

Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN



Programa de Doctorado en Ciencias en la especialidad de Ciencias Químicas

Relación de productos de investigación de las LGAC

A continuación se presenta la relación de productos de investigación de las LGAC de estudiantes y profesores/profesoras del núcleo académico

A continuación, se presenta la lista de productos de investigación, organizado por LGAC, de profesores y estudiantes adscritos al Programa. Para facilitar el análisis, los nombres de los profesores se encuentran resaltados en letras gruesas mientras que los de los estudiantes del Programa se encuentran en letra itálica.

Química de heteroelementos y heterociclos:

P. Sánchez-Portillo, A. Hernández-Sirio, C. Godoy-Alcántar, P. G. Lacroix, V. Agarwal, **R. Santillán** and V. Barba. Colorimetric metal ion (II) Sensors Based on imine boronic esters functionalized with pyridine. *Dyes and Pigments*, 186, 108991: 2021.

J. C. Martínez García, P. Montes-Tolentino, I. F. Hernández Ahuactzi, C. Godoy Alcantar, **A. Ariza** and J. A. Guerrero Álvarez. Diorganotin(IV) benzoates Structure, stability and equilibrium analysis by ^1H and ^{119}Sn NMR spectroscopy in acid solution. *J. Mol. Struct.*, 127 915: 2020.

A. Arenaza-Corona, M. D. Couce-Fortunez, A. de Blas, D. Morales-Morales, **R. Santillán**, H. Hopfl, T. Rodríguez-Blas and V. Barba. Further Approaches in the Design of Antitumor Agents with Response to Cell Resistance: Looking toward Aza Crown Ether-dtc Complexes. *Inorganic Chemistry* : 15120-15134: 2020.

J. C. Berrones-Reyes, B. M. Muñoz- Flores, A. C. Uscanga- Palomeque, **R. Santillán**, C. Del Ángel-Mosqueda, D. Nobis, M. A. Cochrane, S. W. Magennis and V. M. Jiménez-Pérez. Two-Photon Detection of Organotin Schiff Base Complexes in Cancer Cells. *ChemPubSoc Europe* : 1623-1627: 2020.

L. M. Carrillo-Cocom, B. B Villagómez González, **R. Santillán**, D. Soto Castro, P.M Sánchez Ocampo, A. Zepeda and J. Capataz Tafur. Synthesis of diosgenin prodrugs: anti-inflammatory and antiproliferative activity evaluation. *J. Chem. Sci.* : 103-111: 2020.

T. O. Villaseñor-Granados, P. Montes Tolentino, G. Rodríguez-López, S. A. Sánchez-Ruiz and **A. Flores-Parra**. Structural analysis of tris (5-methyl- [1,3,5]-dithiazinan-2-yl)stibin e, its reactions with chalcogens. Intramolecular chalcogen-bonding interactions. *J. Mol. Struc.* 1200: 127050: 2020.

T. Román, D. Ramírez, R. Fierro- Medina, **R. Santillán** and N. Farfán. Ferrocene and Organotin (IV) Conjugates Containing Amino Acids and Peptides: A Promising Strategy for Searching New Therapeutic and Diagnostic Tools. *Current Organic Chemistry* : 1-22: 2020.

A. A. Molina Paredes, V. M. Jiménez Pérez, J. A. Lara Cerón, I. Moggio, E. Arias, **R. Santillán**, M. Sánchez, A. Saucedo Yáñez and B. M. Muñoz -Flores. Fluorescent boron Schiff bases dyes for staining silk fibroin: Green synthesis, structural characterization, DFT, and photophysical properties. *Applied Organometallic Chemistry* (33): 4609: 2019.

J. Ordóñez-Hernández, R. Arcos-Ramos, H. García-Ortega, E. Munguía-Viveros, M. Romero-Ávila, M. Flores-Álamo, I. Gracia-Mora, F. Sánchez Bartz, **R. Santillán** and N. Farfán. Synthesis and structural analysis of bioactive Schiffbase pentacoordinated diorganotin(IV) complexes. *Journal of Molecular Structure* (1180): 462-471: 2019.

M. M. Romero-Chávez, K. Pineda-Urbina, D. J. Pérez, F. Obledo-Benicio, **A. Flores-Parra**, Z. Gómez-Sandoval and Á. Ramos-Organillo. Organotin(IV) compounds derived from ibuprofen and cinnamic acids, and alternative into design of anti-inflammatory by the cyclooxygenases (COX-1 and COX-2) pathway. *Journal of Organometallic Chemistry* 862: 58-70: 2018.

A. Enríquez Cabrera, A. Vega Peñaloza, V. Álvarez Venicio, M. Romero Ávila, P. G. Lacroix, G. Ramos Ortiz, **R. Santillán Baca** and N. Farfán. Two-photon absorption properties of four new pentacoordinated diorganotin complexes derived from Schiff bases with fluorene. *Journal of Organometallic Chemistry* 855: 51-58: 2018.

A. M. Cantón Díaz, B. M. Muñoz Flores, I. Moggio, E. Arias, A. De León, M. C. García López, **R. Santillán**, M. E. Ochoa and V. M. Jiménez Pérez. One-pot microwave-assisted synthesis of organotin Schiff bases: an optical and electrochemical study towards their effects in organic solar cells. *New Journal of Chemistry* 42: 14586-14596: 2018.

C. C. Jiménez, A. Enríquez Cabrera, O. González Antonio, J. Hernández Obregón, P. G. Lacroix, P. Labra Vázquez, N. Farfán and **R. Santillán**. State of the Art of Boron and Tin Complexes in Second- and Third-Order Nonlinear Optics. *Inorganics* 6: 131: 2018.

M. Ibarra Rodríguez, B. M. Muñoz Flores, J. Lara Cerón, **R. Santillán**, M. E. Ochoa, N. Waksman and V. M. Jiménez Pérez. Centrosymmetric Binuclear Boron Compounds Derived from Dithiooxamides: Synthesis, Characterization, and Their Photophysical Properties. *Journal of Chemistry*: 10 pages: 2018. On line Article ID 4295970 <https://doi.org/10.1155/2018/4295970>.

P. Montes-Tolentino, G. Rodríguez-López, S. A. Sánchez-Ruiz, T. O. Villaseñor-Granados and **A. Flores-Parra**. Structural analysis of (5-methyl-[dithiazinan-2-yl])phosphines and their oxides. N-Borane adducts as conformational probes. *Inorganica Chimica Acta* 482: 420-430: 2018.

Trabajos presentados en Congresos:

Trabajos presentados en el 10° Encuentro de Química Inorgánica (EQI 2019) 2019-06-25 - 2019-06-28 Ixtaczoquitlán, Veracruz, México:

P. Montes-Tolentino, S. A. Sánchez-Ruiz, T. O. Villaseñor-Granados y **A. Flores-Parra**. Síntesis y análisis estructural de la tris(5-metil- [1,3,5]-ditiazinan-2-il)estibina y bisditiazinanilsulfuro y selenuro.

T. O. Villaseñor Ganados, *G. Rodríguez López* y **A. Flores Parra**. Elucidación computacional del mecanismo de reacción en la condensación A3 para la generación de propargilaminas catalizada por carbenos de plata.

Trabajo presentado en el Foro del 15° Aniversario de la Facultad de Ciencias Químicas. 2019-08-27 - 2019-08-27 Universidad de Colima

Flores Parra. Derivados multipodales del ditiazinilo. La química sorprendente de un ligante excepcional.

Los siguientes trabajos fueron presentados en el 8° Encuentro de Química Inorgánica (EQI 2017) que tuvo lugar en Sonora, México del 5 al 8 de septiembre de 2017:

A. Burgos-Pech, I. Ramos-García, *G. Rodríguez-López* y **A. Flores-Parra**, A. Síntesis de nuevas 1,3-(2- cloroalquil)-[1,3,2]-diazaborolinas.

M. Cancino Pérez, M., Sánchez-Ruiz y **A. Flores Parra**. Diseño y síntesis de nuevas estructuras policíclicas formados por tres [1,3,5]-heterociclohexanos unidos por metales del grupo 13. p. 108.

B. López-Vázquez, I. Ramos-García, *G. Rodríguez-López* y **A. Flores-Parra**. Nuevas 1,3-dialquil-2- cloro-[1,3,2]-diazafosfolidinas: Síntesis y reactividad. p. 100

P. Montes-Tolentino, J. García-Escobar, S. A. Sánchez-Ruiz y **A. Flores-Parra**. Nuevos organofosforos y organoestibina multipodales derivados del 5-metil-[1,3,5]-ditiazinano. p. 33.

I. Ramos-García, *G. Rodríguez-López* y **A. Flores-Parra**. Síntesis y estudio de la reactividad de β -difenilfosfino-diazaborolidinas con compuestos del grupo principal. p. 105.

T.O. Villaseñor-Granados, *G. Rodríguez-López* y **A. Flores-Parra**. Estudio computacional de las interacciones intramoleculares débiles en heterociclos de nitrógeno y sus complejos con plata y boro. p. 30.

Estudiantes graduados:

Pedro Montes Tolentino. "5-alkyl-[1,3,5]-ditiazinanos, excelentes bloques para la construcción de compuestos multipodales del bloque "p" ". Directora de tesis: Dra. María Angelina Flores Parra. Junio 29 de 2017.

Germán Rodríguez López. "Imidazolios N- β -cloroetilo y N-vinilo: formación de carbenos coordinados con borano y plata (I)". Directora de tesis: Dra. María Angelina Flores Parra. Diciembre 7 de 2017.

Síntesis Orgánica:

A. Borja-Miranda, F. Valencia-Villegas, **J. A. Luján-Montelongo** and L. Poindara-García. Synthesis of polysubstituted Isoindolinones via radical cyclization of 1,3-dicarbonyl Ugi-4CR adducts using tetrabutylammonium persulfate and TEMPO. *J. Org. Chem.* 2021 86(1), 929-946.

O. J. Quintana-Romero and **A. Ariza-Castolo**. Complex molecular logic gates from simple molecules. *RSC Advances*. 2021, 11, 20933.

M. Pérez-Venegas, T. Arbeloa, J. Bañuelos, I. López-Arbeloa, N. E. Lozoya-Pérez, B. Franco, H. M. Mora-Montes, J. L. Belmonte-Vázquez, C. I. Bautista-Hernández, E. Peña-Cabrera and **E. Juaristi**. Mechanochemistry as a Sustainable Method for the Preparation of Fluorescent Ugi BODIPY Adducts. *European Journal of Organic Chemistry*. 2021, 253.

M. Pérez-Venegas and **E. Juaristi**. Mechanoenzymology: State of the Art and Challenges towards Highly Sustainable Biocatalysis. *ChemSusChem*. 2021, 14, 2682.

E. Juaristi, Recent developments in next generation (S)-proline-derived chiral organocatalysts. *Tetrahedron*, 2021, 88, 132143.

Loeza L., Corona-Sánchez R., Castro G., Romero-Ávila M., Santillan R., Maraval V., Chauvin R., Farfán N. Synthesis and optical properties of 1-ethyl-indol-3-yl-substituted aza-BODIPY dyes at the 1,7-positions. *Tetrahedron*, 2021, 83, 131983.

C. Garcias-Morales, J. Espinosa Maldonado, **A. Ariza Castolo**, C. M. Perez Berumen, M. A. Lobato, Rodriguez and A. Espinoza Roa. Synthesis and physicochemical characterization of Schiff bases used as optical sensor for metal detection in water. *J. Molec. Struct.* 2021, 1228, 129444.

M. Pérez Venegas, *M. M. Téllez Cruz*, **O. Solorza-Feria**, A. López Munguía, E. Castillo and **E. Juaristi**. Thermal and Mechanical Stability of Immobilized Candida Antarctica LipaseB an Approximation to Mechanochemical Energetics in Enzyme Catalysis. *ChemCatChem* 12(803): 81: 2020. <https://doi.org/10.1002/cctc.201901714>.

L. López Garrido, Á. E. Bañuelos Hernández, E. Pérez Hernández, R. Tecualt Gómez, J. Quiroz Williams, **A. Ariza** and Elvia Becerra Martínez. Metabolic profiling of serum in patients with cartilage tumours using ¹H NMR spectroscopy A pilot 566 study. *Magn. Reson. Chem.* 2020 : 58, 65–76: 2020. doi: 10.1002/mrc.4925

N. Aguilar Valdez, N. Esturau-Escofet, Ó. González-Antonio, M. Romero-Ávila, B. Flores-Pérez, D. Díaz, M. A. Leyva, **R. Santillán** and N. Farfán. Synthesis, complete NMR assignment and structural study of a steroidal dimer of 17 α -ethynyl-5 α 10 α -estrane-17 β -ol with diethynylbenzene spacer. *Steroids* : 157: 2020.

A. Corona Díaz, J. P. García Merinos, M. E. Ochoa, R. E. del Rio, **R. Santillán**, S. Rojas-Lima and J. W. Morzycki Morzycki. TiCl₄ catalyzed cleavage of (25R)-22-oxo-23-spiroketal. Synthesis of sapogenins with furostanol and pyranone E rings on the side chain. *Steroids* : 152: 2019.

L. Álvarez-Santamaría, **E. Juaristi**, A. B. Arroyo-Colín, J. Palma-Flores and J. Escalante. "Efficient Solvent-Free Preparation of Imines, and Their Subsequent Oxidation with m-CPBA to Afford Oxaziridines". *Green and Sustainable Chem.* 9: 143-154: 2019.

E. Alwedi, **J. A. Lujan-Montelongo**, R., CortésMejía, J. Martín del Campo, B. Altundas and F. F. Fleming. "Asmic Isocyanide-Nitrile Isomerization-Alkylations". *European J. Org. Chem.* 2019(29): 4644-4648: 2019.

