentes Posiciones en las Moléculas de Tiadiazoles Mediante una

Determinación Directa de las Sensibilidades Moleculares

1994-11-18

ARGENTINA

IX CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA

Una Aproximación del Funcional de la Densidad a la Estructura Molecular de los Tiadiazoles

1994-11-24

ARGENTINA

IX CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA

Estudio de la Correlación entre la Dureza Química, la Polarizabilidad y el Tamaño de Agregados Metálicos de Sodio y Magnesio

1994-11-24

ARGENTINA

IX CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA

Estudio Teórico y Experimental del Espectro Ultravioleta de Derivados del 1,1-Dioxo-2,5-Tiadiazol

1994-11-24

ARGENTINA

IX CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA

Cálculos Semiempíricos en Tiadiazoles Sustituídos: Una Comparación de las Estructuras y otros Parámetros por Métodos MNDO, AM1 y PM3

1994-11-24

ARGENTINA

IX CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA

Blandura Local, Funciones de Fukui y Reactividad Química del 1,1-Dioxo-3-Metil-4-Fenil-2,5-Tiadiazol

1994-11-24

ARGENTINA

SANIBEL SYMPOSIUM

Electronegativity Equalization Method and Charge Sensitivity Analysis of Substituted Thiadiazoles

1995-03-04

UNITED STATES OF AMERICA

TERCEIRA CONFERENCIA LATINOAMERICA DE FISICOQUÍMICA ORGÁNICA

Charge Sensitivity Analysis of Substituted Thiadiazoles

1995-09-22

BRAZIL

XVIII ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA DA MATERIA CONDENSADA

Molecular and Electronic Structure of Some Thiadiazole Derivatives

1995-06-07

BRAZIL

REUNIAO DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE CRISTALOGRAFÍA

Molecular and Electronic Structure of Some Thiadiazole Derivatives

1995-07-15

BRAZIL

XXII CONGRESO INTERNACIONAL DE QUÍMICOS TEÓRICOS DE EXPRESIÓN LATINA

Cálculos del Funcional de la Densidad Locales y No Locales de la Estructura Molecular de Tiadiazoles Isómeros

1995-09-29

CHILE

IUCR XVII CONGRESS AND GENERAL ASSEMBLY

Molecular and Electronic Structure of 1,2,5-Thiadiazole 1,1-Dioxide Derivatives

1996-08-17

UNITED STATES OF AMERICA

XXIII CONGRESO INTERNACIONAL DE QUÍMICOS TEÓRICOS DE EXPRESIÓN LATINA

Química Computacional y Diseño Molecular de Aromatizantes Alimentarios

1996-09-20

SPAIN

XXI CONGRESO ARGENTINO DE QUÍMICA

Aplicación de la Teoría del Funcional de la Densidad al Estudio de la Reactividad Química de los Tiadiazoles Monóxidos

1996-09-18

ARGENTINA

213TH ACS NATIONAL MEETING - DIVISION OF COMPUTERS IN CHEMISTRY

Local and Nonlocal Density Functional Calculations of the Molecular Structure of Isomeric Thiadiazole 1-Monoxides

1997-04-17

UNITED STATES OF AMERICA

X CONGRESO ARGENTINO DE QUÍMICA

Análisis de Sensibilidad de Cargas de Tiadiazoles Monóxidos

1997-04-25

ARGENTINA

X CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA

Algunas Características de la Distribución de la Densidad Electrónica en Compuestos Aromáticos

ARGENTINA

X CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA

Criterios de Aromaticidad Basados en las Relaciones Pi/Sigma de la Distribución de la Densidad Electrónica

1997-04-25

ARGENTINA

X CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA

Estudio Funcional de la Densidad de la Adición de Etileno y Acetileno al 1,3,4-Tiadiazol

1997-04-25

ARGENTINA

X CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA

Potenciales Químicos, Durezas Químicas y Funciones de Fukui de Butadienos, Pirroles y Ciclopentadienos

1997-04-25

ARGENTINA

X CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA

Aplicación de la Teoría del Funcional de la Densidad al Estudio de Tiadiazolinas y Tiadiazolidinas

1997-04-25

ARGENTINA

X CONGRESO ARGENTINO DE FISICIOQUÍMICA

Estudio Químico-Cuántico de la Función de Fukui Como un Índice de Reactvidad en Derivados del 1,2,5-Tiadiazol. 1,1-

Dioxide

1997-04-25 **ARGENTINA**

X CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA

Estudio Cristalográfico y Químico-Cuántico de la Función de Fukui Como un Índice de Reactividad en Derivados Del 1,2,5-Tiadiazol 1,1-Dióxido

1997-04-25

ARGENTINA

X CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA

Análisis Cristalográfico y Químico-Cuántico de la Estructura y Reactividad Química del 3,4-Difenil-1,2,5-Tiadiazol 1-

Monóxido

1997-04-25

ARGENTINA

X CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA

Estructura Electrónica y Molecular de Derivados del 1,2,5-Tiadiazol 1,1-Dióxido. Parte li

1997-04-25

ARGENTINA

XXIV CONGRESO INTERNACIONAL DE QUÍMICOS TEÓRICOS DE EXPRESIÓN LATINA

Estudio Topológico y Análisis Vibracional de Tiadiazoles Isómeros

1998-09-25

MÉXICO

XXIV CONGRESO INTERNACIONAL DE QUÍMICOS TEÓRICOS DE EXPRESIÓN LATINA

Aplicación de Conceptos Derivados de la Teoría del Funcional de la Densidad al Estudio de la Reactividad Química de Tiadiazoles Monóxidos

XXIV CONGRESO INTERNACIONAL DE QUÍMICOS TEÓRICOS DE EXPRESIÓN LATINA

Cálculos del Funcional de la Densidad Locales y No Locales de la Estructura y Reactividad Química de Tiadiazolinas

1998-09-25

MÉXICO

18TH CONGRESS AND GENERAL ASSEMBLY OF THE INTERNATIONAL UNION OF CRYSTALLOGRAPHY

Crystal Structure and MO Calculations of Condensed Benzenic 1,2,5-Thiadiazole Derivatives

1999-08-13

UNITED KINGDOM

XII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA

Descriptores de Reactividad Química y Su Aplicación Al Estudio de Tiadiazoles, Tiadiazolinas y Tiadiazolidinas

1999-04-23

ARGENTINA

JORNADAS DE LA CIENCIAS Y LA TECNOLOGÍA DE LA UNLU

Estudio Topológico y Análisis Vibracional de Tiadiazoles Isómeros

1999-06-25

ARGENTINA

JORNADAS DE LA CIENCIA Y LA TECNOLOGÍA DE LA UNLU

Aplicación de Conceptos Derivados de la Teoría del Funcional de la Densidad al Estudio de la Reactividad Química de Tiadiazoles Monóxidos

1999-06-25

ARGENTINA

JORNADAS DE LA CIENCIA Y LA TECNOLOGÍA DE LA UNLU

Cálculos del Funcional de la Densidad Locales y No Locales de la Estructura y Reactividad Química de Tiadiazolinas Isómeras

1999-06-25

ARGENTINA

27EME CONGRES DES CHIMISTES THEORICIENS D'EXPRESSION LATINE

Simulación Computacional de la Estructura y Reactividad Química de los Oligotiadiazoles

2001-09-08

FRANCE

9TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON THE APPLICATIONS OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY IN CHEMISTRY AND PHYSICS

DFT Computational Thermochemistry of Oligothiadiazoles

2001-09-14

SPAIN

ELECTRONIC STRUCTURE AND CHEMICAL REACTIVITY INTERNATIONAL SYMPOSIUM

Computational Simulation of the Molecular Structure of Oligothiadiazoles

2001-09-22

SPAIN

VII INTERNATIONAL CONFERENCE ON ADVANCED MATERIALS

Semiempirical Calculations on Emulsion Polymerization Precursors

VII INTERNATIONAL CONFERENCE ON ADVANCED MATERIALS

A DFT Approach to the Molecular Structure and Nonlinear Optical Properties of Oxydized Thiadiazole Derivatives 2001-08-30

MÉXICO

VII INTERNATIONAL CONFERENCE ON ADVANCED MATERIALS

Nonlinear Optical Properties of Thiadiazole Oligomers

2001-08-30

MÉXICO

VII INTERNATIONAL CONFERENCE ON ADVANCED MATERIALS

A Theoretical Study on the Aromaticity of Thiadiazoles and Related Compounds

2001-08-30

MÉXICO

VII INTERNATIONAL CONFERENCE ON ADVANCED MATERIALS

DFT Computational Thermochemistry of Oligothiadiazoles

2001-08-30

MÉXICO

VII INTERNATIONAL CONFERENCE ON ADVANCED MATERIALS

Computational Simulation of the Molecular Structure and Properties of Oligothiadiazoles

2001-08-30

MÉXICO

SPIE'S 47TH ANNUAL MEETING

Molecular Design of Organic Nonlinear Optics: Dipole Moment, Polarizability and Hyperpolarizabilities of Thiadiazole Oligomers Investigated by Density Functional Theory

2002-07-11

UNITED STATES OF AMERICA

4TH EUROPEAN COMPUTATIONAL CHEMISTRY CONFERENCE

Computational Simulation of the Molecular Structure and Properties of Oligothiadiazoles

2002-09-06

ITALY

ELECTRONIC STRUCTURE: PROPERTIES AND APPLICATIONS

New Materials for Optics and Electronics: DFT Calculations of Oligothiadiazoles

2002-09-13

SPAIN

PRIMERA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Oportunidades en Química Computacional

2002-11-18

MÉXICO

PRIMERA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Simulación Computacional de Moléculas Orgánicas con Posibles Propiedades Inhibidoras de la Corrosión

2002-11-18

PRIMERA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA Construcción de una Supercomputadora Virtual Aplicada a la Química Computacional 2002-11-18 MÉXICO PRIMERA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA Simulación Computacional de la Estructura y Propiedades Moleculares de los Oligotiadiazoles 2002-11-18 MÉXICO XVIII REUNIÓN DE LA SOCIEDAD MEXICANA DE ELECTROQUÍMICA

Simulación Computacional de Compuestos Orgánicos con Posibles Propiedades Inhibidoras de la Corrosión

2003-07-12

MÉXICO

29EME CONGRES DES CHIMISTES THEORICIENS D'EXPRESSION LATINE

Caracterización Molecular Computacional de Flavonoides de Manzana

2003-09-12

MOROCCO

29EME CONGRES DES CHIMISTES THEORICIENS D'EXPRESSION LATINE

Caracterización Molecular Computacional de Inhibidores Orgánicos de Corrosión

2003-09-12

MOROCCO

29EME CONGRES DES CHIMISTES THEORICIENS D'EXPRESSION LATINE

Caracterización Molecular Computacional de Tripanosomicidas Basados en el Anillo Tiadiazólico

2003-09-12

MOROCCO

SEGUNDA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Caracterización Molecular Computacional de Flavonoides de Manzana

2003-11-20

MÉXICO

SEGUNDA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Caracterización Molecular Computacional de Inhibidores Orgánicos de Corrosión

2003-11-20

MÉXICO

SEGUNDA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Caracterización Molecular Computacional de Tripanosimicidas Basados en el Anillo Tiadiazólico

2003-11-20

MÉXICO

XXX CONGRESO INTERNACIONAL DE QUÍMICOS TEÓRICOS DE EXPRESIÓN LATINA

Simulación Computacional de la Estructura y Propiedades Moleculares de Solanina y Solanidina

2004-09-12

PORTUGAL

ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS - ESPA 2004

Computational Simulation of the Molecular Structure and Properties of Solanine and Solanidine

2004-09-17

SPAIN

XVII CONGRESO DE LA SOCIEDAD POLIMÉRICA DE MÉXICO Simulación Computacional de la Estructura y Propiedades Moleculares de los Oligotiadiazoles 2004-09-04 MÉXICO XVII CONGRESO DE LA SOCIEDAD POLIMÉRICA DE MÉXICO Nanofabricación de Sensores Usando Polímeros Estructurados 2004-09-04 MÉXICO XVII CONGRESO DE LA SOCIEDAD POLIMÉRICA DE MÉXICO Caracterización Computacional de la Estructura y Propiedades Moleculares de los Flavonoides Quercetina y (+)-Catequina 2004-09-04 **MÉXICO** TERCERA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA Análisis de la Glicosilación Espontánea del Grupo Amino en Pequeños Péptidos 2004-11-20 MÉXICO TERCERA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA Estudio Computacional de la Estructura y Propiedades Moleculares de los Flavonoides Catequina y Epicatequina 2004-11-20 MÉXICO TERCERA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA Estudio Computacional de la Estructura y Propiedades Moleculares de Híbridos Fullereno-Oligofenilenvinileno 2004-11-20 **MÉXICO**

TERCERA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Estudio CHIH-DFT de la Estructura y Propiedades Moleculares de Solanina y Solanidina

2004-11-20

MÉXICO

TERCERA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Correlación entre Parámetros Químico-Cuánticos y Eficiencia de Inhibición de Corrosión

2004-11-20

MÉXICO

TERCERA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Caracterización Molecular Computacional de la Molécula de Megazol y sus Análogos

2004-11-20

MÉXICO

CUARTA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Estudio de la Estructura y Propiedades Moleculares de la Capsaicina y otros Compuestos Capsicinoides

2005-11-19

MÉXICO

CUARTA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Análisis de la Estructura, Espectro Infrarrojo y Ultravioleta de Isoniacida, Piracinamida y Rifampicina Determinados por

CHIH-DFT

2005-11-19

MÉXICO

CUARTA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Estudio Teórico de la Reactividad de las Moléculas de alfa-Pineno, Canfeno y Limoneno