C. Cruz-Hernández, J. M. Landeros and **E. Juaristi**. "Multifunctional Phosphoramidate-(S)-prolaminamide Derivatives as Efficient Organocatalysts in Asymmetric Aldol and Michael Reactions". *New J. Chem.* 43: 5455-56465: 2019.

A. Fingerhut, *J. VargasCaporali*, M. A. Leyva-Ramírez, **E. Juaristi** and S. B. Tsogoeva. "Biomimetic Non-Heme Iron(III) Catalyzed Epoxidation of Challenging Terminal Alkenes Using Aqueous H₂O₂ as an Environmentally Friendly Oxidant. *Molecules* 24: 3182: 2019.

M. P. Espinosa Valdés, S. Borbolla Álvarez, A. E. Delgado Espinosa, J. F. Sánchez Tejeda, A. Cerón Nava, O. J. Quintana Romero, **A. Ariza Castolo**, D. F. García Del Río and M. A. Loza Mejía. Synthesis, In Silico, and In Vitro Evaluation of Long Chain Alkyl Amides from 2-Amino-4-Quinolone Derivatives as Biofilm Inhibitors. *Molecules* 24: 327 (18 páginas): 2019. doi:10.3390/molecules24020327.

M. Ibarra Rodríguez, B. M. Muñoz -Flores, J. Lara Cerón, **R. Santillán**, M. E. Ochoa, M. Sánchez and V. M. Jiménez Pérez. Synthesis, Characterization, X-Ray Structure, and Conformation DFT Calculation of a Carbohydrazide Derivative. *Journal of Chemical Crystallography* (49): 92-97: 2019.

Ó. González-Antonio, M. Navarro Villalobos, M. M. Vázquez Alvarado, **R. Santillán**, B. Flores-Pérez, M. Romero-Ávila and N. Farfán. On the nucleophilic derivatization of 4,7-dibromo-[1,2,5]thiadiazolo[3,4-c]pyridine: basis for biologically interesting species and building blocks for organic materials. *New Journal of Chemistry* (43): 10491- 10500: 2019.

O. Sánchez-Antonio and **E. Juaristi**. "Synthesis of a New Chiral Organocatalyst Derived from (S)-Proline Containing a 1,2,4-Triazolyl Moiety and Its Application in the Asymmetric Aldol Reaction. Effect of Water". *Tetrahedron Lett.* 60: 151128: 2019.

C. G. Ávila-Ortiz, *M. PérezVenegas*, *J. VargasCaporali* and **E. Juaristi**. "Recent Applications of Mechanochemistry in Enantioselective Synthesis". *Tetrahedron Lett.* 60: 1749- 1757: 2019.

E. Alwedi, E., **J. A. Lujan-Montelongo**, B. R. Pitta, A. Chao, R. Cortés-Mejía, J. Martín del Campo and F. F. Fleming. Asmic: An Exceptional Building Block for Isocyanide Alkylations. *Org. Lett.* 20(18): 5910-5913: 2018.

A. Ariza Castolo, J. M. Jiménez Antaño, J. Pérez Vargas, O. Gómez Guzmán and G. Calva Calva. An efficient heat-shock protocol for transformation of *Agrobacterium rhizogenes* without spontaneous generation to antibiotic resistance. *Plant Omics Journal* 2018(11): 20-29: 2018.

S. V. Chepyshev, B. R. Pitta, S. R. Vangala, **J. A. Luján-Montelongo**, O. W. Steward and F. F. Fleming. Electrophile-Directed Diastereoselective Oxonitrile Alkylations. *Chem. - Eur. J.* 24(12): 2850-2853: 2018.

C. I. Bautista Hernández, G. E. Negrón Silva, **R. Santillán**, B. I. Vergara Arenas, D. A. Beltrán, L. Lomas Romero and D. Pérez Martínez. Design and synthesis of new carbohydrate-lithocholic acid conjugates linked via 1,2,3-triazole rings. *Tetrahedron* 74: 2009-2019: 2018.

C. Cruz-Hernández, P. E. Hernández-González and **E. Juaristi**. "(R)- and (S)-Proline-Derived Chiral Phosphoramides as Organocatalysts for the Enantiodivergent Aldol Reaction of Isatins with Cyclohexanone in the Presence of Water". *Synthesis* 50: 1827-1840: 2018

C. Cruz-Hernández C, P. E. Hernández-González and **E. Juaristi**. "Proline-Glycine Dipeptidic Derivatives of Chiral Phosphoramides as Organocatalysts for the Enantiodivergent Aldol Reaction of Arylaldehydes and Isatins with Cyclohexanone in the Presence of Water". *Synthesis* 50: 3445-3459: 2018; 1827-1840: 2018.

C. Cruz-Hernández, E. Martínez-Martínez, P. E. Hernández-González and **E. Juaristi**. "Synthesis of a New N-Chiral Diamino-phosphoryl N393939-[(2S)-2-pyrrolidinylmethyl]-thiourea as an Organocatalyst for the Stereoselective Michael Addition of Cyclohexanone to Nitrostyrenes and Chalcones-Applications in Cascade Processes for the Synthesis of Polycyclic Systems". *Eur. J. Org. Chem.* : 6890-6900: 2018.

A. Espinoza-Vázquez, F. J. Rodríguez-Gómez, **E. Juaristi**, M. Escudero-Casao, D. Ángeles-Beltrán, G. E. Negrón-Silva and M. Palomar-Pardavé. Triazoles Derived from Beta-Amino Acids as Corrosion Inhibitors for AP1 5L X52 Steel Immersed in 1M HC. *Int. J. Electrochem. Sci.* 13: 7517- 7531: 2018.

A. R. Hernández-Martínez, J. **A. Luján-Montelongo**, C. Silva-Cuevas, J. D. Mota-Morales, M. Cortez-Valadez, A. de J. Ruiz-Baltazar, M. Cruz and J. Herrera-Ordoñez. Swelling and methylene blue adsorption of poly (N,N-dimethylacrylamide-co-2-hydroxyethyl methacrylate) hydrogel. *React. Funct. Polym.* 122: 75 - 84: 2018.

J. Ordóñez Hernández, A. Jiménez Sánchez, H. García Ortega, N. Sánchez Puig, M. Flores Álamo, **R. Santillán** and N. Farfán. A series of dual-responsive Coumarin-Bodipy probes for local microviscosity monitoring. *Dyes and Pigments* 157: 305–313: 2018.

E. Juaristi and R. Notario. "Stereo-electronic Interactions Exhibited by 1J_C-H One-Bond Coupling Constants and Examination of the Possible Existence of the Intramolecular alpha-Effect in Six-Membered Oxygen-Containing Heterocycles". *J. Org. Chem.* 83: 3293- 3298: 2018.

E. Juaristi and R. Notario. "Density Functional Theory Computational Reexamination of the Anomeric Effect in 2-Methoxy- and 2-Cyano-1,3-dioxanes and 1,3-Dithianes. Novel Stereo-electronic Interactions Involving the Cyano (C=N:) Group Revealed by Natural Bond order (NBO) Analysis. *J. Org. Chem.* 8: 10326-10333: 2018.

J. A. Luján-Montelongo, H. L. Mendoza-Figueroa, C. Silva-Cuevas, A. C. Sánchez-Chávez, L. A. Polindara García, S. Oliveros-Cruz and M. D. Torres-Cardona. Highly regioselective enzymatic synthesis of lutein-3-monoesters. *Tetrahedron Lett.* 59(46): 4096–4101: 2018.

M. Ibarra Rodríguez, B. M. Muñoz Flores, J. Lara Cerón, **R. Santillán**, M. E. Ochoa and M. Sánchez. Synthesis, Characterization, X-Ray Structure, and Conformation DFT Calculation of a Carbohydrazide Derivative. *Journal of Chemical Crystallography on line* : 740-744: 2018.

R. Notario, J. Z. Dávalos, R. Guzmán-Mejía and **E. Juaristi**. "Gas-Phase Acidities and Basicities of Alanines and N-Benzyl-alanines by the Extended Kinetic Method". *J. Phys. Chem. A* 122: 383-389: 2018.

M. Pérez-Venegas and **E. Juaristi**. Mechanoenzymatic Resolution of Racemic Chiral Amines, A Green Technique for the Synthesis of Pharmaceutical Building Blocks. *Tetrahedron* 74: 6453-6458: 2018.

A. L. Ramos-Jacques, **J. A. Luján-Montelongo**, *C. Silva-Cuevas*, M. Cortez-Valadez, M. Estévez and A. R. Hernández-Martínez. Lead (II) removal by poly(N,N-dimethylacrylamide-co-2-hydroxyethyl methacrylate). *Eur. Polym. J.* 101: 262-272: 2018

A C. Sánchez-Chávez, H. L. Mendoza-Figueroa, S. Oliveros-Cruz, M. D. Torres-Cardona, **J. A. Lujan-Montelongo**, J. L. A. Polindara-García. "Eco-Friendly" Epimerization of Lutein to 3' - Epilutein Under Solvent-Free Mechanochemical Conditions by Using a Strongly Acidic Cation-Exchange Resin. *Eur. J. Org. Chem* (24): 3202-3210: 2018.

C. Silva-Cuevas, E. Paleo, D. F. León-Rayó and **J. A. Lujan-Montelongo**. An expeditious and efficient bromomethylation of thiols: enabling bromomethyl sulfides as useful building blocks. *RSC Adv* 8(43): 24654-24659: 2018.

J. Vargas-Caporali, A. van der Lee, G. Dewynter and **E. Juaristi**. Synthesis of Diastereomeric Pyrrolidine Sulfamides via Anchimerically Assisted Nucleophilic Substitution and Reaction. *Lett. Org. Chem.* 15: 352-358: 2018.

L. N. Mander, T. K. M. Shing, Y. Y. Yeung and **J. A. Luján-Montelongo**. Methyl Cyanofornate. *Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis* : 8-20: 2018. ISBN 978-0-47193-623-7 978-0-47084-289-8. John Wiley. 3a. ISBN: 978-0-47193-623-7 (impreso), 978-0-47084-289- 8 (online). Fuchs, P. L., Bode, J. W., Charette, A. B., Rovis, T.

J. Vargas-Caporali and **E. Juaristi**. "Determination of Enantioselectivities by Means of Chiral Stationary Phase HPLC in Order to Identify Effective Proline-Derived Organocatalysts". *J. Brazilian Chem. Soc.* 29: 896-915: 2018. ISBN 0103-5053.

C. G. Ávila-Ortiz, L. Díaz-Corona, E. Jiménez-González and **E. Juaristi**. Asymmetric Michael Addition Organocatalyzed by α,β -Dipeptides under Solvent-Free Reaction Conditions. *Molecules.* (2017) 22: 1328-1342. 1420-3049.

S. V. Chepyshev, **J. A. Lujan-Montelongo**, A. Chao and F. F. Fleming. Alkenyl Isocyanide Conjugate Additions: A Rapid Route to γ -Carbolines. *Angew. Chem. Int.* (2017) 56: 4310-4313.

J. B. García-Vázquez, A. E. Bañuelos-Hernández, J. J. Trujillo-Serrato, O. R. Suárez-Castillo, **A. Ariza-Castolo**, and M. S. Morales-Ríos. Structure-selectivity relationship in the cleavage of

spirocyclopropyl oxindoles: An experimental and theoretical investigation. *J. Mol. Struct.* (2017) 1145: 184-191

C. Garcias Morales, D. Romero Borja, J. L. Maldonado, A. E. Roa, M. Rodríguez, J. P. García Merinos and **A. Ariza Castolo**. Small Molecules Derived from Thieno[3,4-c]pyrrole-4,6-dione (TPD) and Their Use in Solution Processed Organic Solar Cells, *Molecules*. *Molecules*. (2017) 22: 1-15.

T. Guerrero, **R. Santillán**, H. García Ortega, O. G. Morales Saavedra, N. Farfán and P. G. Lacroix. Bis 4 nitroanilines in interactions through a π conjugated bridge conformational effects and potential molecular switches. *New Journal of Chemistry*. (2017) 20(41): 11881-11890.

E. Juaristi, G. dos Passos Gomes, A. O. Terentev, R. Notario and I. V. Alabugin. Stereoelectronic Interactions as a Probe for the Existence of the Intramolecular α -Effect. *J. Am. Chem. Soc.* (2017) 139: 10799-10813. 0002-7863.

J. M. Landeros, and **E. Juaristi**. Mechanochemical Synthesis of Dipeptides Using Mg-Al Hydrotalcite as Activating Agent under Solvent-Free Reaction Conditions. *Eur. J. Org. Chem.* (2017) 687-694.

A. Obregón-Zúñiga, M. Guerrero-Robles and **E. Juaristi**, Chiral Imidazolium Ionic Liquids Derived from (S)-Prolinamine as Organocatalysts in the Asymmetric Michael Reaction and Michael-Aldol Cascade Reaction under Solvent-Free Conditions. *Eur. J. Org. Chem.* (2017) 2692-2697.

A. Obregón-Zúñiga and **E. Juaristi**. (2S,4R)-Hyp-(S)-Phe-OMe dipeptide supported on imidazolium tagged molecules as recoverable organocatalysts for asymmetric aldol reactions using water as reaction medium. *Tetrahedron*. (2017) 73: 5373-5380. 0040-4020.

A. Obregón-Zúñiga, M. Milán, and **E. Juaristi**. Improving the Catalytic Performance of (S)-Proline as Organocatalyst in Asymmetric Aldol Reactions in the Presence of Solvate Ionic Liquids. Involvement of a Supramolecular Aggregate. *Org. Lett.* (2017) 19: 1108-1111. 1523-7060.

M. A. Ortega-Rojas, J. D. Rivera-Ramírez, C. G. Ávila-Ortiz, **E. Juaristi**, F. González-Muñoz, E. Castillo and J. Escalante, J. One-Pot Lipase-Catalyzed Enantioselective Synthesis of (R)-(-)-N-Benzyl-3- (benzylamino)butanamide: The Effect of Solvent Polarity on Enantioselectivity. *Molecules*. (2017) 22: 2189-2196. 0021-2148.

M. Pérez-Venegas, G. Reyes-Rangel, A. Neri, J. Escalante and **E. Juaristi**. Mechanochemical enzymatic resolution of N-benzylated- β 3-amino esters. *Beilstein J. Org. Chem.* (2017) 13: 1728-1734. 1860-5397.

G. Reyes-Rangel, *J. Vargas-Caporalí* and **E. Juaristi**. Asymmetric Michael addition reaction organocatalyzed by stereoisomeric pyrrolidine sulfinamides under neat conditions. A brief study of self-disproportionation of enantiomers. *Tetrahedron*. (2017) 73: 4707-4718. 0040-402

C. Silva-Cuevas, *C. Pérez-Arrieta*, *L. A. Polindara García* and **J. A. Lujan-Montelongo**. Sulfonyl halide synthesis by thiol oxyhalogenation using NBS/NCS – iPrOH. *Tetrahedron Lett.* (2017) 58: 2244 – 2247.

J. Vargas-Caporalí and **E. Juaristi**. Fundamental Developments of Chiral Phase Chromatography in Connection with Enantioselective Synthesis of β -Amino Acids. *Isr. J. Chem.* (2017) 57: 896-912. 0021- 2148.

Capítulos de Investigación Original publicados en extenso en libros especializados:

C. Cruz-Hernández, *J. M. Landeros* and **E. Juaristi**. Synthesis of Diazaphosphol-2-oxides and Their Derivatives: Applications in Asymmetric Synthesis. Italian Chemical society: Roma Italia 23: 324-339: 2019. Capítulo 16.

Capítulos de investigación original publicados en libros:

E. Juaristi and *R. Notario*. Theoretical Evidence for the Relevance of $n(S) \rightarrow \sigma^*(C-P)$, $\sigma(C-S) \rightarrow \sigma^*(C-P)$, and $n(F) \rightarrow \sigma^*(C-X)$ ($X = H, C, O, S$) Stereoelectronic Interactions. *Stereochemistry and Global Connectivity: The Legacy of Ernest Eliel.* (2017) 1258(1): 3-18.

J. A. Luján-Montelongo and *F. F. Fleming*. Oxonitriles: Four-step Ozonolysis, Aldol, Conjugate Addition, and Enolate Acylation Sequence. *Comprehensive Organic Chemistry Experiments for the Laboratory Classroom.* (2017) 685-689

Libros especializados:

E. Juaristi, *E. y H. Rasgado-Flores*. *La Suite de los Elementos.* (2017). ISBN 978-607-724-213-0.

Z. Wang, *U. Wille*, *U. and E. Juaristi*. *Encyclopedia of Physical Organic Chemistry.* (2017) ISBN 978-1-118- 47045-9.

Patentes:

Fleming, *F. F.* and **Lujan-Montelongo, J.A.** Composition, synthesis, and use of new arylsulfonyl isonitriles. : 2018.

Trabajos presentados en Congresos:

Los siguientes trabajos fueron presentados en la 6a Reunión de Resonancia Magnética Nuclear Experimental, modalidad virtual 2020-11-12 - 2020-11-13 Oaxaca, México:

A. Hernández Tanguma y **A. Ariza Castolo**. Aplicaciones recientes de los métodos de Coherencia Cuántica Múltiple Intermolecular (IMQC).

A. Ariza Castolo y *O. J. Quintana Romero*. Experimentos foto-CIDNP en RMN.

Trabajos presentados en el 54° Congreso Mexicano de Química y 38° Congreso Nacional de Educación Química 2019-09-30 - 2019-10-03 Complejo Cultural Universitario BUAP, Puebla, Puebla México:

A. E. Cruz-Jiménez, P. E. Hernández-González y **J. A. Lujan-Montelongo**. Desoxianación de compuestos 1,3-dicarbonílicos utilizando cianoforniatos de alquilo. p. 183-187.

A. Vela, y **J. A. Lujan-Montelongo**. Optimización y estudio mecanístico de la desoxigenación de sulfóxidos con X-/HCOOOH. p. 192-197.

C. Silva Cuevas and **J. A. Luján Montelongo**. Studies towards the installation of quaternarized stereocenters on nitriles. p. 199-202.

O. A. Valle González, R. Sánchez López y **J. A. Luján Montelongo**. Tioacetatos como S-nucleófilos subyugados en reacciones tipo Mannich. p. 203-238.

Los siguientes trabajos fueron presentados en la XV Reunión de la Academia Mexicana de Química Orgánica 2019-04-08 - 2019-04-12 Cuernavaca, Morelos, México

A. M. Méndez Flores, **A. Ariza Castolo**, C. M. Pérez Berumen, F. N. de la Cruz Durán, M. A. Rodríguez y C. Garcia Morales. Síntesis de Chalconas y caracterización óptica.

J. C. Martínez García, M. T. Cortés Picasso, **A. Ariza Castolo** y J. A. Guerrero Álvarez. Análisis del efecto Hammett, cinéticas de reacción y estabilidad en HCl de carboxilatos de estaño por RMN

O. J. Quintana Romero, A. J. Ballesteros, M. Guerrero Vélez, I. León López y **A. Ariza Castolo**. (Diacetoxiyodo)benceno, desde fotocatalizadores hasta reacciones de oxidación.

Los siguientes trabajos fueron presentados en la 5a. Reunión de Resonancia Magnética Nuclear Experimental Escuela Internacional de RMN 2019-09-05 - 2019-09-06 Cuernavaca Morelos, México:

A. Hernández Tanguma y **A. Ariza Castolo**. Medición de las constantes de acoplamiento $1J_{CH}$ de 1,3-dibencil-2-(3-nitrofenil)imidazolidina mediante métodos en una dimensión.

A. F. Cano Pérez, K.Mota Díaz, A. Portillo Morales, J. Camacho Ruiz, *A. Hernández Tanguma* y **A. Ariza Castolo**. Demostración por RMN de puentes de hidrógeno, equilibrio tautomérico e inclusión.

Presentados en el 53° Congreso Mexicano de Química y 37° Congreso Nacional de Educación Química 2018-10-02 - 2018-10-05 Instituto Politécnico Nacional. Ciudad de México, México:

E. Cortés-Román, *C. Silva-Cuevas* and **J. A. Luján-Montelongo**. Design and synthesis of nitrilic building blocks derived from the chiral pool. p. 840-842. ISSN: 2448-914X.

A. Salazar-Bello, *O. A. Valle-González* and **J. A. Luján-Montelongo**. Sulfonylnitrile-based Olefination for Accessing Structurally Diverse Alkenyl Nitriles. p. 855-856. ISSN: 2448-914X.

C. Silva-Cuevas, H. L. Mendoza-Figueroa, A. C. Sánchez-Chávez, L. A. Polindara-García, S. Oliveros-Cruz, M. D. Torres-Cardona and **J. A. Luján-Montelongo**. A Regioselective Synthesis of Lutein Monoesters. p. 683-685. ISSN: 2448-914X.

O. A. Valle-González and **J. A. Luján-Montelongo**. Stereoselective Synthesis of Alkenylisonitriles through Ramberg-Bäcklund olefination. p. 905-908. ISSN: 2448- 914X.

Los siguientes trabajos fueron presentados en la XIV Reunión de la Academia Mexicana de Química Orgánica 2018-03-22 - 2018-03-23 Mérida, Yucatán:

A. M. Méndez Flores, C. Pérez Berúmen, A. Espinosa Roa y **A. Ariza Castolo**. Diseño y Síntesis de moléculas orgánicas con propiedades optoelectrónicas asistida por microondas.

A. Ariza Castolo, L. Muñoz Gambino y *O. J. Quintana Romero*. Reacciones de α -oxidación de compuestos carbonilo.

J. S. Saucedo Aguilera, **A. Ariza Castolo**, F. N. de la Cruz Duran, A. Sáenz Galindo, M. Rodríguez y C. Garcías Morales. Síntesis de iminas y su evaluación como sensores de Iones metálicos en medio acuoso.

O. J. Quintana Romero y **A. Ariza Castolo**. Método fácil y simple para obtener α -acetoxicetonas.

Los siguientes trabajos fueron presentados en el 4a Reunión de Resonancia Magnética Nuclear Experimental "Escuela Internacional de RMN" 2018- 09-06 - 2018-09-08 Mineral de la Reforma, Hgo., México:

A. Ariza Castolo. Lo esencial en resonancia magnética multinuclear.

A. Ariza Castolo y *O. J. Quintana Romero*. Experimentos de resonancia magnética nuclear óptico.

C. Ávila Montiel, E. Islas Trejo, A. Tapia Benavides, H. Tlahuext , **A. Ariza Castolo** y M. Tlahuextl. Estimación de pKa de amino amidas mediante RMN de ^1H y ^{13}C .

L. Muñoz Gambino y **A. Ariza Castolo**. Efecto del Sustituyente en el Desplazamiento Químico de α -Cetoesteres.

Los siguientes trabajos fueron presentados en el 52º Congreso Nacional de Química que tuvo lugar en Puerto Vallarta, Jal, México del 26 al 29 de septiembre de 2017.

P. E. Hernández-González, A. Tapia-Pineda, *C. Silva Cuevas* y **J. A. Luján Montelongo**. A green approach for the deoxygenation of sulfoxides. p. 87-88.

H. L. Mendoza-Figueroa, S. Oliveros y **J. A. Lujan-Montelongo**. Hacia una transformación eficiente de una mezcla enriquecida con luteína para la obtención de trans-zeaxantina. p. 119-120.

C. Silva-Cuevas y **J. A. Lujan-Montelongo**. Stereochemical evaluation on alkylations of a potentially chiral nitrile building block. p. 89-90.

El siguiente trabajo fue presentado en el Cuarto Congreso Interinstitucional de Jóvenes Investigadores. Villahermosa, Tab., México. (2017):

L. R. Díaz-Corona, C. G. Ávila-Ortiz y **E. Juaristi**. Síntesis y Aplicación de alfa-beta-Dipéptidos como Organocatalizadores Quirales en la Reacción Tipo Michael Asimétrica en Ausencia de Disolvente.

Los siguientes trabajos fueron presentados en el IV Congreso Internacional de Química e Ingeniería Verde. Monterrey, N.L. México. (2017):

L. A. Obregón-Zúñiga, M. Milán y **E. Juaristi**. Mejorando la Actividad Organocatalítica de la (S)-Prolina en Reacciones Aldólicas Asimétricas Empleando Líquidos Iónicos Solvato.

L. A. Obregón-Zúñiga y **E. Juaristi**. Nuevos Líquidos Iónicos Quirales de Imidazolio como Organocatalizadores en la Reacción Michael Asimétrica y en la Reacción Cascada Michael-Aldólica.

Trabajo presentado en la 13a reunión internacional de investigación en productos nanutales. Morelia, Mich., México. (2017):

J. L. Cortes Muñoz, J. P. García Merinos, M. A. Gómez Hurtado, J. B. González Campos, J A. Aviña Verduzco, **R. Santillán**, M. A. Rodríguez y Y. López, Estructuras esferoidales fluorescentes vía acoplamiento de Sonogashira.

Estudiantes graduados:

Mario Pérez Venegas. "Activación mecánica como alternativa verde en biocatálisis y síntesis asimétrica". Química. Director(es) de tesis: Dr. Eusebio Juaristi y Cosío. 2020-08-21.

Carlos Alberto Cruz Hernández. "Diseño, Síntesis y Evaluación de Organocatalizadores a Base de Fosforamidas Quirales Incorporando el Fragmento de (R)- o (S)-Prolina para Procesos en Medio Acuoso." Doctor en Ciencias en la especialidad de Ciencias Químicas. Director(es) de tesis: Dr. Eusebio Juaristi.

Luis Arturo Obregón Zúñiga. "Diseño y síntesis de líquidos iónicos quirales derivados de aminoácidos y su aplicación como organocatalizadores en reacciones orgánicas asimétricas". Director de tesis: Dr. Eusebio Juaristi Cosío. Diciembre 14 de 2017.

Química Supramolecular:

M. Romero Ávila, A. F. León-Rojas, P. G. Lacroix, I. Malfant, N. Farfán, R. Mhanna, **R. Santillán**, G. Ramos-Ortiz and J. P. Malval. Two Photon Triggered NO Release via a Ruthenium Nitrosyl Complex with a Star Shaped Architecture. The Journal of Physical Chemistry : 6487-6491: 2020

K. Olszewska, I. Jastrzebska, A. Lapinski, M. Gorecki, **R. Santillán**, N. Farfán and T. Runka. Steroidal Molecular Rotors with 1,4-Diethynylphenylene Rotators: Experimental and Theoretical Investigations Toward Seeking Efficient Properties. *The Journal of Physical Chemistry* : 9625-9635: 2020.

M. Farfán Paredes, O. González Antonio, D. E. Tahuilan-Anguiano, J. Peón, **A. Ariza**, P. G. Lacroix, **R. Santillán** and N. Farfán. Physicochemical and computational insight of ^{19}F NMR and emission properties of meso-(o-aryl)-BODIPYs. *Royal Society of Chemistry* : 19459-19471: 2020.

T. Pawlak, D. Czajkowska- Szczykowska, I. Jastrzebska, **R. Santillán**, B. Seroka, J. Maj, J. W. Morzycki, P. Labra-Vázquez, N. Farfán, G. D. Bujacz and M. J. Potrzebowski. Influence of Hydrogen/Fluorine Substitution on Structure, Thermal Phase Transitions, and Internal Molecular Motion of Aromatic Residues in the Crystal Lattice of Steroidal Rotors. *Crystal Growth Design* : 2202-2206: 2020.