2005-11-19

MÉXICO

CUARTA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Modelado Molecular de un Biosensor Basado en la Hibridación DNA-DNA para Detectar Mycobacterium Tuberculosis

2005-11-19

MÉXICO

CUARTA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Propiedades Moleculares y Reactividad Química de Cianidina Determinadas Mediante la Química Modelo CHIH(Medium)-DFT

2005-11-19

MÉXICO

CUARTA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Estudio Teórico en Derivados de Imidazolina Empleados como Inhibidores de Corrosión

2005-11-19

MÉXICO

CUARTA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Estudio Teórico de Agentes de Transferencia Empleados para la Polimerización Radicálica por Adición-Fragmentación Reversible, Raft, Simulados a Partir de la Teoría de Funcionales de la Densidad

2005-11-19

MÉXICO

XX REUNIÓN DE LA SOCIEDAD MEXICANA DE ELECTROQUÍMICA

Estudio Teórico de Derivados de Imidazolina Empleados como Inhibidores de Corrosión

2005-05-27

MÉXICO

VI SEADIMB

Modelación Molecular por Computadora en la UACh y el CIMAV

2006-01-20

CUBA

XVIII CONGRESO DE LA SOCIEDAD POLIMÉRICA DE MÉXICO

Simulación Mediante Química Computacional de Agentes de Transferencia RAFT

2005-10-21

MÉXICO

VI CONGRESO INTERNACIONAL EN CIENCIA E INGENIERÍA EN MATERIALES

Nano-Oportunidades en Química Computacional

2006-05-10

MÉXICO

V REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Selectividades para la Separación de Mezclas Hidrógeno-Metano en Materiales Metal-Orgánicos Utilizando Técnicas Grand Canonical Monte Carlo V REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Oportunidades en Química Computacional

2006-11-18

MÉXICO

V REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Simulación Computacional de Efectos Producidos por Sustitución de Grupos Funcionales en 4,9-Difenilantrazolina,

Empleado como Semiconductor Orgánico Tipo N

2006-11-18

MÉXICO

V REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Estudio Computacional de la Estructura y Propiedades Moleculares de Derivados del 1,2,5-Tiadiazol 1,1-Dióxido

2006-11-18

MÉXICO

V REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Estudio Computacional de Mecanismo Antioxidante del Flavonoide Quercetina Basado en su Secuencia de

Desprotonación

2006-11-18

MÉXICO

V REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Comparación de Análisis Teóricos de Antifímicos Contra Experimentales

2006-11-18

MÉXICO

V REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Orden de Reactividad de Agentes de Transferencia Empleados en la Polimerización Via RAFT: Estudio Teórico

2006-11-18

MÉXICO

V REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Estudio Computacional de la Estructura y Propiedades Moleculares de Derivados del C60 de Uso en Nanomedicina

2006-11-18

MÉXICO

XLI CONGRESO MEXICANO DE QUÍMICA

Computational Chemistry of the Structure and Reactivity of Organic Molecular Materials

2006-09-26

MÉXICO

XLI CONGRESO MEXICANO DE QUÍMICA

Cálculos Teóricos de Reactividad en Derivados del Tiadiazol como Posibles Inhibidores de la Corrosión

2006-09-25

MÉXICO

ESPA 2006 - ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS

Computational Study of the Molecular Structure and Properties of Fullerene-Oligophenylenvinylene Hybrids

2006-07-21

PASI 2007 - PAN AMERICAN ADVANCED STUDY INSTITUTE

Electronic Structure of SnO2:Sb by EELS and Ab Initio Calculations

2007-08-17

ARGENTINA

PASI 2007 - PAN AMERICAN ADVANCED STUDY INSTITUTE

DFT and Semiempirical Studies of Functionalized Carbon Nanotubes and Functionalized Fullerenes as Nanovectors for Drug Delivery of Antitubercular Compounds

2007-08-17

MÉXICO

VI REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Estudio Teórico del Mecanismo de Reacción del alfa-Pineno-Canfeno

2007-11-16

MÉXICO

VI REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Estructura Electrónica del SnO2:Sb a través ee EELS y Cálculos Ab Initio

2007-11-16

MÉXICO

VI REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Agentes de Transferencia RAFTt: Estudio Teórico

2007-11-16

MÉXICO

VI REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Determinación Teórica de Espectros Electrónicos en Materiales Fotovoltaicos Orgánicos

2007-11-16

MÉXICO

42 CONGRESO MEXICANO DE QUÍMICA

Caracterización Molecular Computacional de NANOMELFOS

2007-09-26

MÉXICO

42 CONGRESO MEXICANO DE QUÍMICA

Nanotubos y Fullerenos Funcionalizados con Fármacos

2007-09-25

MÉXICO

50 CONGRESO NACIONAL DE FÍSICA

Nano-Oportunidades en Química Computacional

2007-11-02

MÉXICO

NORTH AMERICAN NANOCLUSTER INITIATIVE

Nanostructured Materials for Solar Energy Conversion and Storage

2007-11-24

MÉXICO

REUNIÓN NACIONAL DE SUBDIRECTORES ACADÉMICOS

Maestría en Nanotecnología y Maestría en Comercialización de la Ciencia y la Tecnología 2008-02-21 MÉXICO **3ER VERANO DE LA INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA** Nano-Oportunidades en Química Computacional 2007-07-23 MÉXICO **EUROPEAN FACT FINDING MISSION IN NANOTECHNOLOGY (NANOFORUM)** Nano-Opportunities in Computational Chemistry 2007-08-04 MÉXICO US-MEXICO WORKSHOP ON MATERIALS SCIENCE AND NANOTECHNOLOGY Nanostructured Materials for Solar Energy Conversion and Storage 2008-01-18 **MÉXICO** 3RD MEXICAN WORKSHOP ON NANOSTRUCTURED MATERIALS Estudio Teórico de las Energías de Formación de Carbocationes Presentes en la Isomerización del alfa-Pineno 2008-06-12 MÉXICO

PRIMER ENCUENTRO DE INVESTIGADORES DEL CIMAV

Programa Académico Institucional de Nanotecnología

2008-06-16

MÉXICO

6TH ESPA 2008 - ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS Molecular Modeling of beta-Carotene as a Natural Dye for Dye-Sensitized Solar Cells 2008-06-16

SPAIN

NANOMATERIALS FOR SUSTAINABLE ENERGY FUTURE: ENERGY CONVERSION Molecular Modeling of beta-Carotene as a Natural Dye for Dye-Sensitized Solar Cells 2008-09-23

UNITED STATES OF AMERICA

QUINTO CONGRESO CIMAV

Modelado Molecular en la Caracterización del beta-Caroteno

2008-10-20

MÉXICO

QUINTO CONGRESO CIMAV

Estudio Comparativo de Funcionales en la Descripción Electrónica y Estructural de Ftalocianina Libre Y Algunos De Sus Complejos Metálicos

2008-10-20

MÉXICO

VII REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Estructura Electrónica del ZnO Nanoestructurado y su Aplicación en Celdas Fotovoltaicas

2008-11-13

VII REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Caracterización Molecular del beta-Caroteno

2008-11-13

MÉXICO

VII REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Estudio Comparativo de Funcionales en la Descripción Electrónica y Estructural de Ftalocianina Libre Y Algunos De Sus Complejos Metálicos

2008-11-13

MÉXICO

VII REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Estudio de la Estructura y Propiedades Electrónica en Derivados Pirrólicos y Fullereno, Empleando la Teoría de Funcionales de la Densidad

2008-11-13

MÉXICO

XXXIII SEMANA DE LA QUÍMICA

Estudio Teórico de los Sitios de Reacción en Derivados Pirrólicos

2008-11-21

MÉXICO

PRIMER FORO ESTATAL DE RESULTADOS EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA - FOMIX CHIHUAHUA 2009

Caracterización Molecular Computacional de Materiales para Nanomedicina - Proyecto NANO-TBC

2009-02-20

MÉXICO

14TH EUROPEAN CONGRESS OF BIOTECHNOLOGY

Molecular Modeling of the Melting Temperature of a Tuberculosis DNA Biosensor

2009-09-13

SPAIN

HYBRID AND ORGANICS PHOTOVOLTAICS CONFERENCE - HOPV 2009

Computational Determination of the Molecular Structure and Properties of Nanostructured Materials for Organic **Photovoltaics**

2009-05-10

SPAIN

RED DE NANOCIENCIAS Y NANOTECNOLOGÍA

Nanotecnología en el CIMAV

2009-03-27

MÉXICO

SEMANA DE LA INGENERÍA 2009

Modelado Computacional de Materiales Moleculares y Nanoestructuras para Energías Alternativas y Renovables 2009-07-27

MÉXICO

XV INTERNATIONAL CONFERENCE ON ADVANCED MATERIALS (ICM 2009),

Calculated I-V Curves for Oligoanilines and F-Ope (fluoro-oligo-phenyleneethynylene) Using Non-Equilibrium Green **Function Formalism (NEGF and DFT)**

2009-07-27

XV INTERNATIONAL CONFERENCE ON ADVANCED MATERIALS (ICM 2009)

Theoretical Study of the Electronic Structure In Organic Molecules and the Applications in Photovoltaic Devices,

2009-07-27 **MÉXICO**

XV INTERNATIONAL CONFERENCE ON ADVANCED MATERIALS (ICM 2009)

Thiadiazoles as Organic Photovoltaic Materials: A Theoretical Properties Study,

2009-07-27

MÉXICO

INTERNATIONAL SCHOOL OF HYBRID AND ORGANIC PHOTO- VOLTAICS - ISOPHOS09

Computational Determination of the Molecular Structure and Properties of Nanostructured Materials for Organic Photovoltaics,

2009-07-27

SPAIN

69A JORNADA INFORMATIVA DEL IME: RED DE TALENTOS MEXICANOS EN EL EXTERIOR

Laboratorio Nacional de Nanotecnología en CIMAV

2009-08-14

MÉXICO

65TH SOUTHWEST REGIONAL MEETING OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIET

Computational Study of Electronic Properties in Pirrolic Derivatives and their Applications in Photovoltaic Devices 2009-11-08

UNITED STATES OF AMERICA

2009 AICHE ANNUAL MEETING IN NASHVILLE

Grand Canonical Monte Carlo Simulations of Adsorption Isotherms of Pure and Binary Mixtures of Hydrogen-Methane In MOF-5, MOF-177, IRMOF-11, MOF-14 and MOF-74

2009-11-08

UNITED STATES OF AMERICA

IX CONGRESO INTERNACIONAL DE LA SOCIEDAD MEXICANA DEL HIDRÓGENO

Separacion de Mezclas Equimolares de Hidrogeno y Metano en Materiales Metal-Orgánicos (MOFs) Utilizando Simulacion Molecular

2009-09-21

MÉXICO

NANOMEX 09 - ENCUENTRO INTERNACIONAL E INTERDISCIPLINARIO EN NANOCIENCIA Y NANOTECNOLOGÍA

Theoretical Study of Photoelectronic Properties of Organic Photovoltaic Acceptor-Donor Molecules

2009-11-11

MÉXICO

VII REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Descripción Electrónica y Estructural de TioPc, SnPc Y PbPc, y sus Aductos Con C60: Un Estudio DFT

2009-11-12

MÉXICO

1RA. REUNIÓN.MÉXICO-BRASIL DE NANOTECNOLOGÍA

Nanotecnología en CIMAV y Modelado Molecular y Simulación Computacional de Nanomateriales para Fotovoltaica

Molecular 2009-12-18

1ER CONGRESO NACIONAL DE CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES - 1-CNCIM-2010
Modelación Molecular de Colorantes Funcionales para Celdas Solares Empleando Elementos Finitos
2010-02-15
MÉXICO

IV INTERNATIONAL CONFERENCE ON MOLECULAR MATERIALS - MOLMAT 2010
The Conceptual DFT Perspective in a Computational Study of Low Band-Gap Polymers for Molecular Photovoltaics
2010-05-17
FRANCE

NANOTECH 2010

The Conceptual DFT Perspective in a Computational Study of Low Band-Gap Polymers for Molecular Photovoltaics 2010-05-17

MÉXICO

IX ENCONTRO DA SBPMAT

Nanomaterials for Molecular Photovoltaics: A Conceptual and Computational Study of Low Band-Gap Polymers 2010-07-13

BRAZIL

IX ENCONTRO DA SBPMAT

Nanomaterials for the Energy Challenge

2010-07-13

BRAZIL

IX ENCONTRO DA SBPMAT

Electronic Structure Study Using DFT in Organic Dendrimers with Posible Applications in Photovoltaic Devices 2010-07-13

BRAZIL

IX ENCONTRO DA SBPMAT

Density Functional Theory Study of Convergence In the HOMO-LUMO Gap of Fluorene-Thiadiazole Oligomers 2010-07-13

BRAZIL

XIX INTERNATIONAL MATERIALS RESEARCH CONGRESS

Density Functional Theory Study of Spectroscopic Properties of Chlorophyll a and Analogues Molecules 2010-08-17

MÉXICO

IX REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Química Computacional de Moléculas y Nanomateriales para Nano- y Fotoelectroquímica Solar

2010-11-11

MÉXICO

SOLAR FUELS / PHOTOCHEMISTRY 2010

Nanomaterials for the Energy Challenge

2010-12-02

MÉXICO

INTERNATIONAL SCHOOL OF ORGANIC PHOTOVOLTAICS - ISOPHOS 2010 Molecular Modeling of Nanomaterials for Energy Conversion and Storage