P. Labra-Vázquez, R. Flores-Cruz, A. Galindo-Hernández, J. Cabrera-González, C. Guzmán Cedillo, A. Jiménez-Sánchez, P. G. Lacroix, **R. Santillán**, N. Farfán and R. Núñez. Tuning the Cell Uptake and Subcellular Distribution in BODIPY Carboranyl Dyads An Experimental and Theoretical Study. *Chemistry A European Journal* : 16530-16540: 2020.

I. Rojas-León, H. Alnasr, K. Jurkscha, M. G. Vásquez-Ríos, G. Gómez-Jaims, H. Hopfl, I. F. Hernández-Ahuactz and **R. Santillán**. Formation of Metal-Based 21- and 22-Membered Macrocycles from Dinuclear Organotin Tectons and Ditopic Organic Ligands Carrying Carboxylate or Dithiocarbamate Groups. *Organometallics* (38): 2443: 2019.

M. E. Ochoa, R. Arcos-Ramos, P. I. Ramírez-Montes, H. Hopfl, M. A. Leyva, N. Farfán and **R. Santillán**. Asymmetric Molecular Rotors Based on Steroidal Fragments. *Organic Building Blocks Displaying Versatile Supramolecular Steroid-Stacking Interactions. Crystal Growth and Design* (19): 6114-6126: 2019.

R. A. Luna-Ixmatlahua, A. Carrasco-Ruiz, R. Cervantes, **A. Vela** and **J. Tiburcio**. An Anionic Ring Locked into an Anionic Axle: A metastable Rotaxane with Chemically Activated Electrostatic Stoppers. *Chemistry - A European Journal*. 25: 10042- 10047: 2019.

A. Jiménez Urías, A. Zaavik Lugo Aranda, M. Miranda Olvera, N. Farfán, **R. L. Santillán Baca**, R. Arcos Ramos and M. P. Carreón Castro. Synthesis and characterization of dumbbell-like BTD-based derivatives to engineer organic building blocks in solid-state. *Journal of Molecular Structure* 1153: 34-41: 2018.

M. E. Ochoa, P. Labra Vázquez, N. Farfán and **R. Santillán**. Gyroscopes with Cell-like Bilayer Self-Assemblies. *Crystal Growth and Design* 18: 2795–2803: 2018.

T. Runka, K. Olszewska, P. Fertsch, A. Lapinski, I. Jastrzebska, **R. Santillán** and N. Farfán. Vibrational spectroscopic characterization of cyclic and acyclic molecular rotors with 1,4-

diethynylphenylene-d4 rotators. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* 192: 393–400: 2018.

N. Aguilar Valdez, M. Maldonado Domínguez, R. Arcos Ramos, M. Romero Ávila, R. **R. Santillán**, and N. Farfán. Synthesis of steroidal molecular compasses: exploration of the controlled assembly of solid organic materials. *CrystEegCmm*. (2017) 19(13): 1771-1777.

O. Cruz Vásquez, L. J. Bernal Sánchez, R. Cervantes, J. Tiburcio and **A. Rojas**. Energetics and the molecular structure of an ion-paired supramolecular system in water. *Physical Chemistry Chemical Physics*. (2017) (19): 19334-19340.

D. Hernández Melo, R. Cervantes and **J. Tiburcio**. Shuttling Motion in a Host Guest Complex Triggered by Spiropyran to Merocyanine Reversible Chemical Transformation. *The Journal of Organic Chemistry*. (2017) (82): 4484-4488.

Trabajos Presentados en Congresos:

Presentado en el 53° Congreso Mexicano de Química y 37° Congreso Nacional de Educación Química 2018-10-02 - 2018- 10-05 Instituto Politécnico Nacional. Ciudad de México, México:

J. Tiburcio. Moléculas que funcionan como motores lineales artificiales.

El siguiente trabajo fue presentado en el Simposio Química Inorgánica Supramolecular. 2018-01-29 - 2018-01-30 Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Química:

J. Tiburcio. Reversible mechanical bonds: development of artificial linear motors and supramolecular polymeric networks.

El siguiente trabajo fue presentado en el 13th International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry. ISMSC 2018 2018-07-08 - 2018-07-13 Québec, Canadá:

J. Tiburcio. Reversible Mechanical Bonds.

El siguiente trabajo fue presentado en el Seminario "Jacobo Gómez Lara" 2018-10-25 - 2018-10-25 Universidad de Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas:

J. Tiburcio. Complejos supramoleculares que funcionan como máquinas a nivel molecular.

Estudiantes gradados:

Miguel Ángel Soto Muñoz. "Sistemas supramoleculares poliméricos ensamblados por cationes piridino y macromoléculas derivadas de éter corona". Director de tesis: Dr. Jorge Tiburcio Báez. Enero 9 de 2017.

Química de Coordinación y organometálica:

A. Cruz-Navarro, D. Hernández-Romero, **A. Flores-Parra**, J.M. Rivera, S. E. Castillo-Blum and R. Colorado-Peralta. Structural diversity and luminescent properties of coordination complexes obtained from trivalent lanthanide ions with the ligands: tris((1H-benzo[d]imidazol-2-yl)methyl)amine and 2,6-bis(1H-benzo[d]imidazol-2-yl)pyridine. *Coordination Chemistry Reviews*. 2021, 427, 213587.

D. Plaza-Lozano, A. Conde-Gallardo and **J. Olguín**. Spin Crossover vs. High-Spin Iron(II) Complexes in N4S2 Coordination Sphere Containing Picoyl-Thioether Ligands and NCE (E=S, Se and BH3) Co-Ligands. *Europ. J. Inorg. Chem.* . Chem. 2021, 2846-2856.

G. L. Jiménez, **M. J. Rosales-Hoz**, M. A. Leyva, J. L. Reyes-Rodríguez, U. Galindo-García and C. Falcony. Structural analysis of an Europium-sodium complex containing 2-thenyltrifluoroacetone and succinimide as ligands, a highly photoluminescent material. *J. Molec. Struct.* (2021) 1228, 129778.

J. L. Silva-Sánchez, V. González-López, M. A. Leyva and **M. J. Rosales-Hoz**. Unusual $h^1(S)$ coordination of dibenzothiophene to trinuclear acetylide clusters $[(\mu-H)M_3(CO)_9(CCSiMe_3)]$ (M=Ru, Os). *J. Organometal. Chem.* (2021) 121766.

A. Cruz-Navarro, D. Hernández-Romero, **A. Flores-Parra**, J. M. Rivera, S. E. Castillo-Blum and R. Colorado-Peralta. Structural diversity and luminescent properties of coordination complexes obtained from trivalent lanthanide ions with the ligands: tris((1H-benzo[d]imidazol-2-yl)methyl)amine and 2,6-bis(1H-benzo[d]imidazol-2-yl)pyridine. *Coord. Chem. Rev.* 427: 213587: 2020.

A. Reyna-Madrigal, M. Cervantes-Vásquez, N. Ortiz-Pastrana and **M. A. Paz-Sandoval**. Cyclooctadiene iridium complexes with phosphine, oxoand aza-pentadienyl ligands. *Journal of Organometallic Chemistry* 930(121600): 1 - 17: 2020.

D. Plaza Lozano, D. Morales Martínez, **F. J. González** and **J. Olguín**. Homoleptic Mononuclear Tris Chelate Complexes of FeII CoII NiII and ZnII Based on a Redox Active Imidazolyl 2 thione Ligand Structural and Electrochemical Correlation. *Eur. J. Inorg. Chem.* 2020 : 1562-1573: 2020.

J. L. Olguín Talavera. Unusual metal centres/coordination spheres in spin crossover compounds. *Coordination Chemistry Reviews*, 2020 (213148): 30: 2020. <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2019.213148>.

A. Reyna-Madrigal, N. Ortiz-Pastrana and **M. A. Paz-Sandoval**. "Cyclooctadiene iridium complex with phosphine and pentadienyl ligands". *J. Organometal. Chem.* 886: 13-6: 2019.

E. G. Rojo Gómez, A. I. Munguía Lara, D. O. González Abrego, G. Sánchez Cabrera, J. G. Alvarado Rodríguez, M. G. Hernández Cruz, **M. J. Rosales Hoz**, N. Andrade López and F. J. Zuno Cruz. Reactivity and structural patterns of phenylphosphines in acetylene and acetylide carbonyl trinuclear ruthenium clusters. *Polyhedron* 161: 251–260.: 2019.

J. M. Sánchez viveros, J. Bucio Ortega, N. Ortiz Pastrana and **J. L. Olguín Talavera**. Mononuclear complexes of FeII, CoII and CoIII containing imine-based ligands of 8-aminoquinoline and 7-aminoindazole: spin state tuning of FeII complexes in solution. *New Journal of Chemistry* 43: 9776-9783: 2019.

R. Colorado-Peralta, R. Peña-Rodríguez, M. A. Leyva-Ramírez, **A. Flores-Parra**, M. Sánchez, I. Hernández-Ahuactzi, L. E. Chiñas, D. J. Ramírez and J. M. Rivera. Metal-organic structures with formate and sulfate anions: Synthesis, crystallographic studies and hydrogen storage by PM7 and ONIOM. *J. Mol. Struct* 1189: 210-218: 2019.

K. Sánchez-Sánchez, A. A. Castillo-García, M. Cervantes-Vásquez, N. Ortiz-Pastrana and **M A.Paz-Sandoval**. "Butadienesulfonyl iridium complex with phosphine and carbonyl ligands". *J. Organometal. Chem.* 900: 120929 (1-12): 2019.

V. González López, I. Torres Sandoval, A. L. Carrasco González, A. Elías Jiménez, **M. J. Rosales Hoz**, J. Cruz Borbolla, F. J. Zuno Cruz, G. Sánchez Cabrera and C. Jardínez. CO substitution vs C-Si cleavage in the reactions of (u-H) $M_3(CO)_9(CCSiR_3)$ (M=Ru, R=Me, Ph; M=Os, R=Me) with tertiary phosphines: Experimental and theoretical studies. *Inorganica Chimica Acta* 492: 8-17.: 2019.

A. Cruz-Navarro, J. M. Rivera, J. Durán-Hernández, S. Castillo-Blum, **A. Flores Parra**, M. Sánchez, I. Hernández-Ahuactzi and R. Colorado-Peralta. Luminescence properties and DFT calculations of lanthanide(III) complexes (Ln = La, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy) with 2,6-bis(5-methyl-benzimidazol-2-yl)pyridine. *J. Mol Struct.* 1164: 209-2016: 2018.

A. Esparza-Ruiz, A. Peña-Hueso, R. Quijano-Quiñones and **A. Flores-Parra**. Penta and hexacoordinated aluminum (III) compounds containing benzotriazole and benzimidazole derivatives as ligands. *Inorganica Chimica Acta* 471: 1-7: 2018.

G. Durán-Solares, W. Fugarolas-Gómez, N. Ortiz-Pastrana, H. López-Sandoval, T. O. Villaseñor-Granados, **A. Flores-Parra**, P. J. Altmann and N. Barba-Behrens. Lone pair interactions on the stabilization of intra and intermolecular arrangements of coordination compounds with 2-methyl imidazole and benzimidazole derivatives. *Journal of Coordination Chemistry* 71(11): 1935-1958: 2018. <https://doi.org/10.1080/00958972.2018.1494269>.

L. J. Hernández-Benítez, Pamela Jiménez-Cruz, Karla E. Cureño-HernánAlejandro Solano-Peralta, Marcos Flores-Álamo, **Angelina Flores-Parra**, Isabel Gracia-Mora and Silvia E. Castillo-Blum. [VIVO]2434343 complexes: Structure, unusual magnetic properties and cytotoxic effect. *Inorganica Chimica Acta* 480: 197-206: 2018.

M. Cervantes-Vásquez, A. Castillo-García, N. Ortiz-Pastrana and **M. A. Paz Sandoval**. Electrophilic and nucleophilic addition reactions of $\text{Ir}(1\text{-}2,5\text{-h-CH}_2\text{CHCHCHSO}_2)(\text{PMe}_3)_3$ with HBF_4 , acetonitrile, CO, pyridine and methanol: haptotropic behavior of the butadienesulfonyl ligand. *J. Organometal. Chem.* (2017) 852: 8-19.

J. I. de la Cruz-Cruz and **M. A. Paz-Sandoval**. Examination of different nucleophiles binding to the cationic $[(\text{HMB})\text{Ru}(1\text{-}5\text{-}\eta\text{-butadienesulfonyl})]\text{X}$ ($\text{X} = \text{OTf}, \text{BF}_4$) complexes: Novel phosphonium-1-3- η -butenyl sulfonyl complexes and cationic N, S, O adducts. *J. Organometal. Chem.* (2017) 834: 28-39.

A.S. Estrada-Montaño, O. R. Reyes-López, *V. González-López*, M. A. Leyva, A. L. Carrasco, **A. Vela**, and **M. J. Rosales-Hoz**. The reactions of $[(\eta\text{-H})\text{M}_3(\text{CO})_9(\text{CCSiMe}_3)]$ ($\text{M}=\text{Fe}, \text{Ru}$) with thiols: Cleavage of M-M and formation of M-S bonds in isomeric structures. *Journal of Organometallic Chemistry*, (2017) 849: 31-37.

D. O. González Abrego, F. J. Zuno Cruz, M. Carpio Granillo, N. Andrade López, J. Cruz Borbolla, C. Martínez Macías, D. Mendoza Espinosa, **M. J. Rosales Hoz**, M. A. Leyva, M.A., J. R. Torres Lubián, J. A. López Jiménez, V. VJancik, V. and G. Sánchez Cabrera. Synthetic, spectroscopic and structural behavior of unsaturated functionalized N-heterocyclic carbene complexes of group 11. *Polyhedron* (2017) 137: 97-111.