IX REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Estudio Químico Teórico de Oligómeros de Fluorotiadiazoles y su Aplicación en Dispositivos Fotovoltaicos

2010-11-11

MÉXICO

IX REUNION MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Cálculos ab initio de Transporte Electrónico en 4-(3-Nitro-4-Pentafluoro Feniletinil Feniletinil) Bencenotiolato (FNPPB-O)

2010-11-11

MÉXICO

IX REUNION MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Estudio Computacional de Tinte Indigo y Derivados, para su Aplicación en Celdas Solares de Oxido de Zinc

2010-11-11

MÉXICO

IX REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Caracterización Electrónica y Estructural de los Aductos entre C60 y Ftalocianina, Porfirazina, y sus Respectivos Complejos con Mg, Cu y Zn

2010-11-11

MÉXICO

NANO MONTERREY 2010

Molecular Modeling of Nanomaterials for Artificial Photosynthesis

2010-11-19

MÉXICO

PHOTOCHEMISTRY AND SOLAR FUELS - ZING CONFERENCE

Molecular Modeling of Nanomaterials for Artificial Photosynthesis

2010-12-10

MÉXICO

3RD HYBRIDS AND ORGANIC PHOTOVOLTAICS 2011 - HOPV 2011

Nanomaterials for Molecular and Organic Photovoltaics: The Conceptual DFT Perspective

2011-05-18

SPAIN

INTERNATIONAL CONFERENCE NANOSCALE MATERIALS AND DEVICES FOR ENERGY CONVERSION, STORAGE AND BIOSENSORS - NANOENERGY 11

Conceptual DFT Study of Nanomaterials for Molecular and Organic Photovoltaics

2011-04-04

BRAZIL

NINTH TRIENNIAL CONGRESS OF THE WORLD ASSOCIATION OF THEORETICAL AND COMPUTATIONAL CHEMISTS - WATOC 2011

Conceptual DFT Study of Nanomaterials for Molecular and Organic Photovoltaics

2011-07-17

SPAIN

1ER TALLER DE INNOVACIÓN FOTOVOLTAICA Y CARACTERIZACIÓN DE CELDAS SOLARES - LYFYCS 2001 Modelado Molecular de Nanomateriales para Fotovoltaica Molecular

2011-03-10

MÉXICO

PHOTOVOLTAIC TECHNICAL CONFERENCE - PVTC 2011

Theoretical Study of Fluorene-Thiadiazole Oligomers for Photovoltaic Applications

2011-05-26

FRANCE

14TH INTERNATIONAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY CONFERENCE APPLICATIONS IN PHYSICS, CHEMISTRY, BIOLOGY AND PHARMACY - DFT 2011

Nanomaterials for Molecular and Organic Photovoltaics: The Conceptual DFT Perspective

2011-09-01

GREECE

X REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA - X RMFQT

Cálculo de la Densidad de Estados de Nanoalambres de ZnO

2011-11-11

MÉXICO

X REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA - X RMFQT

Simulación Computacional de la Estructura Molecular y Propiedades del Colorante Denominado Dye-7 para su Uso en Energía Fotovoltaica

2011-11-11

MÉXICO

4TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON HYBRID AND ORGANIC PHOTOVOLTAICS

DFT Study of Triphenylamine-Based Dyes For Their Use as Sensitizers In Molecular Photovoltaics

2012-05-10

SWEDEN

1ST INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON NANOSCIENCE AND NANOMATERIALS

Computational Molecular Nanoscience in Mexico: The Nanocosmos Virtual Lab

2012-03-16

MÉXICO

1ST INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON NANOSCIENCE AND NANOMATERIALS

Comparative Computational Characterization of Au4 Cluster on a Single-Wall Nanotube with and without Defects Using ONIOM Method

2012-03-16

MÉXICO

8TH CONGRESS ON ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS - ESPA 2012

Computational Simulations in the NANOCOSMOS Virtual Lab

2012-06-29

SPAIN

VTH INTERNATIONAL CONFERENCE ON MOLECULAR MATERIALS - MOLMAT 2012

Applications of Computational Molecular Nanoscience

2012-07-06

SPAIN

XI REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Estudio Computacional de las Propiedades de Complejos de Cobre para su Uso en Celdas Solares Sensibilizadas por Colorante

2012-11-10

MÉXICO

XI REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Caracterización Computacional de Pigmentos Fotosintéticos Usando DFT

2012-11-10

MÉXICO

XI REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Theoretical Study of the Interaction Between the Conjugated Fluorescein and DABCYL System, Using Fluorescene Quenching Method

2012-11-10

MÉXICO

HYBRID AND ORGANIC PHOTOVOLTAIC CONFERENCE - HOPV 2013

Molecular Design of Copper Complexes as Sensitizers for Efficient Dye-Sensitized Solar Cells

2013-05-08

SPAIN

XXXIX CONGRESO INTERNACIONAL DE QUÍMICOS TEÓRICOS DE EXPRESIÓN LATINA

Comparison of Several Protocols for the Computational Prediction of the Absorption Spectrum of Chrysantemin

2013-07-05

SPAIN

IX REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Química Computacional de Moléculas y Nanomateriales para Nano- y Fotoelectroquímica Solar

2010-11-13

MÉXICO

7MO CONGRESO CIMAV - ENERGÍAS RENOVABLES

Química Computacional para Energías Renovables

2010-10-25

MÉXICO

4TH EUROPEAN SCHOOL ON MOLECULAR NANOSCIENCE - ESMOLNA 2011

Computational Molecular Nanoscience in Mexico: The NANOCOSMOS Virtual Lab

2011-10-28

SPAIN

X REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Diseño Molecular de Nuevos Sensibilizadores Basados en Complejos de Cobre

2013-07-05

MÉXICO

X REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Estudio Teórico de Cumarinas para su Uso en Celdas Solares Sensibilizadas por Colorante

2013-07-05

MÉXICO

MINI-SIMPOSIO DE TOXICOLOGÍA DE NANOPARTÍCULAS

Computational Molecular Nanoscience In Mexico - The NANOCOSMOS Virtual Lab

2014-12-16

XIII REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA Caracterización Computacional de las Propiedades Electrónicas de la Clorofilida beta,9'-Z-Neoxantina y beta-Criptoxantina por DFT 2014-11-08 MÉXICO XIII REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA Caracterización Computacional de las Propiedades Electrónicas de las Clorofilidas a y b por DFT 2014-11-08 MÉXICO XIII REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA Propiedades Estructurales y Eléctricas de las Principales Xantófilas en las Plantas Superiores: Un Análisis Teórico 2014-11-08 **MÉXICO** XIII REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA Caracterización Computacional de Pigmentos Fotosintéticos Empleando DFT 2014-11-08 MÉXICO 4TO CONGRESO INTERINSTITUCIONAL REGIONAL DE FOMENTO A LA INVESTIGACIÓN Efecto del Grupo de Anclaje sobre las Propiedades Ópticas y Electrónicas en Complejos de Cobre para DSSC 2015-03-14 MÉXICO XIII REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA Estudio Comparativo de Complejos de Cobre con Diferentes Grupos de Anclaje y su Aplicación en DSSC 2014-11-08 MÉXICO XIII REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA Derivados Moleculares de Cumarinas para Celdas Solares Sensibilizadas por Colorante. Un Estudio DFT 2014-11-08 MÉXICO INTERNATIONAL CONFERENCE ON SIMULATION OF ORGANIC ELECTRONICS AND PHOTOVOLTAICS Study of the Molecular Properties and the Chemical Reactivity of Coumarin Based Photosensitizers for Dye Sensitized **Solar Cells Using Density Functional Theory** 2014-10-03 **SPAIN** CONGRESS OF THEORETICAL CHEMISTS OF LATION EXPRESSION (CHITEL 2015)

Explicación de la Actividad Catalítica mediante el Uso de la Hiper-Blandura Local: Una Aplicación en Procesos de Polimerización Catalizados por Cationes De Bis(Imino)Piridil de Hierro

2015-07-31

ITALY

CONGRESS OF THEORETICAL CHEMISTS OF LATIN EXPRESSION (CHITEL2015)

Study of the Influence of the pi-Bridge Conjugation Order of Novel Molecular Derivatives of Coumarins for Dye Sensitized Solar Cells Using DFT

2015-07-31

ITALY

EXPOFORO 2015 - "CHIHUAHUA VIVE INNOVANDO" Evaluación Computacional de Cumarinas para Celdas Solares Sensibilizadas al Colorante 2015-10-01 MÉXICO

XIV REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Estudio Teórico del Efecto de Sistemas pi-Conjugados de Tiofeno y Dioxina sobre Propiedades Ópticas, Electrónicas y de Reactividad

2015-11-21

MÉXICO

XIV REUNIÓN MEXICANA DE FÍSICO QUÍMICA TEÓRICA

Diseño Molecular de un Grupo Donador de Electrones Derivado de Trifenilamina con Potencial Aplicación en DSSC 2015-11-21

MÉXICO

XIV REUNIÓN MEXICANA DE FÍSICO QUÍMICA TEÓRICA

Estudio DFT de Propiedades Optoelectrónicas en Sistemas Moleculares Heterocíclicos de Dibenzo[a,c]fenazina y Tiofeno 2015-11-21

MÉXICO

XIV REUNIÓN MEXICANA DE FÍSICO QUÍMICA TEÓRICA

Modelado Molecular de Emisores Orgánicos Basados en Beanzofurano y Fenil-benzofurano

2015-11-21

MÉXICO

II CONGRESO INTERNACIONAL DE CIENCIAS DE LA INGENIERÍA 2015

Estudio DFT sobre las Propiedades Ópticas y Electrónicas en Sensibilizadores para DSSC Utilizando Unidades de Dioxina y Tiofeno

2015-11-20

MÉXICO

II CONGRESO INTERNACIONAL DE CIENCIAS DE LA INGENIERÍA 2015

Evaluación de las Propiedades Opto-Electrónicas de Sistemas Moleculares Basados en Beanzofurano: Un Estudio DFT 2015-11-20

MÉXICO

II CONGRESO INTERNACIONAL DE CIENCIAS DE LA INGENIERÍA 2015

Diseño Molecular de un Grupo Donador de Electrones Derivado de Trifenilamina con Potencial Aplicación en DSSC 2015-11-20

MÉXICO

II CONGRESO INTERNACIONAL DE CIENCIAS DE LA INGENIERÍA 2015

Estudio DFT de Propiedades Optoelectrónicas en Sistemas Moleculares Heterocíclicos de Dibenzo[a,c]fenazina y Tiofeno 2015-11-20

MÉXICO

XIV REUNIÓN MEXICANA DE FÍSICO QUÍMICA TEÓRICA

Estudio de Reactividad Química en Relación a Datos Experimentales de Eficiencia de Colorantes Cumarinas Usados en Celdas Solares Sensibilizadas por Colorante

2015-11-21

MÉXICO

ESPA 2016 - 10TH CONGRESS ON ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS

Computational Prediction of the Preferential Glycation Site of a Model Helical Albumin (HSA) 2016-07-01 SPAIN	al Peptide System Derived from Human Serum
XXV INTERNATIONAL MATERIALS RESEARCH CONGRESS Photocatalytic Properties of TiO2 Nanostructures Sensitized with Delphinid DFT Study 2016-08-19 MÉXICO	lin-3-Glucoside for Hydrogen Generation: A
XXV INTERNATIONAL MATERIALS RESEARCH CONGRESS Excited States of Cyanidin as Dye Sensitizer on Small TiO2 Nanoclusters U 2016-08-19 MÉXICO	sing Density Functional Theory
XV REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA Compuestos Fenólicos como Colorantes Naturales en Celdas Solares Sens 2016-11-19 MÉXICO	sibilizadas con Colorante
INTERNATIONAL CONFERENCE ON NANOMEDICINE AND NANOBIOTECHI Theoretical Reactivity of Cell-Surface Receptors in Presence of Nanodiamo 2016-09-30 FRANCE	
XXV INTERNATIONAL MATERIALS RESEARCH CONGRESS 2016 DFT Calculation of Reactivity Parameters of Cell-Surface Receptors 2016-08-19 MÉXICO	
XII COLOQUIO BIENAL EN CIENCIAS DE MATERIALES 2017 Estudio Químico-Cuántico de Moléculas Derivadas de Piridina y Benzimida 2017-03-10 MÉXICO	zol con Capacidad Inhibidora de Corrosión
XII COLOQUIO BIENAL EN CIENCIAS DE MATERIALES 2017 Diseño Molecular de Colorantes Orgánicos Basados en Acridina con Poten Sensibilizadas por Colorante 2017-03-10 MÉXICO	cial Aplicación en Celdas Solares
4TH NEW TRENDS IN COMPUTATIONAL CHEMISTRY FOR INDUSTRY APP Study of the Influence of the pi-Bridge Conjugation Order of Novel Molecula Solar Cells Using DFT 2015-10-02 SPAIN	
CONFERENCIA INTERNACIONAL NANOENERGÍA	

XXI INTERNATIONAL MATERIALS RESEARCH

2012-09-11 COLOMBIA

Computational Molecular Nanoscience Study of Copper Complexes for Dye-Sensitized Solar Cells

Silver Reactivity with Biological Molecules, A Theoretical Study 2012-08-17 MÉXICO 5TO TALLER IBEROAMERICANO SOBRE EDUCACIÓN EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES Oportunidades en Química Computacional 2006-04-21 **ARGENTINA** V REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA Cálculos ab initio de SnO2:Sb 2006-11-18 MÉXICO PASI 2007 - PAN AMERICAN ADVANCED STUDY INSTITUTE A DFT Study on the Structure and Properties of Oligothiadiazoles 2007-07-11 **ARGENTINA** INTERNATIONAL CONFERENCE ON NANOMEDICINE AND NANOBIOTECHNOLOGY 2017 Chemical Reactivity of the Domain of Union of the Hormonal Receptors with the Tamoxifen and its Different Metabolites 2017-09-27 **SPAIN** 9º CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA MULTIDISCIPLINARIA Análisis de Nuevas Propuestas de Esterificación del Nanodiamante con Tamoxifeno Dirigido a Receptores del Cáncer Mamario 2017-11-17 MÉXICO 9º CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA MULTIDISCIPLINARIA El Modelado Molecular, la Química Computacional y sus Aplicaciones

2047 44 47

2017-11-17 **MÉXICO**

PEPTFE 2018

Computational Molecular Nanoscience in Mexico - The NANOCOSMOS Virtual Lab

2018-03-06

SPAIN

WORKSHOP DRUG DESIGN AND DISCOVERY

Participación

2018-04-12

MÉXICO

ESPA 2018

Computational Prediction of the Chemical Reactivity Properties of the Therapeutic Peptide of Marine Origin Parasin I through the Calculation of Conceptual DFT Descriptors

2018-07-20

SPAIN

ESPA 2018

DFT Study on the Radical Scavenging Activity of Thiamine

2018-07-20

XXVII INTERNATIONAL MATERIALS RESEARCH CONGRESS

Study of Triphenylamine Derived Sensitizers with Azomethine in the Pi Bridge to be Used in DSSC

2018-08-24

MÉXICO

XVIII REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

El Grado de Oxidación de un Modelo de Membrana Celular y la Respuesta en sus Propiedades

2019-10-24

MÉXICO

XVIII REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Modifications of the Molecular Structure of Aurantinidin Dyes for DSSCs

2019-10-24

MÉXICO

#LATINXCHEM TWITTER CONFERENCE 2023

Efecto en la Predicción de una Estructura Plana de un Análogo de Alqueno Estructural a Través de DFT

2023-10-16

MÉXICO

EVALUACIONES

PROGRAMA DE INVERSIÓN EN INVESTIGACIÓN, DESARROLLO TECNOLÓGICO E INNOVACIÓN DEL ESTADO DE MÉXICO

CONACYT | 2009-05-05

Evaluador del Programa de Inversión en Investigación, Desarrollo Tecnológico e Innovación del Estado de México

PROGRAMA INNOVATEC 2010

CONACYT | 2010-01-03

Reconocimiento por la Participación como Evaluador del Programa INNOVATEC 2010

PROGRAMA INNOVATEC 2011

CONACYT | 2011-01-03

Evaluador del Programa INNOVATEC 2011

ESTANCIAS POSTDOCTORALES CONACYT 2010

CONACYT | 2010-01-03

Evaluador de Estancias Postdoctorales CONACYT 2010

PROGRAMA DE COLABORACIÓN CONJUNTA BILATERAL

CONACYT | 2000-12-12

Programa de Colaboración Conjunta Bilateral

PROGRAMA DE ESTÍMULOS FISCALES 2007

CONACYT | 2007-01-16

Evaluador del Programa de Estímulos Fiscales 2007

PROGRAMA DE ESTÍMULOS FISCALES 2008

CONACYT | 2008-01-09

Evaluador del Programa de Estímulos Fiscales 2008

PROGRAMA DE ESTÍMULOS A LA INNOVACIÓN TECNOLÓGICA 2010

CONACYT | 2010-09-07

Evaluador del Programa de Estímulos a la Innovación Tecnológica 2010

PROGRAMA DE ESTÍMULOS A LA INNOVACIÓN TECNOLÓGICA 2011

CONACYT | 2011-08-03

Evaluador del Programa de Estímulos a la Innovación Tecnológica 2011

FONDO MIXTO CONACYT TAMAULIPAS

CONACYT | 2012-02-03

Evaluador del Fondo Mixto CONACYT Tamaulipas

CIENCIA BÁSICA 2012

CONACYT | 2012-03-07

Evaluador del Programa de Ciencia Básica 2012

PROGRAMA DE ESTÍMULOS A LA INVESTIGACIÓN, DESARROLLO TECNOLÓGICO E INNOVACIÓN, CORRESPONDIENTES A SU CONVOCATORIA 2012

CONACYT | 2012-08-04

Evaluador del Programa de Estímulos a la Investigación, Desarrollo Tecnológico e Innovación, correspondientes a su

Convocatoria 2012

FOMIX ZACATECAS

CONACYT | 2012-05-12

Evaluador de Proyectos de la Convocatoria FOMIX Zacatecas

CIENCIA BÁSICA 2014

CONACYT | 2014-10-04

Evaluador de Proyectos en la Convocatoria de Ciencia Básica 2014

FRONTERAS DE LA CIENCIA 2016

CONACYT | 2016-02-04

Evaluador de Proyectos en el Programa Fronteras de la Ciencia 2016

CIENCIA BÁSICA 2015

CONACYT | 2015-09-04

Evaluador de Proyectos de la Convocatoria Ciencia Básica 2015

CÁTEDRAS CONACYT 2017

CONACYT | 2017-03-03

Evaluador en la Convocatoria de Cátedras CONACYT 2017

CÁTEDRAS CONACYT 2016

CONACYT | 2016-03-01

Evaluador en la Convocatoria de Cátedras CONACYT 2016

CIENCIA BÁSICA 2008

CONACYT | 2008-04-02

Evaluador de Proyectos de la Convocatoria 2008 de Ciencia Básica de CONACYT

PROGRAMA DE ESTÍMULOS FISCALES 2009

CONACYT | 2009-07-27

Evaluador del Programa de Estímulos Fiscales 2009

BECAS CRÉDITO AL EXTRANJERO

CONACYT | 2003-07-01

Participación en el Comité Académico de Evaluación de Aspirantes a Becas Crédito en el Extranjero

CONACYT - C0003-2012-01

CONACYT | 2013-01-23

Evaluación de Proyecto de la Convocatoria CONACYT - C0003-2012-01 - "Pruebas de fatiga torsional para apoyar el desarrollo de un dispositivo de protección de sobre- torque"

CONACYT - C0003-2012-01

CONACYT | 2013-01-22

Evaluación de Proyecto de la Convocatoria CONACYT - C0003-2012-01 - INNOVACION Y DESARROLLO EN MEXICO PARA EL USO DE TUBO DOBLADO EN CONDENSADORES PARA MEJORAR EFICIENCIA EN SISTEMAS CLIMATICOS INDUSTRIALES, RESIDENCIALES Y AUTOMOTRICES

CONACYT - C0003-2012-01

CONACYT | 2013-01-22

Evaluación de Proyecto de la Convocatoria CONACYT - C0003-2012-01 - DISEN¿O Y DESARROLLO NUEVOS PRODUCTOS DE PARTES Y COMPONENTES DE ASIENTOS PARA LA INDUSTRIA AUTOMOTRIZ

CONACYT - C0003-2012-01

CONACYT | 2013-01-22

Evaluación de Proyecto de la Convocatoria CONACYT - C0003-2012-01 - Desarrollo e implementacio¿n de un proceso piloto de ana¿lisis, validacio¿n y control del comportamiento molecular de poli¿meros en un sistema innovador de proteccio¿n contra hielo para aeronaves

CONACYT - C0003-2012-01

CONACYT | 2013-01-22

Evaluación de Proyecto de la Convocatoria CONACYT - C0003-2012-01 - DISEN¿O Y DESARROLLO DE PIEZAS ESTRUCTURALES PARA PLATAFORMA DEL CHASIS DEL BR205 PARA LA INDUSTRIA AUTOMOTRIZ

CONACYT - C0003-2012-01

CONACYT | 2013-01-22

Evaluación de Proyecto de la Convocatoria CONACYT - C0003-2012-01 - DISEN¿O Y DESARROLLO DE MONOBLOCK Y CARCAZA INFERIOR PARA ENSAMBLE DE MOTORES DE VEHICULOS DEPORTIVOS DE ALTO DESEMPEN¿O

CONACYT - C0003-2012-01

CONACYT | 2013-01-22

Evaluación de Proyecto de la Convocatoria CONACYT - C0003-2012-01 - Disenço y desarrollo de prototipos innovadores en procesos de pintura y de pulido de alto desempenço para diferentes componentes estructurales de la industria aeroespacial

CONACYT - C0003-2012-01

CONACYT | 2013-01-22

Evaluación de Proyecto de la Convocatoria CONACYT - C0003-2012-01 - DISEN¿O Y DESARROLLO DE TAPA ECOTEC MY2013 PARA MOTORES DE ALTO DESEMPEN¿O

CONACYT - FONDO 10017 - CB- 2012-01

CONACYT | 2013-01-22

Evaluación de Proyecto de la Convocatoria CONACYT - Fondo 10017 - CB- 2012-01 - Descripcio¿n hi¿brida ab initio / mesosco¿pica de la primera etapa de captacio¿n foto¿nica y transferencia electro¿nica en el proceso de fotosi¿ntesis, empleando el complejo Fenna-Matthews- Olson (FMO) como sistema modelo

CONACYT - I0017 - CB-2012-01

CONACYT | 2013-01-22

Evaluación de Proyecto de la Convocatoria CONACYT - I0017 - CB-2012-01 - SI¿NTESIS DE MONOLIGNOLES Y MODELADO

QUI¿MICO COMPUTACIONAL DE SU POLIMERIZACIO¿N EN LA FORMACIO¿N DE LIGNINAS

CONACYT - M002 - M0021-2011-35

CONACYT | 2013-01-22

Evaluación de Proyecto de la Convocatoria CONACYT - M002 - M0021-2011-35

CONACYT - FONDO MIXTO DEL GOBIERNO DE TAMAULIPAS - 2011-C34

CONACYT | 2012-02-08

Evaluación de Proyecto de la Convocatoria CONACYT - Fondo Mixto del Gobierno de Tamaulipas - 2011-C34 - Proyecto 176222

CONACYT - ESTANCIAS POSTDOCTORALES NACIONALES 2014(3)

CONACYT | 2014-09-01

Evaluación de Aspirante en la Convocatoria CONACYT - Estancias Postdoctorales Nacionales 2014(3)

CONVOCATORIA PARA LA FORMACIO¿N DE RECURSOS HUMANOS DE ALTO NIVEL EN PROGRAMAS DE POSGRADO DE CALIDAD EN EL EXTRANJERO 2015 SEGUNDO PERIODO

CONACYT | 2015-10-13

Participación como Evaluador de la Convocatoria para la Formacio¿n de Recursos Humanos de Alto Nivel en Programas de Posgrado de Calidad en el Extranjero 2015 Segundo Periodo

CONVOCATORIA PARA LA FORMACIO¿N DE RECURSOS HUMANOS DE ALTO NIVEL EN PROGRAMAS DE POSGRADO DE CALIDAD EN EL EXTRANJERO 2015 PRIMER PERIODO.

CONACYT | 2015-06-05

Participación como Evaluador de la Convocatoria para la Formacio¿n de Recursos Humanos de Alto Nivel en Programas de Posgrado de Calidad en el Extranjero 2015 Primer Periodo.

CONVOCATORIA CIAM COLABORACIO¿N LNTER AMERICANA EN MATERIALES 2002

CONACYT | 2002-01-23

Evaluación de Proyecto sometido a la Convocatoria CIAM Colaboracio; n Inter Americana en Materiales 2002

CONVOCATORIA 2017 DE PROYECTOS DE CÁTEDRAS CONACYT PARA JÓVENES INVESTIGADORES

CONACYT | 2017-04-20

Participación como Evaluador en la Convocatoria 2017 de Proyectos de Cátedras CONACYT para Jóvenes Investigadores

CONVOCATORIA DE PROYECTOS DE COOPERACIO¿N INTERNACIONAL BILATERAL

CONACYT | 2007-10-16

Evaluación de Proyecto dentro de la Convocatoria de Proyectos de Cooperacio¿n Internacional Bilateral - Clave: FRA132-V2007

PROGRAMA DE ESTÍMULOS A LA INNOVACIÓN TECNOLÓGICA 2012

CONACYT | 2012-08-10

Evaluación de Proyectos sometidos a la Convocatoria del Programa de Estímulos a la Innovación Tecnológica 2012

CONVOCATORIA DE ESTANCIAS POSDOCTORALES VINCULADAS AL FORTALECIMIENTO DE LA CALIDAD DEL POSGRADONACIONAL - 2010 (2)

CONACYT | 2010-06-12

Evaluación de postulantes presentados a la Convocatoria de Estancias Posdoctorales Vinculadas al Fortalecimiento de la Calidad del PosgradoNacional - 2010 (2)

CONVOCATORIA DE INVESTIGACIO¿N CIENTI¿FICA BA¿SICA 2005

CONACYT | 2006-02-16

Evaluación de Proyecto sometido a la Convocatoria de Investigacio¿n Cienti¿fica Ba¿sica 2005 - Proyecto 51130-F

CONVOCATORIA DE INVESTIGACIO¿N CIENTIFÍCA BA¿SICA 2005

CONACYT | 2006-02-16

Evaluación de Proyecto sometido a la Convocatoria de Investigacio¿n Científica Ba¿sica 2005 - Proyecto51459-Q

CONVOCATORIA DE ESTANCIAS POSTDOCTORALES 2013 (1)

CONACYT | 2013-04-04

Evaluación de Postulantes presentados a la Convocatoria de Estancias Postdoctorales 2013 (1)

FONDO: 10003 CONVOCATORIA: CB-2007-01

CONACYT | 2008-04-04

Evaluación de Proyecto sometido a la Convocatoria del Fondo: 10003 Convocatoria: CB-2007-01 - Solicitud 49794

FONDO: 10003 CONVOCATORIA: CB-2007-01

CONACYT | 2008-04-04

Evaluación de Proyecto sometido a la Convocatoria del Fondo: 10003 Convocatoria: CB-2007-01 - Solicitud 84535

CONTEX - COLLABORATIVE RESEARCH PROPOSALS

CONACYT | 2018-04-17

A Novel Quantum Biology Mechanism of Lipid Chiral Repair UTEP and UACh

CONVOCATORIA DE INVESTIGACIO¿N EN FRONTERAS DE LA CIENCIA 2016

CONACYT | 2017-02-02

Evaluación de Proyectos dentro de la Convocatoria de Investigacio¿n en Fronteras de la Ciencia 2016

CONVOCATORIA DE CA¿TEDRAS CONACYT 2017

CONACYT | 2017-04-06

Evaluación de Proyectos dentro de la Convocatoria de Ca¿tedras CONACYT 2017

FSSEP02--C-2018--1--28 DEL FONDO SECTORIAL FOSEC SEP -INVESTIGACIÓN BÁSICA DE CONACYT

CONACYT | 2018-07-30

Proyecto: Cálculo del Mecanismo de Transferencia Excitónica entre Pigmentos Fotosintéticos en Sistemas Naturales y Artificiales

BECAS CONACYT- REGIONAL CENTRO 2019 - 1

CONACYT | 2019-08-20

Evaluador en el Proceso de Selección de los Candidatos a Cursar Estudios de Posgrado en el Marco de la Convocatoria Becas

CONACYT-Regional Centro 2019 - 1

2019 UC MEXUS-CONACYT REVIEW COMMITTEE

CONACYT | 2019-06-20

2019 UC MEXUS-CONACYT Review Committee for our annual postdoctoral research fellowship and collaborative grant

competitions.