M. E. Londoño-Lemos, P. Martínez-Bulit, H. López-Sandoval, I. Gracia-Mora, T. Castro-Jiménez, A. M. Duarte-Hernández, **A. Flores-Parra**, R. Contreras, R. and N. Barba-Behrens, Transition metal coordination compounds of an antiobesity serotonergic ligand: spectroscopic characterization and adipogenesis activity. *Trans. Metal Chem.* (2017) 42: 587-59.

R. Pretorius, **J. Olguín** and M. Albrecht, Carbohydrate-Functionalized 1, 2, 3-Triazolylidene Complexes for Application in Base-Free Alcohol and Amine Oxidation. *Inorganic Chemistry*. (2017) 12410-12420.

A. Moreno and **M. J. Rosales Hoz**, Crystal growth of inorganic, organic, and biological macromolecules in gels. *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials*. 63 (2017) 63–71.

M. Cuéllar Cruz, D. L. Hernández, I. Martínez Ángeles, N. Dimitri, M. Polentarutti, **M. J. Rosales Hoz** and A. Moreno. Biosynthesis of micro and nanocrystals of Pb II, Hg II and Cd II sulfides in four *Candida* species a comparative study of in vivo and in vitro approaches. *Microbial biotechnology*. (2017) 10: 405-42.

Trabajos presentados en Congresos:

Trabajo presentado en el 10° Encuentro de Química Inorgánica (EQI 2019) 2019-06-25 - 2019-06-28 Ixtaczoquitlán, Veracruz, México:

J. Bucio Ortega, A. Molina Rentería y **J. L. Olguín Talavera**. Versatilidad de complejos metálicos derivados de ligantes iminas: autoensamblado y esferas de coordinación inusuales.

Trabajo presentado en el 54° Congreso Mexicano de Química y 38° Congreso Nacional de Educación Química 2019-09-30 - 2019-10-03 Complejo Cultural Universitario BUAP, Puebla, Puebla México:

J. L. Silva Sánchez y **M. J. Rosales Hoz**. Estudio Experimental de Reactividad de Cúmulos Trinucleares de Rutenio con Ligantes Derivados de Furanos y Tiofenos.

Trabajo presentado en el Colloquium Spectroscopicum Internationale XLI 2019- 06-09 - 2019-06-14 Cd. De México, México:

M. J. Rosales Hoz. Nuclear Magnetic Resonance in Carbonyl Metal Clusters: theoretical and experimental studies en el Colloquium Spectroscopicum Internationale XLI 2019- 06-09 - 2019-06-14 Cd. De México, México.

Presentado en el 53° Congreso Mexicano de Química y 37° Congreso Nacional de Educación Química 2018-10-02 - 2018- 10-05 Instituto Politécnico Nacional. Ciudad de México, México:

J. L. Silva Sánchez, **M. J. Rosales Hoz**, J. Nochebuena, *U. Orozco Valencia* y **A. M. Vela Amieva**. Estudio teórico y experimental de reactividad de cúmulos trinucleares de rutenio y osmio con ligantes derivados de furanos y tiofenos.

Los siguientes trabajos fueron presentados en el Atlantic Basin Conference on Chemistry 2018-01- 23 - 2018-01-26 Cancún, Q.R. Méx., 23-26 Enero 2018:

F. J. Zuno Cruz, D. O. González Ábrego, G. Sánchez Cabrera, H. López Ruiz, **M. J. Rosales Hoz**, Marco A. Leyva Ramírez and J. R. Torres Luvian. Anchored metal polymers derived from metal complexes of the Group 11 with unsaturated N-heterocyclic carbene ligands. p. 1.

J. L. Silva Sánchez, **M. J. Rosales Hoz**, E. J. Aldeco and O. R. Reyes. Synthesis and Reactivity of Transition Metal Clusters containing functionalized alkynes as ligands.

Los siguientes trabajos fueron presentados en el 8° Encuentro de Química Inorgánica (EQI 2017) que tuvo lugar en Sonora, México del 5 al 8 de septiembre de 2017:

J. Olguín, J. y **M.A. Paz-Sandoval**. Efecto del brazo quelante y co-ligantes en la transferencia de hidrogeno catalítica de complejos de Ru y triazolilidinas.

Los siguientes trabajos fueron presentados en el 52° Congreso Nacional de Química que tuvo lugar en Puerto Vallarta, Jal, México del 26 al 29 de septiembre de 2017.

M. J. Rosales Hoz, *J. L. Silva Sánchez* y V. González López. Estudio experimental de reactividad de cúmulos trinucleares de rutenio con ligantes azufrados. p. 22-23.

J. Olguín. Efecto del brazo quelante y co-ligantes en la transferencia de hidrógeno catalítica de complejos de Ru₂(4,4'-bpy)₃ y azolilidinas

Electroquímica:

D. E. Ramírez-Chan, C. Frontana and **F. J. González.** Electrografting of Carbon Surfaces with Aliphatic Chains and its Effect on the Rectification of Ferrocene as Redox Probe in Solution. *ChemPhysChem*. 2021, 22, 944.

R. Fernández-Loyola, A.B. Hernández-Maldonado, J.A. Menchaca-Rivera, J.F. Perez-Robles, **O. Solorza-Feria**, G. G. Botte. Nanocomposites of multi-walled carbon nanotubes with encapsulated Cobalt. *Ceramics International* 47(10A) (2021) 13604-13612, <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2021.01.219>. ISSN 02728842

H. Cruz-Martínez; A. Cervantes-Flores; **O. Solorza-Feria**; **P. Calaminici**; D. I. Medina. On the growth behavior, structures, energy and magnetic properties of bimetallic M_nPd_n (M=Co,Ni; n = 1-10) clusters. (TCAC-D-20-00372). *Theoretical Chemistry Accounts*, (2021) 140 (5)45 . <https://doi.org/10.1007/s00214-021-02738-9>. ISSN 1432-2234

C. D. Galindo Uribe, **P. Calaminici**, H. Cruz-Martínez, *D. Cruz-Olvera*, and **O. Solorza Feria**. First-Principle Study of the Structures, Growth Pattern, and Properties of (Pt₃Cu)_n, n=1-9, Clusters". *J. Chem. Phys.* (2021), 154 154302. <https://doi.org/10.1063/5.0045203>. ISSN 1089-7690

H. Cruz-Martínez, H. Rojas-Chávez, P.T. Matadamas-Ortiz, J.C. Ortiz-Herrera, E. López-Chávez, **O. Solorza-Feria**, D. I. Medina. Current progress of Pt-based ORR electrocatalysts for PEMFCs: An integrated view combining theory and experiment. *Materials Today Physics*, (2021), 19:100406. <https://doi.org/10.1016/j.mtphys.2021.100406>. ISSN 1369-7021

C.A. Ramírez-Herrera, *M.M. Tellez-Cruz*, J. Pérez-González, **O. Solorza-Feria**, A. Flores-Vela and J.G. Cabañas Moreno. Enhanced mechanical properties and corrosion behavior of polypropylene/multi-walled carbon nanotubes/carbon nanofibers nanocomposites for application in bipolar plates of proton exchange membrane fuel cells. *Int. J. Hydrogen Energy*. (2021), 46 (51):26110-26125. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.04.125>. ISSN: 0360-3199

A. Barjola; J. L. Reyes-Rodríguez; **O. Solorza-Feria**, E. Gimenez and V. Compañ. A Novel SPEEK-based Proton Exchange Nanocomposite Membrane Containing Zeolitic Imidazolate Framework (ZIF-67) Nanoparticles for PEMFC Intermediate Temperatures. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, (2021), 60 (25): 9107-9118. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.1c01780>. ISSN print; 0888-5885; on line 1520-5045.

D. Morales-Martínez, L. Lartundo Rojas and **F. J. González.** Mechanistic Aspects on the Electrografting of Carbon Surfaces by Oxidation of Carboxylates Bearing Unsaturated Groups. *ChemElectroChem* 7: 4431-4439: 2020. [doi.org /10.1002/celc.202001096](https://doi.org/10.1002/celc.202001096).

E. Flores Rojas, J. L. Reyes Rodríguez, H. Cruz Martínez, H. Rojas Chávez, J. E. Samaniego Benítez and **O. Solorza-Feria**. Applications of cathodic Co_{100-X}Ni_X (X = 0, 30, 70, and 100) electrocatalysts chemically coated with Pt for PEM fuel cells. *Int. J. Hydrogen Energy* 45: 13726-13737: 2020. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.11.133>.

G. Hernández Flores, L. S. Vélez Pérez, O. Talavera Mendoza, C. Escamilla Alvarado, H. M. Poggi Varaldo, **O. Solorza-Feria** e J. A. López Díaz. Industrial acid mine drainage and municipal wastewater co-treatment by dual-chamber microbial fuel cells. *Int. J. Hydrogen Energy* 45: 13757-13766: 2020. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.12.037>.

H. Cruz Martínez, M.M. Téllez- Cruz, **O. Solorza-Feria**, **P. Calaminici** and D.I. Medina. Catalytic activity trends from pure Pd nanoclusters to M PdPt (M 1 4 Co, Ni, and Cu) core shell nanoclusters for the oxygen reduction reaction: A first principles analysis. *International Journal of Hydrogen Energy* : 3738-3745: 2020.

H. M. Alfaro López, M. A. Valdés Madrigal, H. Rojas Chávez, H. Cruz Martínez, M. A. Padilla Islas, *M. M. Téllez Cruz* and **O. Solorza-Feria**. A trimetallic Pt₂NiCo/C electrocatalyst with enhanced activity and durability for oxygen reduction reaction. *Catalysts* 10(170): 2020. <https://doi.org/10.3390/catal10020170>.

T. O. Villaseñor-Granados, G. Rodríguez-López, I. Ramos-García, D. Morales-Martínez, **F. J. González** and **A. Flores-Parra**. Linkage between fluorescence and electrochemical properties of imidazolium compounds in acetonitrile solution. *ChemPhysChem* 21: 1177-1183: 2020.

V. Ramírez-Delgado, D. Morales-Martínez and **F. J. González**. Associative and Proton Transfer Effects on the Voltammetric Behaviour of Chemically Grafted Films Bearing Nitrophenyl Groups. *Electroanalysis* 32: 404-411: 2020. DOI:10.1002/elan201900367.

A. Velázquez Osorio, D. Bahena Uribe, A. B. Soto Guzmán, M. A. Leyva, A. Rodríguez Castellanos, S. Citalán Cigarroa and **O. Solorza-Feria**. Tailoring the morphology of Ni-Pt nanocatalysts through the variation of Oleylamine and Oleic acid: a study on oxygen reduction from synthesis to fuel cell application. *Catalysis Science* 9: 2630-2650: 2019.

Y. Ávila-Torres, J. Acosta, L. Huerta, A. Toscano, **F. J. González** and N. Barba Behrens. Experimental data on synthesis and characterization of chiral dinuclear manganese (II-II) compounds as biomimetic model of the active center of catalase. *Data in brief* 28: 1-12: 2020. <https://doi.org/10.1016/j.dib.2019.104883>.

D. Martínez Casillas, **O. Solorza-Feria**, S. Mollá, Álvaro Montero, A. García Bernabé and V. Compañ. Polymer modified sulfonated PEEK ionomers membranes and the use of Ru₃Pd₆Pt as cathode catalyst for H₂/O₂ fuel cells. *Int. J. Hydrogen Energy* 44: 205- 305: 2019.

E. Flores Rojas, *O. X. Guerrero Gutiérrez* and **O. Solorza-Feria**. Versatile synthesis of CuPt nanocatalysts for oxygen reduction reaction. *Materials Letters* 239: 98-101: 2019. doi.org/10.1016/j.matlet.2018.12.072.

E. Terán Salgado, D. Bahena Uribe, P. A. Márquez Aguilar, *J. L. Reyes Rodríguez*, R. Cruz Silva and **O. Solorza-Feria**. Platinum nanoparticles supported on electrochemically oxidized and exfoliated graphite for the oxygen reduction reaction. *Electrochimica Acta* 298: 172- 185: 2019. doi.org/10.1016/j. electacta.2018.12.057.

G. Hernández Flores, A. Andrio, V. Compañ, **O. Solorza-Feria** and H. M. Poggi. Synthesis and characterization of organic agar-based membranes for microbial fuel cells. *J. Power Sources* 435(226772): 11: 2019.

H. Cruz Martínez, M. M. Téllez Cruz, H Rojas Chávez, C. A. Ramírez Herrera, **P. Calaminici** and **O. Solorza-Feria**. NiPdPt trimetallic nanoparticles as efficient electrocatalysts towards oxygen reduction reactions. *Int. J. Hydrogen Energy* 44: 12463-12469: 2019. doi.org/10.1016/j. ijhydene.2018.07.142.

H. Cruz Martínez, *M. M. Téllez Cruz, O. X. Guerrero Gutiérrez*, C. A. Ramírez Herrera, M. G. Salinas Juárez, A. Velázquez Osorio and **O. Solorza Feria**. Mexican contributions for the improvement of electrocatalytic properties for the oxygen reduction reaction in PEM fuel cells. *Int. J. Hydrogen Energy* 44: 12477-12491: 2019. doi.org/10.1016/j. ijhydene.2018.05.168.

M. Pérez González, S. A. Tomás, J. Santoyo Salazar, S. Gallardo Hernández, *M. M. Téllez Cruz* and **O. Solorza-Feria**. Solgel synthesis of Ag-loaded TiO₂-ZnO thin films with enhanced photocatalytic activity. *Journal of Alloys and Compounds* 779: 908-917: 2019. doi.org/10.1016/j. jallcom.2018.11.302.