CIENCIA DE FRONTERA 2019

CONACYT | 2020-02-28

Evaluación del Proyecto presentado en la Convocatoria de Ciencia de Frontera 2019 con título: Diseño y Obtención de un

Nanobiosensor para el Diagnóstico de Lesiones Producidas por el Virus del Papiloma Humano (VPH)

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ

OTROS | Evaluador | 2012-11-08 - 2012-11-10

Premio Nacional UASLP

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE SAN LUIS POTOSI

OTROS | Evaluador | 2012-11-09 - 2012-11-10

Premio Universitario UASLP

AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

OTROS | Evaluador | 2011-01-02 - 2012-01-01

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA
OTROS | Evaluador | 2009-09-07 - 2009-09-11

Evaluador XXXIV Semana de Química de la UACH

CONSEJO NACIONAL DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA

OTROS | Evaluador | 2011-01-02 - 2012-01-01

Programa INNOVATEC 2011

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

OTROS | Evaluador | 2008-03-02 - 2008-03-25

Proyectos UBA

COMISIÓN NACIONAL DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y TECNOLÓGICA

OTROS | Evaluador | 2012-05-05 - 2012-05-09

FONDECYT Regular 2013

CONICET

OTROS | Evaluador | 2013-11-02 - 2013-11-05

FONCYT 2013

ELSEVIER

OTROS | Evaluador | 2000-09-27 - 2000-09-27

Crystal Structures of Copper (II) and Complexes of 2-formylpyridine substituted thiosemicarbazones; the first example of a

coordinated thiosemicarbazone with a thiol function

ELSEVIER

OTROS | Evaluador | 2000-01-27 - 2000-01-27

A Comparative Study of the Stereochemistry of 4-acetyl-, formyl- and carboxy-benzo-9-crown-3 ether via X-ray Crystallography

and Solid State and Solution NMR Spectroscopy

ELSEVIER

OTROS | Evaluador | 2000-11-07 - 2000-11-07

Structural Study of Two N(3)-Substituted Thiosemicarbazide Copper(II) Complexes

ELSEVIER

OTROS | Evaluador | 2001-01-17 - 2001-01-18

Conformational Analysis of 3,3-disubstituted benzoylthioureas using X-ray diffraction and ab initio calculations

JOHN WILEY & SONS

OTROS | Evaluador | 2001-09-13 - 2001-09-13

Manuscript Reference #: D 01-28

JOHN WILEY & SONS

OTROS | Evaluador | 2005-02-04 - 2005-02-04

JPOC - Journal of Physical Organic Chemistry

ELSEVIER

OTROS | Evaluador | 2005-07-22 - 2005-07-22

THEOCHEM-D-05-00136

SCIENTIFIC RESEARCH PUBLISHING

OTROS | Evaluador | 2006-12-13 - 2006-12-13

ACADEMIA.EDU

OTROS | Evaluador | 2012-11-06 - 2012-11-06 African Journal of Pharmacy and Pharmacology - AJPP-12-1095

STEACIE INSTITUTE FOR MOLECULAR SCIENCES, NRC-CNRC

Evaluador | 2012-09-17 - 2012-09-17 Theoretical investigation for the designing of novel antioxidants

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE AGUASCALIENTES OTROS | Evaluador | 2012-09-07 - 2012-09-07 Fotosíntesis Artificial en Celdas Solares Sensibilizadas con un Colorante Natural **TAYLOR & FRANCIS GROUP** OTROS | Evaluador | 2012-06-18 - 2012-06-18 QSAR of Phytochemicals for the Design of Better Drugs SOCIEDAD QUÍMICA DE MÉXICO, A.C. OTROS | Evaluador | 2012-08-01 - 2012-08-01 A Density Functional Theoretical Studies on the Boroles Dianion: Structure, Properties and Aromaticity **TAYLOR & FRANCIS GROUP** OTROS | Evaluador | 2012-05-20 - 2012-05-20 Effects of Contact and Local Structural Defects on the Electron transport in Single wall Carbon nanotube - Metal electrodes **HINDAWI PUBLISHING COMPANY** OTROS | Evaluador | 2013-01-26 - 2013-01-26 Experimental and Theoretical Investigations of Spiro Heterocyclic Compound as Inhibitor for Mild Steel Corrosion in 1M Hcl and 0.5 M H2So4 SPRINGERLINK OTROS | Evaluador 2012-12-14 - 2012-12-14 Adsorption and Dissociation of H2S on ZnO Nanocluster SOCIEDAD QUÍMICA DE MÉXICO, A.C. OTROS | Evaluador | 2012-01-17 - 2012-01-18 An Assessment of the Validity of the Maximum Hardness Principle in Chemical Reactions SOCIEDAD QUÍMICA DE MÉXICO, A.C. OTROS | Evaluador | 2012-08-01 - 2012-08-01 JMCS - Clave JMCS12070 **SPRINGERLINK** OTROS | Evaluador | 2013-01-26 - 2013-01-26 Journal of Molecular Modeling - JMMO-D-12-03605 **SPRINGERLINK** OTROS | Evaluador | 2013-01-27 - 2013-01-27 Journal of Molecular Modeling - JMMO2976 SPRINGERLINK OTROS | Evaluador | 2013-01-27 - 2013-01-27 Journal of Molecular Modeling - JMMO3040 SPRINGERLINK OTROS | Evaluador | 2013-01-27 - 2013-01-27 Journal of Materials Science - JMSC27828 MOROCCO OTROS | Evaluador 2013-01-27 - 2013-01-27

Mediterranean Journal of Chemistry - MJC-P-0120318171139-Dguigui

SPRINGERLINK OTROS Evaluador 2013-01-27 - 2013-01-27 Molecular Diversity - MODI-D-12-00043	
SPRINGERLINK OTROS Evaluador 2013-01-27 - 2013-01-27 Molecular Diversity - MODI-D-12-00088	
ADDIS ABABA UNIVERSITY OTROS Evaluador 2012-08-10 - 2012-08-10 Bulletin of the Chemical Society of Ethiopia - PH1957	
ELSEVIER OTROS Evaluador 2013-01-27 - 2013-01-27 Polymer - Ms. No. POLYMER-12-1042	
ELSEVIER OTROS Evaluador 2013-01-27 - 2013-01-27 Polymer - Ms. No. POLYMER-12-1260	
ELSEVIER OTROS Evaluador 2013-01-27 - 2013-01-27 Polymer - Ms. No. POLYMER-12-1892	
JOHN WILEY & SONS OTROS Evaluador 2012-02-14 - 2012-02-14 International Journal of Quantum Chemistry - QUA-2012-0084	
ELSEVIER OTROS Evaluador 2013-01-27 - 2013-01-27 Spectrochimica Acta Part A - Ms. Ref. No.: SAA-D-12-01637	
JOHN WILEY & SONS OTROS Evaluador 2011-12-18 - 2011-12-18 International Journal of Quantum Chemistry - IJQC Reference No D 01-28	
INDIAN INSTITUTE OF TECHNOLOGY, KHARAGPUR OTROS Evaluador 2013-03-06 - 2013-03-06 Synthesis, characterizations, molecular structure and DFT studies of 4-benzylidene-2-(pyrazol-3-one	2-chloro-phenyl)-5-methyl-2,4-dihydro-
BRITISH MEDICAL JOURNAL OTROS Evaluador 2013-05-10 - 2013-05-10 British Journal of Applied Science & Technology - 2013-BJAST-4232	
THE SCIENCE ADVISORY BOARD OTROS Evaluador 2013-08-10 - 2013-08-10 British Journal of Pharmaceutical Research - MS: 2013_BJPR_6178	
THE SCIENCE ADVISORY BOARD OTROS Evaluador 2013-07-31 - 2013-07-31 Journal of Scientific Research and Reports - MS: 2013_JSRR_5870	
ELSEVIER OTROS Evaluador 2013-03-20 - 2013-03-20	

Arabian Journal of Chemistry - ARABJC-D-12-01122 **BENTHAM SCIENCE PUBLISHERS** OTROS | Evaluador | 2013-10-29 - 2013-10-29 Computational Chemistry for Photosensitizer Design and Investigation of DNA Damage **BENTHAM SCIENCE PUBLISHERS** OTROS | Evaluador | 2013-02-04 - 2013-02-04 Pharmacophore Mapping and High Throughput Screening in Drug Discovery **ELSEVIER** OTROS Evaluador | 2013-03-30 - 2013-03-30 Dyes and Pigments - Ms. Ref. No.: DYPI-D-13-00174 **SPRINGERLINK** OTROS | Evaluador 2013-01-28 - 2013-01-28 Journal of Molecular Modeling - JMMO-D-12-03605R1 **ELSEVIER** OTROS | Evaluador | 2013-07-31 - 2013-07-31 Tetrahedron - Ms. Ref. No.: TET-D-13-01242 **ELSEVIER** | Evaluador OTROS 2014-01-04 - 2014-01-04 Tetrahedron - TET-D-13-02072 **SPRINGERLINK** OTROS | Evaluador | 2013-05-30 - 2013-05-30 Journal of Molecular Modeling - JMMO-D-13-00339 **SPRINGERLINK** OTROS | Evaluador 1 2013-08-20 - 2013-08-20 Journal of Molecular Modeling - JMMO-D-13-00488 **SPRINGERLINK** OTROS | Evaluador 2013-09-19 - 2013-09-19 Journal of Molecular Modeling - JMMO-D-13-00644 **ELSEVIER** OTROS | Evaluador 2013-02-17 - 2013-02-17 Journal of Molecular Structure - Ms. Ref. No.: L02-40-13 **ELSEVIER** 2013-02-04 - 2013-02-04 OTROS Evaluador Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry - Ref.: Ms. No. JPHOTOCHEM-D-13-00027 **AMERICAN CHEMICAL SOCIETY** 2013-01-29 - 2013-01-29 OTROS | Evaluador | The Journal of Physical Chemistry - Manuscript jp-2012-12834n **AMERICAN CHEMICAL SOCIETY PUBLICATIONS** OTROS | Evaluador | 2013-02-10 - 2013-02-10

The Journal of Physical Chemistry - Manuscript jp-2013-00849x

AMERICAN CHEMICAL SOCIETY PUBLICATIONS OTROS | Evaluador | 2013-01-16 - 2013-01-16 The Journal of Physical Chemistry - Manuscript jp-2013-002687 **AMERICAN CHEMICAL SOCIETY PUBLICATIONS** OTROS | Evaluador | 2013-06-03 - 2013-06-03 The Journal of Physical Chemistry - Manuscript jp-2013-05317f **HINDAWI PUBLISHING COMPANY** OTROS | Evaluador | 2013-06-14 - 2013-06-14 Structures and Stabilities of Alkaline Earth Metal Oxide Nanoclusters: A DFT Study HINDAWI PUBLISHING COMPANY OTROS | Evaluador | 2013-06-28 - 2013-06-28 Vibrational Spectra and Electronic Structural Studies of Some Coumarins SCIENCEDOMAIN INTERNATIONAL OTROS | Evaluador | 2013-08-22 - 2013-08-22 Journal of Simulation Research and Reports - MS-2013-JSRR-5870 UNIVERSITY OF TEHRAN 2013-03-08 - 2013-03-08 OTROS | Evaluador Progress in Color, Colorants and Coatings Journal - PCCC-03-03-2013-229 **JOHN WILEY & SONS** OTROS | Evaluador | 2013-01-29 - 2013-01-29 International Journal of Quantum Chemistry - Manuscript # QUA-2013-0008.R1 **ELSEVIER** Evaluador | 2013-03-30 - 2013-03-30 OTROS | Spectrochimica Acta Part A - Ms. Ref. No.: SAA-D-13-00494 ELSEVIER OTROS | Evaluador | 2013-10-14 - 2013-10-14 Spectrochimica Acta Part A - Manuscript Number: SAA-D-13-01964 ELSEVIER OTROS | Evaluador | 2013-05-27 - 2013-05-27 Synthetic Methals - Ms. Ref. No.: SYNMET-D-13-00276 **ENGINEERING CONFERENCES INTERNATIONAL** OTROS | Evlauador | 2013-04-19 - 2013-04-19 The Relationship between Used Information Technologies and Efficiency Learning in Smart Schools Based on Academic Motivation (Case Study; Smart Schools` teachers of Esfahan-Iran) **ENGINEERING CONFERENCES INTERNATIONAL** OTROS | Evaluador | 2013-04-16 - 2013-04-16 Corrosion Resistance of New Ti-20Zr bioalloy in physiological electrolytes **ENGINEERING CONFERENCES INTERNATIONAL** OTROS | Evaluador | 2013-04-17 - 2013-04-17 Electrodeposition, Characterization and Corrosion Stability of Nanostructured Anodic Oxides on New Ti-15Zr-5Nb Alloy Surface SCIENCEDOMAIN INTERNATIONAL OTROS | Evaluador | 2013-05-30 - 2013-05-30

Electrochemical Studies of Cinnoline -4(3H)-one reaction in Water by Density Functional Theory
INIVERSITY OF TEHRAN OTROS Evaluador 2013-05-03 - 2013-05-03 Synthesis and Application of Two Organic Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells
BHABHA ATOMIC RESEARCH CENTRE, LASER AND PLASMA TECHNOLOGY DIVISION DTROS Evaluador 2013-07-28 - 2013-07-28 Indian Journal of Pure & Applied Physics (IJPAP) - Article Id:IJPAP-661
SINGINEERING CONFERENCES INTERNATIONAL OTROS Evaluador 2013-04-12 - 2013-04-12 Classification of Phyto-pathogens Using Infrared Spectroscopy and advanced computerized methods
OTROS Evaluador 2013-08-22 - 2013-08-22 ournal of Scientific Research and Reports - MS: 2013_JSRR_5870
RONTIERS MEDIA S.A OTROS Evaluador 2018-01-20 - 2018-01-21 unticorrosive Effects of Some Thiophene Derivatives Against the Corrosion of Iron: A Computational Stud
SENTHAM SCIENCE PUBLISHERS OTROS Evaluador 2018-01-21 - 2018-01-21 Computer Aided Design of non-Toxic Antibacterial Peptides
BILKENT UNIVERSITY OTROS Evaluador 2018-01-20 - 2018-01-21 Determination of The Best Method (HF, MP2 and B3LYP) in Calculation of Chemical Hardness
CIENCEDOMAIN INTERNATIONAL OTROS Evaluador 2017-10-16 - 2017-10-16 International Research Journal of Pure and Applied Chemistry - Ms_IRJPAC_37402
ELSEVIER DTROS Evaluador 2015-02-03 - 2015-02-03 Chemical Physics - Ms. No.: CHEMPHYS-D-15-00044
ELSEVIER DTROS Evaluador 2015-03-03 - 2015-03-03 Chemical Physics - Ref: CHEMPHYS-D-15-00044R1
INIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO (UNAM) OTROS Evaluador 2015-10-05 - 2015-10-05 a Fotosíntesis Artificial, Una Alternativa para la Producción de Combustibles
CIENCEDOMAIN INTERNATIONAL OTROS Evaluador 2013-02-03 - 2013-02-03 Assessing the Performance of 3D Pharmacophore methods in Virtual Screening: How good are they?
BENTHAM SCIENCE PUBLISHERS DTROS Evaluador 2013-11-05 - 2013-11-05 Computational Chemistry for Photosensitizer Design and Investigation of DNA Damage

TAYLOR & FRANCIS GROUP OTROS | Evaluador | 2015-03-13 - 2015-03-14 Expert Opinion On Drug Discovery - Manuscript ID EODC-2015-0043 **BENTHAM SCIENCE PUBLISHERS** OTROS | Evaluador | 2015-11-24 - 2015-11-24 Combinatorial Chemistry & High Throughput Screening - Reference#: BSP-CCHTS-2015-426 SPRINGERLINK 2015-04-20 - 2015-04-20 OTROS | Evaluador | Molecular Diversity - MODI-D-15-00012R3 SPRINGERLINK OTROS | Evaluador | 2017-06-22 - 2017-06-22 Molecular Diversity - MODI-D-17-00076 HINDAWI PUBLISHING COMPANY OTROS | Evaluador | 2015-04-07 - 2015-04-07 Journal of Chemistry - Research Article 964252 ENDEAVOR GLOBAL OTROS | Evaluador | 2017-08-04 - 2017-08-04 QSAR Study of 9--chloro--11H--indeno[1,2-c]quinolin--11--one Derivatives (tetracyclic azafluorenone) derivatives with topoisomerase linhibitory properties FRONTIERS MEDIA S.A OTROS | Evaluador | 2017-09-29 - 2017-09-29 Experimental and Theoretical Studies on some Tetrafluoroborate Imidazolium- Based Ionic Liquids as Corrosion Inhibitors for Mild Steel in 1.0M HCI SOCIEDAD QUÍMICA DE MÉXICO, A.C. OTROS | Evaluador | 2017-01-31 - 2017-01-31 Journal of the Mexican Chemical Society - Manuscript ID: JMCS17004 UNIVERSITY OF TEHRAN OTROS | Evaluador 2015-07-07 - 2015-07-07 Physical Chemistry Research - Manuscript ID: PCR-1505-1156 (R1) **SPRINGERLINK** 2016-12-15 - 2016-12-15 OTROS | Evaluador Theoretical Chemistry Accounts - Ref.: Ms. No. TCAC-D-16-00409 **SPRINGERLINK** OTROS | Evaluador | 2017-02-04 - 2017-02-05 Theoretical Chemistry Accounts - Ref.: Ms. No. TCAC-D-16-00409R1 **SPRINGERLINK** OTROS | Evaluador | 2015-04-09 - 2015-04-09 Journal of Materials Science - JMSC-D-15-01596 **AMERICAN CHEMICAL SOCIETY PUBLICATIONS** OTROS Evaluador | 2015-05-22 - 2015-05-22 The Journal of Physical Chemistry - Manuscript jp-2015-03918d

AMERICAN CHEMICAL SOCIETY PUBLICATIONS

OTROS Evaluador 2015-06-27 - 2015-06-27 The Journal of Physical Chemistry - Manuscript jp-2015-05745h
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY PUBLICATIONS OTROS Evaluador 2015-08-04 - 2015-08-04 The Journal of Physical Chemistry - Manuscript jp-2015-07097u
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY PUBLICATIONS OTROS Evaluador 2016-12-14 - 2016-12-15 The Journal of Physical Chemistry - Manuscript jp-2016-122325
TAYLOR & FRANCIS GROUP OTROS Evaluador 2017-06-12 - 2017-06-12 Solar Cells from Natural Dyes: A Comparative Study
JOHN WILEY & SONS OTROS Evaluador 2016-12-14 - 2016-12-15 International Journal of Quantum Chemistry - Manuscript # QUA-2016-0444
JOHN WILEY & SONS OTROS Evaluador 2017-07-18 - 2017-07-18 International Journal of Quantum Chemistry - Manuscript # QUA-2017-0270
JOHN WILEY & SONS OTROS Evaluador 2017-10-28 - 2017-10-28 International Journal of Quantum Chemistry - Manuscript # QUA-2017-0436
ELSEVIER OTROS Evaluador 2015-05-16 - 2015-05-16 Arabian Journal of Chemistry - ARABJC-D-15-00840
JOHN WILEY & SONS OTROS Evaluador 2016-02-11 - 2016-02-12 Chemistry - A European Journal - Ref.: Ms. No. chem.201600623
ELSEVIER OTROS Evaluador 2015-07-16 - 2015-07-16 Computational and Theoretical Chemistry - Ms. Ref. No.: COMPTC-D-15-00401
ELSEVIER OTROS Evaluador 2015-04-20 - 2015-04-20 Journal of Molecular Graphics and Modelling - Ms. Ref. No.: JMGM-D-15-00146
ELSEVIER OTROS Evaluador 2015-08-14 - 2015-08-14 Journal of Molecular Graphics and Modelling - Ms. Ref. No.: JMGM-D-15-00247R1
ELSEVIER OTROS Evaluador 2016-02-22 - 2016-02-23 Journal of Molecular Structure - Ms. Ref. No. MOLSTRUC-D-16-00306
ELSEVIER OTROS Evaluador 2015-04-20 - 2015-04-20 Polymer - Ref.: Ms. No. POLYMER-15-652

ELSEVIER OTROS | Evaluador | 2017-10-16 - 2017-10-16 Spectrochimica Acta Part A - Ms. Ref. No.: SAA-D-17-02379 **ELSEVIER** OTROS | Evaluador 2015-08-04 - 2015-08-04 Solar Energy Materials and Solar Cells - Ms. Ref. No.: SOLMAT-D-15-00988 **ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY** OTROS | Evaluador | 2015-10-05 - 2015-10-05 Physical Chemistry Chemical Physics - CP-ART-08-2015-005197 ELSEVIER OTROS | Evaluador | 2015-08-13 - 2015-08-13 Polyhedron - Ms. Ref. No.: POLY-D-15-00582 **ELSEVIER** OTROS | Evaluador | 2016-02-29 - 2016-02-29 Polyhedron - Ms. Ref. No.: POLY-D-16-00171 **SPRINGERLINK** OTROS | Evaluador | 2015-05-04 - 2015-05-04 Journal of Molecular Modeling - JMMO-D-15-00233 THE AMERICAN SOCIETY OF MECHANICAL ENGINEERS OTROS | Evaluador | 2015-04-07 - 2015-04-07 Performance Comparison of Different Battery -Electric Vehicles Participating within an Electro- Rally in Middle-Europe **SPRINGERLINK** OTROS | Evaluador | 2015-03-02 - 2015-03-02 Journal of Computer Aided Molecular Design (JCAM) - JCAM-D-15-00033 SOCIEDAD QUÍMICA DE MÉXICO, A.C. OTROS | Evaluador | 2014-07-15 - 2014-07-15 Journal of the Mexican Chemical Society - Ms. JMCS14108 ELSEVIER OTROS | Evaluador 2015-01-14 - 2015-01-15 Journal of Molecular Graphics and Modelling - Ms. Ref. No.: JMGM-D-15-00003 **SPRINGERLINK** OTROS | Evaluador | 2014-07-29 - 2014-07-29 Journal of Molecular Modeling - JMMO-D-14-00598 **AMERICAN CHEMICAL SOCIETY PUBLICATIONS** OTROS | Evaluador | 2014-02-02 - 2014-02-02 The Journal of Physical Chemistry - Manuscript jp-2014-01023b, **AMERICAN CHEMICAL SOCIETY PUBLICATIONS** OTROS | Evaluador | 2014-05-01 - 2014-05-01 The Journal of Physical Chemistry - Manuscript jp-2014-04096d

OTROS Evaluador 2014-05-09 - 2014-05-09 Molecular Diversity - MODI-D-14-00023R1 **ELSEVIER** OTROS | Evaluador | 2014-04-13 - 2014-04-13 Polyhedron - POLY-D-14-00349 **ELSEVIER** OTROS | Evaluador | 2015-03-23 - 2015-03-24 Polymer - Ref.: Ms. No. POLYMER-15-464 **ELSEVIER** OTROS | Evaluador | 2015-04-01 - 2015-04-02 Polymer - Ms. POLYMER-15-543 SOCIEDAD QUÍMICA DE MÉXICO, A.C. OTROS | Evaluador | 2017-02-03 - 2017-02-03 Journal of the Mexican Chemical Society - Manuscript JMCS17004 SOCIEDAD QUÍMICA DE MÉXICO, A.C. OTROS | Evaluador | 2017-09-19 - 2017-09-19 Journal of the Mexican Chemical Society - Manuscript JMCS17111 SCIENCEDOMAIN INTERNATIONAL OTROS | Evaluador | 2017-07-03 - 2017-07-03 Physical Science International Journal - Ms_PSIJ_35185 SCIENCEDOMAIN INTERNATIONAL OTROS | Evaluador | 2013-06-30 - 2013-06-30 Journal of Scientific Research and Reports - MS: 2013_JSRR_5870 **SCIENCEDOMAIN INTERNATIONAL** OTROS | Evaluador | 2013-08-10 - 2013-08-10 British Journal of Pharmaceutical Research - 2013_BJPR_6178 **ELSEVIER** OTROS | Evaluador | 2014-05-09 - 2014-05-09 Spectrochimica Acta Part A - Ms. Ref. No.: SAA-D-14-00998 **SPRINGERLINK** OTROS | Evaluador 2014-06-26 - 2014-06-26 Theoretical Chemistry Accounts - Ref.: Ms. No. TCAC-D-14-00187 **HINDAWI PUBLISHING COMPANY** OTROS | Evaluador | 2015-03-24 - 2015-03-25 The Scientific World Journal - Research Article 841809 **UNIVERSIDAD DE VALLADOLID** OTROS | Sinodal de Tesis de Doctorado 1992-09-15 - 1992-09-16 Tesis Doctoral - Universidad de Valladolid CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) OTROS | Sinodal de Tesis de Doctorado | 2017-03-18 - 2017-03-18 Tesis de Doctorado - Kathy Alejandra Ramírez Balderrama