C. A. Ramírez Herrera, J. Pérez González, **O. Solorza-Feria**, N. Romero Partida, A. Flores Vela and José G. Cabañas Moreno. Highest recorded electrical conductivity and microstructure in polypropylene-carbon nanotubes composites and the effect of carbon nanofibers addition. *Applied Nanoscience* 8(5): 1221-1232: 2018. DOI 10.1007/s13204-018-0750-8.

D. Morales-Martínez and F. J. González. Hydrogen bonding effects on the reversible reorganization of organic films electrografted on glassy carbon electrodes. *ChemElectroChem* 5: 1491- 1500: 2018.

O. Solorza-Feria, E. Flores Rojas, H Rojas Chávez, *M. M. Téllez Cruz, J. L. Reyes Rodríguez, J. G. Cabañas Moreno* and P. Calaminici. A combined DFT and experimental investigation of Pt-decorated CoNi nanoparticles for the oxygen reduction reaction. *Electrocatalysis* 2018(9): 662-67: 2018.

J. Barrera Cortés, L. Valdez Castro, D. S. Salgado Urías, L. P, García and **O. Solorza Feria**. Reducing the microcapsule diameter by microemulsion to improve the insecticidal activity of *Bacillus thuringiensis* encapsulated formulations. *Biocontrol Science and Technology*. (2017) (27): 42-57.

H. Cruz Martínez, *L. López Sosa*, **O.Solorza-Feria** and **P. Calaminici**. First-principles investigation of adsorption and dissociation of molecular oxygen on pure Pd, Ni-doped Pd and

NiPd alloy clusters. *Int. J. of Hydrogen Energy*. (2017) (42): 30310. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2017.08.041.

R. C. Dante, P. Chamorro Posada, J. Vázquez Cabo, O. Rubiños López, F. M. Sánchez Arévalo, L. Huerta, P. M. Ramos, L. Lartundo Rojas, C. F. Ávila Vega, E. D. Rivera Tapía, C. A. Fajardo Pruna, A. J. Ávila Vega and **O. Solorza Feria**, Nitrogen-carbon graphite-like semiconductor synthesized from uric acid. *Carbon*. (2017) 121: 368-379.

R. C. Dante, F. M. Sánchez Arévalo, L. Huerta, F. Muñoz Bisesti, D. Marquez, P. M. Ramos, L. Lartundo Rojas and **O. Solorza Feria**. Photocatalytic activity of a new composite material of Fe (III) oxide nanoparticles wrapped by a matrix of polymeric carbon nitride and amorphous carbon. *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanosreuctures*. (2017) 25: 630-636.

F. Godínez Salomón, C. P. Rhodes, K. Suárez Alcantara, Z. Qiushi, S. E. Canton, H. A. Calderon, J. L. Reyes Rodríguez, M. A. Leyva and **O. Solorza-Feria**. Tuning the Oxygen Reduction Activity and Stability of Ni(OH)₂PtC Catalysts through Controlling Pt Surface Composition, Strain, and Electronic Structure. *Electrochimica Acta*. (2017) 247: 958-96.

O. X. Guerrero Gutiérrez, **O. Solorza Feria** and P. B. Balbuena. First-principles investigation of Pd₃Bi as a catalyst for the oxygen reduction reaction. *Int. J. Hydrogen Energy* 2017 42: 30359-30363.

G. Hernández Flores, H. M. Poggi Varaldo, T. Romero Castañón, **O. Solorza-Feria** and N. Rinderknecht Seijas. Harvesting energy from leachates in microbial fuel cells using an anion exchange membrane. *Int. J. Hydrogen Energy*. (2017) 42: 30374-30382.

G. Hernández Flores, **O. Solorza-Feria** and H. M. Poggi Varaldo. Bioelectricity generation from wastewater and actual landfill leachates: A multivariate analysis using principal component analysis. *Int. J. Hydrogen Energy*. (2017) (42): 20772-20782.

J. L. Reyes Rodríguez, J. Escorihuela, A. García Bernabé, E. Giménez and **O. Solorza Feria**. Proton conducting electrospun sulfonated polyether ketone graphene oxide composite membranes. *RSC Advances*. (2017) 1039-1048.

M. M. Tellez Cruz, M. A. Padilla Islas, M. Pérez González and **O. Solorza-Feria**. Comparative study of different carbon-supported Fe₂O₃-Pt catalysts for oxygen reduction reaction. *Environ Sci Pollut Res*. (2017) 24: 25682-25692

Capítulos de libros:

A. Rodríguez Castellanos, J. L. Díaz Bernabé, S. Citalán Cigarroa and **O. Solorza-Feria**. Development and applications of portable hydrogen PEM fuel cells systems. *Portable hydrogen energy systems* : 91-106: 2018. ISBN 97801281311282.

J. L. Reyes Rodríguez, H. Cruz Martínez, *M. M. Tellez Cruz*, A. Velázquez Osorio and **O. Solorza-Feria**. Fuel Cell Technologies. *Sustainable Energy Technologies* : 229-244: 2018. ISBN 9781138034389.

Patentes:

A.Rodríguez Castellanos, Julio César Magallón Martínez y **O. SolorzaFeria**. Modelo industrial de bastidor estructural para soporte de vehículo. 2019. Expediente MX/f/2018/000465. Folio MX/E2018/011055. Solicitud Febrero 15 de 2018. Título de Registro de Diseño industrial No. 55373.

Presentaciones en Congresos:

Memorias publicadas en extenso en las Memorias del XXXIV Congreso de la Sociedad Mexicana de Electroquímica 2019-06-02 - 2019-06-06 Querétaro, Querétaro.

D.E. Ramírez Chan y **F.J. González Bravo**. Influencia del catión del electrolito de soporte sobre la modificación covalente de superficies de carbono con grupos nitrofenilo. p. 1367-1376

D.E. Ramírez Chan y **F.J. González Bravo**. Formación de películas electrocatalíticas sobre carbono mediante la autooxidación de iones ferrocenoheptanoato. p. 1428- 1438.

El siguiente trabajo fue presentado en el XVIII International Congress of the Mexican Hydrogen Society 2018-09-18 - 2018-09-23 ESIQIE-IPN:

M. M. Téllez Cruz, M. A. Padilla Islas, H. Cruz Martínez, H. M. Alfaro López, María Guadalupe Salinas Juárez and **O. Solorza-Feria**. Pt₃Fe/C bimetallic alloy nanoparticles as electrocatalysts with improved activity for the oxygen reduction reaction.

Estudiantes Graduados:

Óscar Xavier Guerrero Gutiérrez. "Estudio teórico y experimental de electrocatalizadores con Bi basados en Pt y Pd para la reacción de reducción de oxígeno." Química. Director(es) de tesis: Dr. Omar Solorza Feria. 2020-06-25.

José Luis Reyes Rodríguez. "Síntesis y caracterización de nanopartículas tipo core-shell para la reacción de reducción de oxígeno en celdas de combustible poliméricas." Ciencias Químicas. Director(es) de tesis: Dr. Omar Solorza Feria. 2018-03-21.

Química Biológica:

Y. Posadas, L. Parra-Ojeda, C, Perez-Cruz and **L. Quintanar**. "Amyloid b perturbs Cu(II) binding to the prion protein in a site-specific manner: Insights into its potential neurotoxic mechanisms" *Inorg. Chem.* **2021**, *60*, *12*, 8958-8972. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.1c00846>

A. Arenaza-Corona, M. D. Couce-Fortunez, A.de Blas, D. Morales-Morales, **R. Santillán**, H. Hopfl, T. Rodríguez-Blas and V. Barba. Further Approaches in the Design of Antitumor Agents

with Response to Cell Resistance: Looking toward Aza Crown Ether-dtc Complexes. *Inorganic Chemistry* : 15120-15134: 2020

F. P. Garrido González and **T. Mancilla Percino**. Synthesis, docking study and inhibitory activity of 2,6-diketopiperazines derived from alfa-amino acids on HDAC8. *Bioorganic Chemistry* 102: 1-10: 2020. <https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2020.104080>.

J.A.M. De la Rosa, M. García Castañeda, T. Nishigaki, J. C. Gomora, **T. Mancilla Percino** and G. Ávila. Interaction of MDIMP with the Voltage-Gated Calcium Channels. *Molecular Pharmacology* 98: 211-221: 2020. <https://doi.org/10.1124/mol.120.119982>.

R. Aguayo-Ortiz, A. González Navejas, G. Palomino Vizcaíno, O. Rodríguez Meza, M. Costas, **L. Quintanar** and L. Domínguez. Thermodynamic Stability of Human D-Crystallin Mutants Using Alchemical Free-Energy Calculations. *J. Phys. Chem. B* 123: 5671-5677: 2019. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b01818>.

T. Mancilla Percino, J. E. Guzmán Ramírez, E. Mera Jiménez and C. R. Trejo Muñoz. Synthesis, characterization of nove isoindoliny- and bisoindolinyphenylboronic anhydrides. Antiproliferative activity on glioblastoma cells and microglial cells assays of boron and isoindolines compounds. *Journal of Organometallic Chemistry* 891: 35-43: 2019.

C. Sánchez López, G. Rossetti, **L. Quintanar** and P. Carloni. Structural Determinants of the Prion Protein N-Terminus and Its Adducts with Copper Ions. *International Journal of Molecular Sciences* 20: 18: 2019. <https://doi.org/10.3390/ijms20010018>.

N. González, *T. Arcos López*, A. König, **L. Quintanar**, M. Menacho Márquez, T. F. Outeiro and C. O. Fernández. Effects on alpha-synuclein posttranslational modifications on metal binding. *Journal of Neurochemistry* 150: 507-521: 2019. <https://doi.org/10.1111/jnc.1472>.

M. E. Aranda-Barradas, M. Márquez, **L. Quintanar**, J. Santoyo-Salazar, A. J. Espadas-Álvarez, D. Martínez-Fong and E. García-García. Development of a Parenteral Formulation of NTS-Polyplex Nanoparticles for Clinical Purpose. *Pharmaceutics* (5): 10: 2018. <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics10010005>.

J. A. Domínguez-Calva, C. Haasse-Pettingell, E. Serebryany, J. A. King and **L. Quintanar**. A histidine switch for Zn-induced aggregation of gamma-crystallins reveals a metal-bridging mechanism that is relevant to cataract disease. *Biochemistry* 57: 4959-4962: 2018. <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.biochem.8b00436>.

J. A. Domínguez-Calva, M. L. Pérez-Vázquez, E. Serebryany, J. A. King and **L. Quintanar**. Mercury-induced aggregation of human lens gamma-crystallins reveals a potential role in cataract disease. *J. Biol. Inorg. Chem.* 23: 1105-1118: 2018. <https://doi.org/10.1007/s00775-018-1607-z>.

G. Rodríguez Uribe, N. Serafín Higuera, G. Damián Morales, E. M. Cortés Malagón, V. García Hernández, O. Verdejo Torres, J. P. Campos Blázquez, C. R. Trejo Muñoz, R. G. Contreras, R.

Ocadiz Delgado, C. Palacios Reyes, P. F. Lambert, A. E. Griep, **T. Mancilla Percino**, J. Escobar Herrera, E. Álvarez Ríos, C. Ugarte Briones, J. Moreno, P. Gariglio and J. Bonilla Delgado. HPV16-E6 Oncoprotein Activates TGF-Beta and Wnt/Beta-Catenin Pathways in the Epithelium-Mesenchymal Transition of Cataracts in a Transgenic Mouse Model. *BioMed Research International* : 1-7: 2018. <https://doi.org/10.1155/2018/2847873>.

I. Gentile, H. A. Garro, S. Delgado-Ocaña, N. Gonzalez, T. Strohäker, D. Schibich, **L. Quintanar**, L. Sambrotta, M. Zweckstetter, C. Griesinger, M. Menacho-Márquez and C. O. Fernández. Interaction of Cu(I) with the Met-X3-Met motif of alpha-synuclein: binding ligands, affinity and structural features. *Metallomics* 10: 1383: 2018. <https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2018/mt/c8mt00232k>.

C. *Sánchez-López*, C. O. Fernández and **L. Quintanar**. Neuroprotective alpha-cleavage of the human prion protein significantly impacts Cu(II) coordination at its His111 site. *Dalton Trans.* 47: 9274-9282: 2018. <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2018/dt/c7dt03400h>.

C. *Sánchez-López*, L. Rivillas-Acevedo, O. Cruz-Vásquez and **L. Quintanar**. "Methionine 109 plays a key role in Cu(II) binding to His111 in the 92-115 fragment of the human prion protein". *Inorg. Chim. Acta* 481: 87-97: 2018. <https://doi.org/10.1016/j.ica.2017.09.046>.

C. Garza-Lombo, Y. Posadas, **L. Quintanar**, M. E. Gonsebatt and R. Franco. Neurotoxicity linked to dysfunctional metal ion homeostasis and xenobiotic metal exposure: Redox signaling and oxidative stress. *Antioxid Redox Signal* 28(18): 1669-1703: 2018. ISBN 1523-0864. Mary Ann Liebert, Inc.. Primera. <https://doi.org/10.1089/ars.2017.7272>.

A. Campos-Ramírez, M. Márquez, **L. Quintanar** and L. F. Rojas-Ochoa. Effect of ionic strength on the aggregation kinetics of the amidated amyloid beta peptide ABeta(1-40) in aqueous solutions. *Biophys. Chem.* (2017) 228: 98-107.

M. C. Miotto, M. D. Pavese, **L. Quintanar**, M. Zweckstetter, C. Griesinger and C. Fernandez. Bioinorganic chemistry of Parkinson disease: Affinity and structural features of Cu(I) binding to the full-length Beta-synuclein protein. *Inorg. Chem.* (2017) 56: 10387-10395.