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) OTROS Sinodal de Tesis de Doctorado 2017-08-18 - 2017-08-18 Tesis de Doctorado - Linda Lucero Landeros Martínez
UNIVERSITAT DE LES ILLES BALEARS OTROS Sinodal de Tesis de Doctorado 2017-09-29 - 2017-09-29 Tesis de Doctorado - Universitat de les Illes Balears
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ OTROS Sinodal de Examen Previo 2008-10-20 - 2008-10-20 Examen Previo a la Tesis de Doctorado - UASLP
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ OTROS Sinodal de Tesis de Doctorado 2008-12-02 - 2008-12-02 Tesis de Doctorado - Universidad Autónoma de San Luis Potosí
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO (UNAM) OTROS Evaluador 2014-01-15 - 2014-01-15 Tesis de Doctorado - UNAM
CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) OTROS Evaluador 2014-01-02 - 2014-12-31 Admisión al Doctorado - CIMAV
CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) OTROS Evaluador 2008-01-02 - 2008-12-31 Admisión al Doctorado - CIMAV
CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) OTROS Evaluador 2015-01-02 - 2015-12-31 Admisión al Doctorado - CIMAV
CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) OTROS Evaluador 2017-01-17 - 2017-01-17 Avance Programático - CIMAV
CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) OTROS Evaluador 2017-01-18 - 2017-01-18 Avance Programático - CIMAV
CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) OTROS Evaluador 2017-01-20 - 2017-01-20 Avance Programático - CIMAV
CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) OTROS Evaluador 2017-02-25 - 2017-02-25 Seminario Departamental - CIMAV
CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) OTROS Evaluador 2017-07-03 - 2017-07-03 Seminario Departamental - CIMAV

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV)

OTROS Avance Progr	Evaluador 2018-01-25 - 2018-01-25 ramático - CIMAV
OTROS	INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) Evaluador 2018-01-25 - 2018-01-25 ramático - CIMAV
OTROS	INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) Evaluador 2004-01-02 - 2004-12-31 ramático - CIMAV
OTROS	INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) Evaluador 2004-01-02 - 2004-12-31 ramático - CIMAV
OTROS	INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) Evaluador 2004-01-02 - 2004-12-31 ramático - CIMAV
OTROS	INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) Evaluador 2004-01-02 - 2004-12-31 ramático - CIMAV
	INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) Evaluador 2007-02-17 - 2007-02-24 de Cristales
OTROS	INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) Evaluador 2007-02-17 - 2007-02-24 troscopía Óptica de Sólidos Inorgánicos
OTROS	INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) Sinodal de Tesis de Doctorado 2006-04-28 - 2006-04-28 torado - José Humberto Hernández Hernández
OTROS	INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) Sinodal de Tesis de Doctorado 2007-03-15 - 2007-03-15 torado - Héctor Alfredo Robles Martínez
OTROS	INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) Sinodal de Tesis de Doctorado 2002-04-26 - 2002-04-26 torado - Leticia R. Corral Bustamante
OTROS	INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) Sinodal de Tesis de Maestría 2009-10-25 - 2009-10-25 stría - Elcin Coskun
OTROS	INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) Sinodal de Tesis de Doctorado 2012-01-14 - 2012-01-14 torado - Narcizo Mendoza Aguero
OTROS	INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) Sinodal de Tesis de Doctorado 2009-10-22 - 2009-10-22 torado - Luis Miguel Rodríguez Vázquez

	IVESTIGACIÓN EN Sinodal de Tesis				
•	ría - Isis Rodríguez		, –		
OTROS	IVESTIGACIÓN EN Sinodal de Tesis ría - Miguel Angel E	de Maestría	20		
OTROS	IVESTIGACIÓN EN Sinodal de Tesis ría - Ana Lilia Gonz	de Maestría			
OTROS	IVESTIGACIÓN EN Sinodal de Tesis rado - María Isabel	de Doctorado			
OTROS	IVESTIGACIÓN EN Sinodal de Tesis rado - Verónica Gal	de Doctorado			
OTROS	IVESTIGACIÓN EN Sinodal de Tesis ado - Javier Hernái	de Doctorado			•
OTROS	IVESTIGACIÓN EN Sinodal de Tesis rado - Salomón Gor	de Doctorado			
OTROS	IVESTIGACIÓN EN Sinodal de Tesis rado - Raymundo R	de Doctorado	:		•
OTROS	IVESTIGACIÓN EN Sinodal de Tesis ría - Sagrario Melina	de Maestría		ZADOS S.C. 009-07-08 - 2	-
OTROS	IVESTIGACIÓN EN Sinodal de Tesis rado - Fidel Martíne	de Doctorado			
OTROS	IVESTIGACIÓN EN Sinodal de Tesis rado - Elcin Coskun	de Doctorado		ZADOS S.C. 2012-03-27 -	
OTROS	IVESTIGACIÓN EN Sinodal de Tesis ría - Linda Lucila Lu	de Maestría	20)12-07-12 - 2	
OTROS	IVESTIGACIÓN EN Sinodal de Tesis ría - Kathy Alejandr	de Maestría	20	ZADOS S.C. 012-07-12 - 2	

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV)

CONAHCYT - RIZOMA - PERFIL ÚNICO

	•	Sinodal de ía - Rocío Ma				2013-02-2	1 - 2013-02	2-22
OTROS	-	VESTIGACI Sinodal de ado - Karla J	Tesis o	de Doctora	do	2013-06		
OTROS		VESTIGACI Sinodal de ado - Silvia L	Tesis o	de Doctora	do		S.C. (CIMA -20 - 2014-0	
OTROS	1	VESTIGACIO Sinodal de ado - Nora A	Tesis o	de Doctora	do		S.C. (CIMA -08 - 2015-0	-
OTROS	1	VESTIGACIO Evaluador nático - CIMA					S.C. (CIMA	V)
OTROS	1	VESTIGACIO Evaluador nático - CIMA					S.C. (CIMA	(V)
OTROS	1	VESTIGACIO Evaluador nático - CIMA		MATERIA 2017-01-	ALES AV 17 - 2017	ANZADOS 7-01-17	S.C. (CIMA	V)
OTROS	1	VESTIGACIO Evaluador nático - CIMA					S.C. (CIMA	V)
OTROS	1	VESTIGACIO Evaluador nático - CIMA					S.C. (CIMA	V)
OTROS	1	VESTIGACIO Evaluador nático - CIMA					S.C. (CIMA	V)
OTROS	1	VESTIGACIO Evaluador nático - CIMA					S.C. (CIMA	V)
OTROS	1	VESTIGACIO Evaluador nático - CIMA					S.C. (CIMA	V)
OTROS	1	VESTIGACIO Evaluador nático - CIMA					S.C. (CIMA	V)
OTROS	1	VESTIGACIO Evaluador nático - CIMA					S.C. (CIMA	V)

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) OTROS | Evaluador | 2012-01-13 - 2012-01-13 Avance Programático - CIMAV CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) OTROS | Evaluador | 2009-01-02 - 2009-12-31 Admisión al Doctorado - CIMAV INSTITUT QUÍMIC DE SARRIÀ OTROS | Evaluador | 2018-03-27 - 2018-04-04 AFINIDAD - Art.: 4388 FRONTIERS MEDIA S.A OTROS | Evaluador | 2018-01-20 - 2018-01-21 Manuscript ID: 353529 **ELSEVIER** OTROS | Evaluador 2018-04-21 - 2018-04-25 Ms. No.: CPLETT-18-557 SCIENCEDOMAIN INTERNATIONAL OTROS | Evaluador | 2018-04-21 - 2018-04-27 Ms_CSIJ_41427 ISTAMBUL UNIVERSITY 2018-01-19 - 2018-01-21 OTROS | Evaluador Determination of The Best Method (HF, MP2 and B3LYP) in ... **BENTHAM SCIENCE PUBLISHERS** OTROS | Evaluador | 2018-01-10 - 2018-01-12 Computer Aided Design of non-Toxic Antibacterial Peptides FRONTIERS MEDIA S.A OTROS | Evaluador | 2018-01-20 - 2018-01-23 Manuscript ID: 353529 CONSEJOS SUPERIORES DE CIENCIA Y DESARROLLO TECNOLÓGICO DEL FONDO NACIONAL DE DESARROLLO CIENTÍFICO Y TECNOLÓGICO | Evaluador OTROS 2017-10-11 - 2017-10-18 Proyecto N° 1180348 - FONDECYT FONDO PARA LA INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y TECNOLÓGICA (FONCYT) OTROS | Evaluador | 2015-02-03 - 2015-02-10 PICT-2014-1317 **ELSEVIER** OTROS | Evaluador | 2017-10-13 - 2017-10-20 An Overview of Synthetic and Semisynthetic Flavonoid Derivatives and Analogues: Perspectives in Drug Discovery **KUMAMOTO UNIVERSITY** OTROS | Evaluador 2017-05-05 - 2017-05-12 NANOCHEMISTRY: Theory and Practice

ELSEVIER Evaluador 2018-06-14 - 2018-06-15 OTROS Ms. Ref. No.: MOLSTRUC-D-18-00759 Title: The electronic structures and excitation properties of three meso-pentafluorophenyl substituted zinc porphyrin- fullerene dyad **ELSEVIER - COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY** 2018-08-03 - 2018-08-03 OTROS Evaluador Manuscrito Ref COMPTC_2018_99 SPRINGER OTROS Evaluador 2018-08-10 - 2018-08-13 Manuscrito Ref STUC-D-18-00228 **IGI GLOBAL** OTROS Evaluador 2018-08-16 - 2018-08-16 Manuscrito: Significance of Molecular Surfaces in Drug Designing: A Computer Based Approach **ELSEVIER** 1 2018-10-11 - 2018-10-15 OTROS Evaluador - 1 Assessment of a Set of Twelve Density Functionals to Estimate Global Reactivity of Myricetin through the Koopmans' Theorem **WILEY OTROS** Ι Evaluador 2018-10-11 - 2018-10-15 DFT study on the Structures and Stability of BenSnn (n = 1 - 5) and Be2nSnn (n = 1 - 4) Clusters **FRONTIERS OTROS** Evaluador 2018-10-11 - 2018-10-15 Manuscript title: Lithocarols A-F, Six Tenellone Derivatives from the Deep-sea Derived Fungus Phomopsis lithocarpus FS508 Manuscript ID: 429199 Authors: Jianlin Xu, Liu Zhaoming, Yuchan Chen, Haibo Tan, Haohua Li, Saini Li, Heng Guo, Zilei Huang, Xiaoxi FRONTIERS OTROS Evaluador 1 2018-12-10 - 2018-12-10 Breakthrough Potential in Near -Infrared Spectroscopy: Spectra Simulation. A Review of recent developments FRONTIERS 2019-03-15 - 2019-03-16 OTROS Evaluador Bridging the Homogeneous-Heterogeneous Divide: Modeling Spin and Reactivity in Single Atom Catalysis **FRONTIERS** OTROS Evaluador 2019-01-18 - 2019-01-19 Prediction Model of Organic Molecular Absorption Energies based on Deep Learning Trained by Chaos-enhanced Accelerated

Evolutionary Algorithm

FRONTIERS

OTROS | Evaluador | 2019-03-18 - 2019-03-19

Rational Drug Design of Axl Tyrosine Kinase Type I Inhibitors as Promising Candidates against Cancer

FRONTIERS

OTROS | Evaluador | 2019-03-22 - 2019-03-23

Dehydroacetic Acid-Phenylhydrazone as a Potential Inhibitor for Wild-type HIV-1 Protease: Structural, DFT, Molecular Dynamics,

3D QSAR and ADMET Characteristics

FRONTIERS

OTROS | Evaluador | 2019-07-12 - 2019-07-13

An Insight into the Prediction of Heat Capacity of Ionic Liquid Containing Nanoparticle Using Soft Computing Approaches **ELSEVIER** OTROS Evaluador 2019-12-17 - 2019-12-18 Remarkable Improvement of Photoelectric Conversion Efficiency C220-based Sensitizers by Inserting Auxiliary Electron Acceptors for Dye-Sensitized Solar Cells: A Theoretical Investigation **IGI GLOBAL** OTROS Evaluador 2019-12-17 - 2019-12-18 Chemometric Modeling of Structurally Diverse Carbamates for the Inhibition of Acetylcholinesterase Enzyme (AChE) in Alzheimer¿s Disease **SCIENCE DOMAIN INTERNATIONAL** 2019-02-11 - 2019-02-12 OTROS | Evaluador | Fabrication of TiO2/Dye-Sensitized Solar Cells (DSCs) Using Dye Extracts and their Mixture as Photosensitizers **TAYLOR & FRANCIS** 2019-10-22 - 2019-10-23 OTROS | Evaluador Chemical Reactivity Theory (CRT) Study of Small Drug-like Biologically Active Molecules CIMAV Y UNIVERSITAT DE LES ILLES BALEARS Sinodal | 2019-03-07 - 2019-03-07 Tesis de Doctorado de Carlos Mauricio Calderilla Jaime **ELSEVIER** OTROS Evaluador 2019-05-04 - 2019-05-08 Nanochemistry: Theory and Practice **BENTHAM SCIENCE PUBLISHERS** 2019-04-18 - 2019-04-18 OTROS Evaluador Guar Gum/Activated Carbon Nanocomposite - A Novel Adsorbent for the Sequestration of Congo Red from Aqueous Solution **SPRINGER** OTROS | Evaluador 2020-06-14 - 2020-06-15 Ms. No. TCAC-D-20-00219 UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO Evaluador | 2021-01-18 - 2021-01-23 Biocompatibilidad Biológica y Actividad Microbiana de Sulfuro de Plata Nanoestructurado para Aplicación en Biomateriales FRONTIERS IN CHEMISTRY 2021-02-19 - 2021-02-19 OTROS | Evaluador | Quantum Mechanical Predictions of the Antioxidant Capability of Moracin C Isomers AMERICAN CHEMICAL SOCIETY OTROS | Evaluador 2021-08-04 - 2021-08-05 Manuscript ID: ao-2021-03736k AMERICAN CHEMICAL SOCIETY OTROS Evaluador | 2021-08-03 - 2021-08-04 Prot-00259-2021 MDPI