Patentes:

Genaro Rodríguez Uribe, Nicolás Serafín Higuera, José Bonilla Delgado, Cynthia Raquel Trejo Muñoz, Patricio Gariglio Vidal y **Teresa Mancilla Percino**. Título de Patente No. 373069. : 2020. La patente de referencia se otorga con fundamento en los artículos 1º y 2º fracción V, 6º fracción III, y 59 de la Ley de la Propiedad Industrial. 2020.

Trabajos presentados en el 54º Congreso Mexicano de Química y 38º Congreso Nacional de Educación Química 2019-09-30 - 2019-10-03 Complejo Cultural Universitario BUAP, Puebla, Puebla México:

F. P. Garrido González y **T. Mancilla Percino**. Reconocimiento molecular por docking entre una serie de 2,6-piperazindionas derivadas de (S)-alfa-aminoácidos y los residuos de aminoácidos del sitio catalítico de la HDAC8. p. 70-75.

J. E. Guzmán Ramírez y **T. Mancilla Percino**. Síntesis, caracterización de N-aminoftalimidias derivadas de alfa-aminoácidos y su evaluación teórica como inhibidoras de la historia desacetilasa 8 (HDAC8). p. 76-81.

Trabajo presentado en el 63° Annual Meeting of the Biophysical Society 2019-03-02 - 2019-03-06 Baltimore, Maryland:

J. A. M. de la Rosa, M. García-Castañeda, T. Nishigaki, J. C. Gomora, **T. Mancilla Percino** and G. Ávila. Pore blocking effect of isoindoline mdipm on calcium channels.

El siguiente trabajo fueron presentados en el 8° Encuentro de Química Inorgánica (EQI 2017) que tuvo lugar en Sonora, México del 5 al 8 de septiembre de 2017:

L. Quintanar. El lado bio-inorgánico de las enfermedades degenerativas.

Los siguientes trabajos fue presentado en el Tercer Simposio de Tendencias Actuales en la Búsqueda y Desarrollo de Fármacos. Facultad de Química de la UNAM, Ciudad de México. (2017):

J. E. Guzmán Ramírez y **T. Mancilla Percino**,. Síntesis, caracterización de tert-butoxiacetamidas derivadas de alfa-aminoácidos y su evaluación teórica como inhibidoras de la histona desacetilasa 8 (HDAC8). p. 84-86 y 87-89.

J. E. Guzmán Ramírez, C. R. Trejo Muñoz, E. Mera Jiménez y **T. Mancilla Percino**. Síntesis, caracterización de nuevos compuestos de boro derivados de isoindolinas y evaluación

El siguiente trabajo fue presentado en la reunión *Emerging Concepts in Ion Channel Biophysics*. Ciudad de México. (2017):

J. A. De la Rosa, **T. Mancilla Percino** y G. Ávila. Mechanisms of Modulation of Voltage-gated Ca_v Channels by MDIMP.

M. G. Montiel-Jaen, **T. Mancilla Percino** y G. Ávila. Modulation of Storeoperated Calcium Channels by a Bis-boronate Ester Derived from L-leucine.

Los siguientes trabajos fueron presentados en la *18th International Conference on Biological Inorganic Chemistry* (ICBICI8). Florianópolis, Brasil. (2017):

J. A. Domínguez-Calva, E. Serebryany, C. Haasse-Pettingell, J. A. King y **L. Quintanar**. Copper- and zinc- induced aggregation of the human gamma crystallin proteins: Relevance to the bioinorganic chemistry of cataracts disease. Presentación de cartel. Premio al mejor cartel.

L. Quintanar. Copper and protein aggregation: From amyloids in Alzheimer393939s and diabetes to non-amyloids in cataracts disease. Conferencia invitada.

El siguiente trabajo fue presentado en el encuentro *An International Forum For Cell Biology-European Molecular Biology Organization meeting*. Philadelphia, EUA. (2017):

E. Mera-Jiménez, C. R. Trejo-Muñoz, G. Gutiérrez-Iglesias. y **T. Mancilla-Percino**. Pharmacological effect of three tryptophan analogues with HDAC inhibitory activity in MDAMB-231 triple negative breast cancer cells.

Los siguientes trabajos fueron presentados en el II Neurobiology Meeting de la Sociedad Mexicana de Bioquímica. Querétaro, México. (2017).

Y. Posadas, L. Parra-Ojeda, C. Pérez-Cruz y **L. Quintanar**. Studying Cu(II) interactions with amyloidbeta peptide and Prion Protein: Insights into the molecular battle for Cu(II) in Alzheimer Disease.

L. Quintanar. Copper binding to the prion protein and the beta amyloid peptide: A wrestling match at the synapse?

El siguiente trabajo fue presentado en el 254th ACS National Meeting. Washington, EUA. (2017):

L. Quintanar. Copper vs. beta-sheets: From diabetes to cataracts disease. Simposio The Many Colors of Copper in Health and Disease. Conferencia invitada.

Los siguientes trabajos fueron presentados en el 6º. Congreso de la rama de Físicoquímica, Estructura y Función de Proteínas que tuvo lugar en Durango, México del 6 al 10 de noviembre de 2017:

E. Martínez-Jurado, *J. A. Domínguez-Calva*, E. Serebryany, C. Haasse-Pettingell, J. A. King y **L. Quintanar**. Copper-induced aggregation of the human gamma C- and S-cystallin proteins: Relevance to cataracts disease.

Y. Posadas, L. Parra-Ojeda, C. Pérez-Cruz y **L. Quintanar**. Studying Cu(II) interactions with ABeta and Prion Protein: Insights into the molecular features of the fight for Cu(II) in Alzheimer Disease.

E. E. Rodríguez, T. Arcos-López, L. Trujano-Ortiz, C. O. Fernández, F. J. González, A. Vela y **L. Quintanar**. Spectroscopic and redox studies of Cu(II) complexes at the N-terminal of alpha and beta synuclein proteins.

A. Villegas, L. A. Vallejo y **L. Quintanar**. Evaluating the effect of Cu(II) ions and a non-natural bifunctional tetrapeptide in the aggregation of an amyloidogenic prion protein fragment.

Estudiantes Graduados:

Magda Carolina Sánchez López. "Estudio espectroscópico de la coordinación de Cu(II) a fragmentos del péptido amilina y de la proteína prion". Directora de tesis: Dra. Liliana Quintanar Vera. Marzo 10 de 2017.

Química Teórica:

R. Quintero-Monsebaiz, A. Meneses-Viveros, F. Carranza, C. G. Cortés, A. González-Zamudio and **A. Vela**. Multidimensional adaptative and deterministic integration in CUDA and OpenMP. *Journal of Supercomputing*. 2021, 10.1007/s11227-021-03752-1.

R. Quintero-Monsebaiz, L. I. Perea-Ramírez, M. Piris and **A. Vela**. Spectroscopic properties of open shell diatomic molecules using Piris natural orbital functionals. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2021, 23, 2953.

A. A. M. Carranza and **A. M. Köster**. Symmetry-adapted density fitting in auxiliary density functional theory. *Theoretical Chemistry Accounts*. 2021, 140, 32.

J. Hostaš, A. Tchagang, M. P. Lourenço, **A. M. Köster** and D. R. Salahub. Global optimization of ~ 1 nm MoS₂ and CaCO₃ nanoparticles. *Theoretical Chemistry Accounts*. 2021, 140, 44.

F. Louisnard, G. Geudtner, **A. M. Köster** and J. Cuny. Implementation of the parallel-tempering molecular dynamics method in deMon2k and application to the water hexamer. *Theoretical Chemistry Accounts*. 2021, 140, 95.

J. A. Martínez-Espinoza, H. Cruz-Martínez, **P. Calaminici** and D. I. Medina. Structures and properties of Co_{13-x}Cu_x (x=0-13) nanoclusters and their interaction with pyridinic N3-doped Graphene nanoflakes. *Physica E: Low dimensional systems and Nanostructures*. 2021, 134, 114858.

M. P. Lourenço, L. Barrios Herrera, J. Hostaš, **P. Calaminici**, **A. M Köster**, A. Tchagang and D. R. Salahub. Taking the multiplicity inside the loop: active learning for structural and spin multiplicity elucidation of atomic clusters. *Theor. Chem. Acc.* 2021, 140, 1.

J. N. Pedroza- Montero, J. L. Morales, G. Geudtner, A. Álvarez-Ibarra, **P. Calaminici** and **A. M. Köster**. Variational Density Fitting with a Krylov Subspace Method. *Journal of Chemical Theory and Computation* : 2965-2974: 2020.

J. N. Pedroza-Montero, F. Antonio Delesma, J. L. Morales, **P. Calaminici** and **A. M. Köster**. Variational fitting of the Fock exchange potential with modified Cholesky decomposition. *J. Chem. Sci.* : Volume 153, Issue 13: 2020

A. de la Lande, *A. Álvarez-Ibarra*, K. Hasnaoui, F. Cailliez, X. Wu, T. Mineva, J. Cuny, **P. Calaminici**, *L. López-Sosa*, G. Geudtner, I. Navizet, C. García Iriepa, D. R. Salahub and **A. M. Köster**. Molecular Simulations with indeMon2k QM/MM, a Tutorial Review. *Molecules* (24): 1653: 2019.

G. Merino, Á. Muñoz-Castro, M. Antonio Chaer Nascimento and **A. Vela**. Theoretical chemistry in Latin America. *International Journal of Quantum Chemistry* 119: 1-2: 2019.

J. Carmona-Espíndola, J. L. Gázquez, **A. Vela** and S. B. Trickey. Generalized Gradient Approximation Exchange Energy Functional with NearBest Semilocal Performance. *Journal of Chemical Theory and Computation* (15): 303- 310: 2019.

J. L. Gázquez, M. Franco-Pérez, P. W. Ayers and **A. Vela**. Temperature-dependent approach to chemical reactivity concepts in density functional theory. *International Journal of Quantum Chemistry* 119: 1-21: 2019.

L. López Sosa, H. Cruz Martínez, **O. Solorza Feria** and **P. Calaminici**. Nickel and copper doped palladium clusters from a first-principles perspective. *Int J Quantum Chem* 119: 13: 2019.

M. Boningnee Pfennig, K. Gopal Dongol, G. M. Romero Boston, S. Schmitz, R. Wartchow, J. D. Samaniego-Rojas, **A. M. Köster** and H. Butenschön. Trifluoromethyl-Substituted Benzocyclobutenone and Benzocyclobutenedione: The Structure Anomaly of (Benzocyclobutenedione) tricarbonylchromium Complexes. *Organometallics* (38): 3039: 2019.

R. Quintero-Monsebaiz, I. Mitxelena, M. Rodríguez-Mayorga, **A. Vela** and M. Piris. Natural orbital functional for spin-polarized periodic systems. *Journal of Physics-Condensed Matter* 31: 14042-14047: 2019.

R. I. Delgado Venegas, **P. Calaminici** and **A. M. Köster**. Mixed Second and Third Energy Derivatives from Auxiliary Density Perturbation Theory. *Molecular Physics* (114): 1367: 2019.

S.E. Pérez-Figueroa, **P. Calaminici** and **A.M. Köster**. A Hybrid ADFT Study of the C104 and C106 IPR Isomers. *Physical Chemistry* (123): 4565: 2019.

Á. Albavera-Mata, J. L. Gázquez, S. B. Trickey, **A. Vela** and C. M. Zicovich-Wilson. Long-range exchange limit and dispersion in pure silica zeolites. *Theoretical Chemistry Accounts* 137(26): 1-9: 2018.

F.A. Delesma, G. Geudtner, D. Mejía-Rodríguez and **A.M. Köster**. Range-Separated Hybrid Functionals with Variational Fitted Exact Exchange. *J. Chem. Theor. Comput.* (14): 9: 2018.

F.A. Delesma, M. Van den Bossche, H. Grönbeck, **P. Calaminici**, **A.M. Köster** and L.G.M. Pettersson. A Chemical View on X-ray Photoelectron Spectroscopy: The ESCA Molecule and Surface-to-Bulk XPS Shifts. *ChemPhysChem* 19: 169: 2018.

M. Franco-Pérez, J. L. Gázquez, P. W. Ayers and **A. Vela**. Thermodynamic Dual Descriptor. *Acta Phys. -Chim. Sin.* 34(6): 683-691: 2018.

J.M. Vásquez-Pérez, **A.M. Köster** and **P. Calaminici**. The melting limit in sodium clusters. *Theor. Chem. Acc.* 137: 45: 2018.

J.R. Gómez-Pérez, F.A. Delesma, **P. Calaminici** and **A.M. Köster**. Accuracy of auxiliary density functional theory hybrid calculations for activation and reaction enthalpies of pericyclic reactions. *J. Mol. Modeling* 24(223): 9: 2018.

J. Carmona-Espíndola, J. L. Gázquez, **A. Vela** and S. B. Trickey. Generalized Gradient Approximation Exchange Energy Functional with Near-Best Semilocal Performance. *J. Chem. Theory Comput.* 15: 303-310: 2018.

J. Gázquez, P. W. Ayers, **A. Vela** and M. Franco-Pérez. Thermodynamic Justification for the Parabolic Model for Reactivity Indicators with Respect to Electron Number and a Rigorous Definition for the Electrophilicity: The Essential Role Played by the Electronic Entropy. *J. Chem. Theory Comput.* 14: 597-606: 2018.

U. Orozco-Valencia, J. L. Gázquez and **A. Vela**. Reactivity of Idoles through the Eyes of a Charge-Transfer partitioning Analysis. *Acta Phys. -Chim. Sin.* 34(6): 692-698: 2018.

R. A. Miranda-Quintana, M. Franco-Pérez, J. L. Gázquez, P. W. Ayers and **A. Vela**. Chemical hardness: Temperature dependent definitions and reactivity principales. *The Journal of Chemical Physics* 149: 124110: 201.