2021-12-22 - 2021-12-23

OTROS

Evaluador

Antibiofilm Combined Activity Between Synthetic Peptides and Antifungal Drugs: An Approach to Overcome Drug Resistance **FRONTIERS** OTROS Revisor 2022-06-20 - 2022-06-20 Molecular Interactions from the Density Functional Theory for Chemical Reactivity: Interaction Chemical Potential, Hardness, and Reactivity Principles **UNAM - MUNDO NANO** OTROS | Evaluador 2022-06-21 - 2022-06-28 Tessellations on Bidimensional Materials Based on Phthalocyanine and Applications: A Review MDPI **OTROS** Evaluador 2022-09-08 - 2022-09-08 In silico Analysis of Bioactive Peptides Produced from Underutilized Sea Cucumber By-products - A Bioinformatics Approach MDPI **OTROS** 2022-09-28 - 2022-09-28 Evaluador In silico-based screening for natural product; s structural analogs as new drugs candidate against leishmaniasis CONSEJO POTOSINO DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA - COPOCYT 2021-12-01 - 2021-12-08 OTROS Evaluador Premio Potosino de Investigación Científica y Tecnológica 2021 **ELSEVIER** | Evaluador | 2023-03-04 - 2023-03-04 OTROS Ms. Ref. No.: MOLSTRUC-D-23-00969 **SPRINGER** OTROS | Evaluador 1 2023-03-30 - 2023-04-04 TCA - Ref: Submission ID 9db9697a-d765-4200-a5b7-65e0a38a8ecf **ELSEVIER** 2023-04-20 - 2023-04-20 OTROS | Evaluador Ms. Ref. No.: COMPTC-D-23-00413 **ELSEVIER** OTROS | Evaluador | 2023-10-17 - 2023-10-17 Ms. Ref. No.: MOLSTRUC-D-23-06866 **WILEY-VCH GMBH** OTROS | 2023-11-06 - 2023-11-06 Evalaudor ADME/Tox Profiling of Mushrooms Secondary Metabolites: Insight into in silico Approach **ELSEVIER - JOURNAL OF MOLECULAR MODELING** OTROS | Evaluador | 2023-11-29 - 2023-11-29 Toxicity of Persistent Organic Pollutants: A Theoretical Study **MDPI - MARINE DRUGS** OTROS | Evaluador | 2023-11-29 - 2023-11-29 Bioactive Molecules from Innate Immunity of Ascidians and Innovative Methods of Drug Discovery: A Computational Approach Based on Artificial Intelligence JOURNAL OF MOLECULAR MODELING - SPRINGER NATURE

CONAHCYT - RIZOMA - PERFIL ÚNICO

OTROS | Evaluador | 2024-01-29 - 2024-01-29

Toxicity of Persistent Organic Pollutants: A Theoretical Study

SCIENTIFIC REPORTS - SPRINGER NATURE

OTROS | Evaluador | 2024-01-29 - 2024-01-29

DFT/TDDFT Calculations of Geometry Optimization, Electronic Structure and Spectral Properties of Clevudine and Telbivudine for Treatment of Chronic Hepatitis B Virus

MOLECULES - MDPI

OTROS | Evaluador | 2024-01-31 - 2024-01-31

Study on the mechanism of lipid peroxidation induced by carbonate radicals

CIENCIA BÁSICA Y DE FRONTERA 2023-2024

CONACYT | 2024-01-31

Solicitud No. CBF2023-2024-4190_21082, denominada: "Síntesis Verde y Caracterización de Nanopartículas de Oro: Efecto Citotóxico en Líneas Celulares de Cáncer de Mama y Predicción de sus Propiedades a través de Algoritmos de Inteligencia Artificial", presentada en el marco de la Convocatoria "Ciencia Básica y de Frontera 2023-2024".

CIENCIA BÁSICA Y DE FRONTERA 2023-2024

CONACYT | 2024-01-31

Solicitud No.CBF2023-2024-3156, denominada: "Diseño y Desarrollo de Nuevos Inhibidores de Dianas Moleculares para Atención de Enfermedades Emergentes en México", presentada en el marco de la Convocatoria "Ciencia Básica y de Frontera 2023-2024".

CIENCIA BÁSICA Y DE FRONTERA 2023-2024

CONACYT | 2024-02-02

Solicitud CBF2023-2024-1141, titulada: Diseño de Fármacos Multifuncionales para Abordar Enfermedades Multifactoriales: Una Aproximación Computacional y Experimental Hacia la Mejora de la Terapia, presentada en el marco de la Convocatoria: "CIENCIA BÁSICA Y DE FRONTERA 2023-2024", modalidad CIENCIA BÁSICA Y DE FRONTERA 2023-2024.

CIENCIA BÁSICA Y DE FRONTERA 2023-2024

CONACYT | 2024-02-16

Evaluación de la Solicitud CBF2023-2024-2155, titulada: Síntesis y Caracterización de Ditiocarbamatos del Grupo 10 Derivados de Macrociclos Tipo Oxaazaciclofano y su Potencial Uso como Sensores y Agentes Antitumorales, presentada en el marco de la Convocatoria: "CIENCIA BÁSICA Y DE FRONTERA 2023-2024", modalidad CIENCIA BÁSICA Y DE FRONTERA 2023-2024.

CIENCIA BÁSICA Y DE FRONTERA 2023-2024

CONACYT | 2024-02-28

Evaluación de la Solicitud CBF2023-2024-3999, denominada: Aplicación de Métodos Computacionales en el diseño de Fármacos Anti-Tuberculosis y Anti-Maláricos Derivados de Fitoquímicos, presentada en el marco de la Convocatoria "CIENCIA BÁSICA Y DE FRONTERA 2023-2024", modalidad CIENCIA BÁSICA Y DE FRONTERA 2023-2024.

AMERICAN CHEMICAL SOCIETY - ACS OMEGA

OTROS | Evaluador | 2024-03-12 - 2024-03-12

Artículo "Physicochemical Properties of 4-(4-Hydroxyphenyl)-butan-2-one ('Raspberry Ketone') Evaluated Using a Computational Chemistry Approach" sometido a publicación en ACS Omega.

SPRINGER NATURE - JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

OTROS | Evaluador | 2024-03-12 - 2024-03-12

Evaluation of Chemical Reactivity and Polarity of Imidazolium Based Ionic Liquids using Quantum Chemical Calculations

JOURNAL OF BIOMOLECULAR STRUCTURE AND DYNAMICS

OTROS | Evaluador | 2024-03-17 - 2024-03-18

Identify Potential anti-Cancer Compounds from Hibiscus esculentus (L.) against Prostate Cancer Using in-silico and Molecular Docking Approaches.

AMERICAN CHEMICAL SOCIETY (ACS) OMEGA

OTROS | Evaluador | 2024-04-08 - 2024-04-08

Evaluation of Free-radical Scavenging Ability of Triazole-3-Thiol: A Combination of Experimental and Theoretical Approaches

MDPI - MOLECULES

OTROS | Evaluador | 2024-04-18 - 2024-04-18

Exploring the Structural and Electronic Properties of Niobium Carbide Clusters: A Density Functional Theory Study

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING - SPRINGER

OTROS | Evaluador | 2024-05-31 - 2024-05-31

Extracts from Capsicum annuum as Natural Sensitizer in Dye Sensitized Solar Cell:Theoretical Analysis Using DFT and TD-DFT

AMERICAN CHEMICAL SOCIETY - THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C

OTROS | Evaluador | 2024-06-25 - 2024-06-25

Beyond SM315: A Comprehensive Analysis of Power Conversion Efficiency in Tailored Donor-Acceptor Porphyrin Sensitizers for

DSSCs

DIVULGACIÓN

DISEÑANDO LA MATERIA POR COMPUTADORA

Medio impreso | 2003-07-30

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV)

NANOMATERIALES

Medio impreso | 2006-08-06

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV)

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE MATERIALES MOLECULARES

Conferencia | 2001-10-23

CONSEJO ESTATAL DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y DESARROLLO TECNOLÓGICO

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE MATERIALES MOLECULARES

Feria científica y tecnológica | 2001-10-24

CONSEJO ESTATAL DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y DESARROLLO TECNOLÓGICO

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE MATERIALES MOLECULARES

Feria científica y tecnológica | 2001-10-25

CONSEJO ESTATAL DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y DESARROLLO TECNOLÓGICO

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE MATERIALES MOLECULARES

Feria científica y tecnológica | 2001-10-26

CONSEJO ESTATAL DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y DESARROLLO TECNOLÓGICO

NANOTECNOLOGÍA

Feria científica y tecnológica | 2004-10-26

CONSEJO ESTATAL DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y DESARROLLO TECNOLÓGICO

STRUCTURE AND REACTIVITY IN THEORETICAL AND COMPUTATIONAL ORGANIC CHEMISTRY

Simposium | 2006-09-24

SOCIEDAD QUÍMICA DE MÉXICO, A.C.

NANO-OPORTUNIDADES EN QUÍMICA COMPUTACIONAL

Conferencia | 2006-11-10

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE QUERÉTARO

NANO-OPORTUNITIES IN COMPUTATIONAL CHEMISTRY

Conferencia | 2007-08-25

CONSEJO NACIONAL DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA

MAESTRÍA EN NANOTECNOLOGÍA Y MAESTRÍA EN COMERCIALIZACIÓN DE LA CIENCIA Y LA TECNOLOGÍA

Conferencia | 2008-03-06

TECNOLÓGICO NACIONAL DE MÉXICO

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL EN NANOTECNOLOGÍA

Conferencia | 2005-08-12

GRUPO DIMSA

NANOTECNOLOGÍA EN EL CIMAV

Conferencia | 2008-09-22

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SINALOA (UAS)

NANO-OPORTUNIDADES EN QUÍMICA COMPUTACIONAL

Seminario | 2009-07-08

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV)

ACERCA DEL PROGRAMA INSTITUCIONAL DE NANOTECNOLOGÍA EN CIMAV

Revista de divulgación | 2009-08-07

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV)

MODELACIÓN MOLECULAR DE NANOMATERIALES PARA FOTOSÍNTESIS ARTIFICIAL

Seminario | 2010-12-07

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV)

MODELADO MOLECULAR DE NANOMATERIALES PARA FOTOVOLTAICA MOLECULAR

Conferencia | 2011-03-10

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV)

1ER TALLER DE INNOVACIÓN FOTOVOLTAICA Y CELDAS SOLARES

Seminario | 2011-03-10

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO (UNAM)

QUÍMICA COMPUTACIONAL DE MOLÉCULAS Y NANOMATERIALES PARA NANO- Y FOTOELECTROQUÍMICA SOLAR

Conferencia | 2010-11-11

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV)

COMPUTATIONAL MOLECULAR NANOSCIENCE IN MEXICO: THE NANOCOSMOS VIRTUAL LAB

Conferencia | 2012-03-16

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV)

MOLECULAR MODELING OF NANOMATERIALS FOR ENERGY CONVERSION AND STORAGE

Seminario | 2010-09-26 UNIVERSIDAD JAUME I

NANOTECNOLOGÍA EN CIMAV Y MODELADO MOLECULAR Y SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE NANOMATERIALES PARA FOTOVOLTAICA MOLECULAR

Seminario | 2009-12-18

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SINALOA (UAS)

COMPARISON OF SEVERAL PROTOCOLS FOR THE COMPUTATIONAL PREDICTION OF THE ABSORPTION SPECTRUM OF CHRYSANTEMIN

Conferencia | 2013-07-04 UNIVERSIDAD DE GRANADA

MODELADO MOLECULAR DE NANOMATERIALES PARA FOTOVOLTAICA MOLECULAR

Conferencia | 2010-11-18

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV)

COMPUTATIONAL MOLECULAR NANOSCIENCE IN MEXICO: THE NANOCOSMOS VIRTUAL LAB

Conferencia | 2011-10-28

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV)

LABORATORIO VIRTUAL NANOCOSMOS

Seminario | 2009-03-27

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV)

QUÍMICA COMPUTACIONAL

Simposium | 2011-08-29

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV)

QUÍMICA COMPUTACIONAL

Simposium | 2013-08-20

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV)

QUÍMICA COMPUTACIONAL: DISCIPLINA PARA CREAR FÁRMACOS CONTRA ENFERMEDADES DEGENERATIVAS

Medio impreso | 2018-04-14

CONSEJO NACIONAL DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA

QUÍMICA COMPUTACIONAL EN EL CIMAV

Otro | 2017-04-04

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV)

PREDICCIÓN COMPUTACIONAL DE LA ESTRUCTURA MOLECULAR Y PROPIEDADES FOTOFÍSICAS DE NUEVOS COLORANTES CON LA ESTRUCTURA D-PI-A

Otro | 2024-03-22

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SINALOA - LOS MOCHIS

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN EXPERIMENTAL DE UNA NUEVA SAL OD A BASE DE ANTIMONIO, ESTUDIO TEÓRICO Y EXPERIMENTAL

Otro | 2024-03-22

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SINALOA - LOS MOCHIS

DESARROLLO INSTITUCIONAL

rizoma