U. Orozco-Valencia, J. L. Gázquez and **A. Vela**. Global and local charge transfer in electron donor-acceptor complexes. *Journal of Molecular Modeling* 24: 250: 2018.

U. Orozco-Valencia, J. L. Gázquez and **A. Vela**. Role of Reaction Conditions in the Global and Local Two parabolas Charge Transfer Model. *The Journal of Physical Chemistry A* 122: 1796-1806: 2018.

W. H. Blades, A. C. Reber, S. N. Khanna, *L. López Sosa*, **P. Calaminici** and **A. M. Köster**. Evolution of the Spin Magnetic Moments and Atomic Valence of Vanadium in VCux434343, VAgx434343, and VAux434343 Clusters (x=3-14). *J. Phys. Chem. A.* (2017) (121): 2990.

A. Cervantes Flores, H. Cruz Martínez, **O. Solorza-Feria** and **P. Calaminici**. A first-principles study of NinPdn (n=1-5) clusters. *J. Mol. Model.* (2017) (161): 1-8. DOI: 10.1007/s00894-017-332-7.

H. Cruz Martínez, *L. López Sosa*, **O. Solorza-Feria** and **P. Calaminici**. First-principles investigation of adsorption and dissociation of molecular oxygen on pure Pd, Ni-doped Pd and NiPd alloy clusters. *Int. J. of Hydrogen Energy.* (2017) (42): 30310. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2017.08.041.

A.de la Lande, AC. Clavaguéra and **A. M. Köster**. On the Accuracy of Population analyses Based on Fitted Densities. *J. Mol. Modeling.* (2017) 23: 99.

F. A. Delesma, M. Van den Bossche, H. Grönbeck, **P. Calaminici**, **A. M. Köster** and L. G. M. Pettersson. A Chemical View on X-ray Photoelectron Spectroscopy: The ESCA Molecule and Surface-to-Bulk XPS Shifts. *ChemPhysChem.* (2017) DOI: 10.1002/cphc.201701135.

M. Franco-Pérez, P. A. Ayers, J. L. Gázquez and **A. Vela**. Thermodynamic responses of electronic systems. *Journal of Chemical Physics.* (2017) 147: 094105-11.

M. Franco-Pérez, P. W. Ayers, J. L. Gázquez and **A. Vela**. Local chemical potential, local hardness, and dual descriptors in temperature dependent chemical reactivity theory. *Physical Chemistry Chemical Physics*. (2017) 19: 13687-13695.

M. Franco-Pérez, J. L. Gázquez, P. W. Ayers and **A. Vela**. Thermodynamic hardness and the maximum hardness principle. *Journal of Chemical Physics*. (2017) 147: 074113-7.

M. Franco-Pérez, F. Heidar-Zadeh, P. W. Ayers, J. L. Gázquez and **A. Vela**. Going beyond the three state ensemble model: the electronic chemical potential and Fukui function for the general case. *Physical Chemistry Chemical Physics*. (2017) 19: 11588-11602

M. Franco-Pérez, C. A. Polanco-Ramírez, P. W. Ayers, J. L. Gázquez and **A. Vela**. New Fukui, dual and hyper-dual kernels as bond reactivity descriptors. *Physical Chemistry Chemical Physics*. (2017) 19: 16095-16104.

U. Orozco-Valencia, J. L. Gázquez and **A. Vela**. Global and Local Partitioning of the Charge Transferred in the Parr-Pearson Model. *Journal of Physical Chemistry A*. (2017) 121: 4019-4029.

U. Orozco-Valencia, J. L. Gázquez and **A. Vela**. Donation and back-donation analyzed through a charge transfer model based on density functional theory. *Journal of Molecular Modeling*. (2017) 23: 207-215.

Artículos de revisión publicados en libros:

P. Calaminici, K. Jug and **A. M. Köster**. Quantum Mechanics and Molecular Orbital Theory: From Basic Principles to Quantum Chemistry. *Encyclopedia of Physical Organic Chemistry*. (2017) DOI: 10.1002/9781118468586.

Trabajos presentados en Congresos:

El siguiente trabajo fue presentado en el 59th Sanibel Symposium 2019-02-18 - 2019-02-23 St. Simons Island, GA, USA:

L. A. Soriano Agueda, *Á. Vázquez Mayagoitia* and **A. Vela**. A Comparative DFT and CCSD study of Spin-Crossover in Mononuclear Transition Metal Complexes.

Los siguientes trabajos fueron presentados en el APS March Meeting 2019 2019-03-04 - 2019-03-08 Boston, Massachusetts, USA:

A. Vela, *Á. Albavera-Mata*, K. Botello-Mancilla, J. Carmona-Espíndola, S. B. Trickey and J. L. Gázquez. Performance of Generalized Gradient Approximations with Nearly Correct Asymptotic Potentials on Molecular and Solid-State Properties.

Á. Albavera-Mata, K. Botello-Mancilla, D. Mejía-Rodríguez, S. B. Trickey and **A. Vela**. A Generalized Gradient Approximation with Local Parameters.

L. Soriano and **A. Vela**. Spin Crossover Predictions in Transition Metal Complexes using the Density Corrected DFT.

El siguiente trabajo fue presentado en el XLV Chitel/Quitel 2020-08- 25 - 2019-08-30 Concordia University, Montreal, CanadáXLV Chitel/Quitel 2020-08- 25 - 2019-08-30 Concordia University, Montreal, Canadá.

L. Soriano and **A. Vela**. Robust prediction of spin-crossover in transition metal complexes.

Trabajo presentado en el grupo de Química-Física Teórica 2019-12-10 - 2019-12-10 Universidad de Antioquía; Medellín, Colombia:

A. Vela. Predicción Robusta del Entrecruzamiento de Espín en Complejos de Metales de Transición.

Los siguientes trabajos fueron presentados en el Atlantic Basin Conference on Chemistry 2018-01- 23 - 2018-01-26 Cancún, Q.R. Méx., 23-26 Enero 2018:

A. Vela, *U. Orozco-Valencia* and J. L. Gázquez. Charge transfer mechanisms determined by chemical reactivity theory within DFT.

El siguiente trabajo fue presentado en el 58th Sanibel Symposium 2018-02-18 - 2018-02-23 St. Simons Island, GA, USA:

Vela, *Á. M. Albavera-Mata* and D. Mejía-Rodríguez. Delocalization, N representability and Jacobs ladder.

El siguiente trabajo fue presentado en el 255th American Chemical Society; National Meeting and exposition. 2018- 03-18 - 2018-03-22 New Orleans, LA, USA:

Vela, *U. Orozco-Valencia* and J. L. Gázquez. Incorporating charge transfer directionality in a global and local charge transfer model.

El siguiente trabajo fue presentado en el Coloquio Marcos Moshinsky: DFT: Una revolución silenciosa. 2018-09-21 - 2018-09-21 Universidad de Guanajuato, División de Ciencias e Ingenierías (DCI) Campus León;

A. Vela. DFT: una revolución silenciosa.

El siguiente trabajo fue presentado en el Quitel 2018 2018-10-09 - 2018-10-12 Santiago de Chile, Chile:

A.Vela. Reaction Conditions in the Global and Local Two Parabolas Charge Transfer Model.

El siguiente trabajo fue presentado en La Semana de la Fisicoquímica 2018-10-29 - 2018-10-31 Universidad Nacional Autónoma de México, FES-Cuautitlán:

A. Vela Amieva. Dirección de transferencia electrónica y reactividad química.

El siguiente trabajo fue presentado en el International Symposium on Chemical Concepts from Theory and Computation (CCTC 2018) 2018-12- 08 - 2018-12-12 Changsha, Hunan, China:

A. Vela. Charge transferred as a reactivity scale and a QSAR descriptor. p. Sin número.

Trabajos presentados en Symposium on Molecular Design and Bioinformatics. Habana, Cuba. (2017):

A.Vela.Distinguishing The Direction Of Charge Transfer In Chemical Reactivity Theory.

A.Vela, U. Orozco-Valencia and J. L. Gázquez. Global and Local Charge Transfer Partitioning within the Two-parabolas Model of Chemical Reactivity Theory.

Los siguientes trabajos fueron presentados en la XVI reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica efectuada en la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, México del 16 al 18 de noviembre de 2017:

A. M. Albavera-Mata, A.M., D. Mejía-Rodríguez, J. L. Gázquez y **A. Vela.** El error de deslocalización y la escalera de Jacob. p. 3.

A. U.Orozco Valencia, J. L. Gázquez y **A. Vela.** Un modelo de reactividad Química con transferencia de Carga local. p. 1.

J. Nochebuena y **A. Vela.** Dinámica Molecular Born-Oppenheimer en Dímeros Moleculares enlazados por fuerzas de Van Der Waals. p. 2.

J. L. Rosas-Trigueros y **A. Vela.** Using genetic programming to explore the functional space of $J[n]$. p. 4.

R. A. Quintero. Optimización de los números de ocupación en teoría de los funcionales de matriz de densidad. p. 5.

Estudiantes graduados:

Ángel Martín Albavera Mata. "El papel del comportamiento asintótico en el desempeño de funcionales de intercambio y correlación de gradiente generalizado en sistemas finitos y extendidos." Ciencias Químicas. Director(es) de tesis: Dr. Alberto Marcial Vela Amieva. 2019-07-09

Rogelio Issac Delgado Venegas. "Analytic Second Derivatives in Auxiliary Density Functional Theory." Ciencias Químicas. Director(es) de tesis: Dr. Andreas Köster with Dr. Patrizia Calaminici. 2018-06-11.

Domingo Cruz Olvera. "Estudio teórico de estructuras y actividad catalítica de cúmulos de carburo de dimolibdeno". Directora de tesis: Dra. Patrizia Calaminici. Junio 30 de 2017.

Ángel Ulises Orozco Valencia. "Transferencia de carga y reactividad química en la teoría de funcionales de la densidad". Director de tesis: Dr. Alberto Marcial Vela Amieva. Agosto 17 de 2017.

Termoquímica Molecular:

O. A. Solis-Gonzalez, J. R. Avendaño-Gómez and A. Rojas-Aguilar. A thermodynamic study of F108 and F127 block copolymer interactions with liposomes at physiological temperature. *Journal of Liposome Research*. 2021. 10.1080/08982104.2020.1865401.

F. Herrera-Castro and **L. A. Torres**. Study of the solvation process of some pyrazole derivatives in three different solvents by solution calorimetry and IR spectroscopy: Unravelling solute-solvent interactions. *Journal of Molecular Liquids* 311, 2020, 113275.

U. Galindo-García and **L. A. Torres**. Crystal Structure at the Origin of the Thermal Stability and Large Enthalpy of Fusion and Sublimation Values of Calixarenes. *Cryst. Growth Des.* 2020, 20, 1302–1310.. <https://dx.doi.org/10.1021/acs.cgd.9b01562>.

F. Herrera-Castro and **L. A. Torres**. "Understanding the solvation process and solute-solvent interactions of imidazole compounds in three different solvents through solution calorimetry and ^1H NMR". *Journal of Molecular Liquids* 2019(284): 232-240: 2019.

M. A. García Castro, M. P. Amador Ramírez, **A. Rojas Aguilar**, J. M. Hernández Pérez, J. M. Solano, H. Flores and K. Salas López. Experimental and computational thermochemistry of 3- and 4-nitrophthalic acids. *Journal of Chemical Thermodynamics* 127: 117– 125: 2018.

Trabajos presentados en Congresos

Trabajos presentados en el XXXIII Congreso Nacional de Termodinámica 2019- 09-11 - 2019-09-13 Av. Instituto Politécnico Nacional 2508, Ciudad de México

A. Vásquez Badillo, *T. Sánchez Bulás*, T. Rojo, **A. Rojas Aguilar** y G. Cuevas. Estudio Termoquímico de la Interacción entre Aflatoxina y Clorofila. Vol. 33 p. 1-6. Estudio de la interacción entre moléculas de interés biológico a través de nanocalorimetría de titulación isotérmica..

D. Esparza Rivera y **A. Rojas Aguilar**. Estudio termoquímico de aza éteres corona. Vol. 33 p. 412-422.

D. Y. García Juanillo y **A. Rojas Aguilar**. Optimización de un calorímetro de combustión. isoperibólico semi-micro. Vol. 33 p. 560-566.

J. R. Avendaño Gómez, **A. Rojas Aguilar** y O. Solís González. Estudio de la Interacción de Poloxámeros con Liposomas a Temperatura Fisiológica. Vol. 33 p. 69-74.

El siguiente trabajo fue presentado en el IV Encontro Luso Galego de Química 2018-11- 21 - 2018-11-23 Universidad de Porto; Portugal:

A. X.Hernández y **A. Rojas Aguilar**. Entalpías de cambio de fase de hidrocarburos aromáticos policíclicos (PHA393939s) determinadas por D.S.C. y Termogravimetría. p. QF24.

Estudiantes Graduados:

Ulises Galindo García. "Origen de la estabilidad térmica de los calixarenos y sus propiedades de solvatación. Estudio termodinámico y cristalográfico". Química. Director de tesis: Dr. Luis Alfonso Torres Gómez. 2020-02-28.

Filiberto Herrera Castro. "Estudio del proceso de solvatación de derivados del imidazol y pirazol en solventes próticos y apróticos a través de mediciones termoquímicas, espectroscopía ^1H RMN y análisis de estructura cristalina." Ciencias Químicas. Director(es) de tesis: Dr. Luis Alfonso Torres Gómez. 2019-09-26.

Tania Sánchez Bulás. "Termoquímica y estudio de la asociación de éteres corona y derivados del Azobenceno." Ciencias Químicas. Director(es) de tesis: Aarón Rojas Aguilar. 2018-08- 10