

CURRICULUM VITAE

Dr. Daniel Glossman-Mitnik

12 de agosto de 2012

CURRICULUM VITAE

Dr. Daniel Glossman-Mitnik

1. Datos Personales

- Nombre Completo: **Mario Daniel Glossman Mitnik**
- Pasaporte: 11068873 N
- FM2: 29113
- CURP: GOMM53100HNELTR00
- Dirección Personal: Circuito Graduación 5416, Fracc. Rinconada Universidad, Chihuahua, Chih. 31123, México - Teléfono: +52 614 4987113
- Dirección Profesional: NANOCOSMOS Virtual Lab, Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Miguel de Cervantes 120, Complejo Industrial Chihuahua, Chihuahua, Chih. 31109, México
- Otras Direcciones
 - Teléfono Oficina: +52 614 4391151
 - Teléfono secretaría/FAX: +52 614 4391130
 - Correo electrónico: daniel.glossman@cimav.edu.mx - dglossman@gmail.com
 - Página WEB: <http://www.cimav.edu.mx/cv/daniel.glossman>

2. Diplomas y Grados Académicos

- Licenciado en Ciencias Químicas
Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina, Abril de 1982
- Doctor en Ciencias Químicas
Universidad Nacional de La Plata, La Plata, Buenos Aires, Argentina,
Diciembre de 1986
Título de la Tesis: Estudio de la Estructura Electrónica de Átomos y Moléculas por Medio de la Teoría de los Funcionales de la Densidad

3. Carrera Académica

1983-1985 Becario de Iniciación del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) - República Argentina
Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), La Plata, República Argentina

- 1985-1988** Becario de Perfeccionamiento del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) - República Argentina
Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), La Plata, República Argentina
- 1988-1989** Postdoctoral Research Associate
Department of Chemistry, University of North Carolina at Chapel Hill (UNC), Chapel Hill, NC, USA
- 1989-1990** Investigador Asociado Postdoctoral
Departamento de Física, Universidad de Puerto Rico (UPR), Río Piedras, Puerto Rico
- 1990-1992** Investigador Asociado Postdoctoral
Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear, Universidad de Valladolid (UVA), Valladolid, España
- 1992-1999** Investigador Independiente del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) - República Argentina
Centro de Química Inorgánica (CEQUINOR), Universidad Nacional de La Plata, La Plata, República Argentina
- 1994-1999** Profesor Adjunto con Dedicación Exclusiva
Departamento de Ciencias Básicas, Universidad Nacional de Luján, Luján, República Argentina
- 1999-2001** Cátedra Patrimonial de Excelencia - Nivel II, del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT)
Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV), Chihuahua, México
- 1999 a la fecha** Investigador Titular C de Tiempo Completo
Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV), Chihuahua, México
- 2001-2009** Investigador Nacional Nivel II del Sistema Nacional de Investigadores (SNI) del CONACYT
Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV), Chihuahua, México
- 2004-2009** Coordinador Responsable del Programa Académico Institucional de Nanotecnología (PRINATEC)
Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV), Chihuahua, México
- 2010 a la fecha** Investigador Nacional Nivel III del Sistema Nacional de Investigadores (SNI) del CONACYT
Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV), Chihuahua, México

2010 a la fecha Jefe del Departamento de Simulación Computacional y Modelado Molecular
Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV), Chihuahua, México

4. Actividades Docentes

1981-1983 Ayudante de 2da - Dedicación Simple
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires
- República Argentina

Cursos:

- Química-Física I
- Química-Física II

1983-1987 Ayudante de 1ra - Dedicación Simple
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires
- República Argentina

Cursos:

- Química-Física I
- Química-Física II

1987-1990 Jefe de Trabajos Prácticos - Dedicación Simple
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires
- República Argentina

Cursos:

- Química-Física I
- Química-Física II
- Química-Física III

1993-1994 Jefe de Trabajos Prácticos - Dedicación Simple
Departamento de Ciencia y Tecnología - Universidad Nacional de Quilmes-
Univ- República Argentina

Cursos:

- Fisicoquímica I
- Fisicoquímica II

1994-1999 Profesor Adjunto - Dedicación Exclusiva
Departamento de Ciencias Básicas - Universidad Nacional de Luján - Univ-
República Argentina

Cursos:

- Introducción a la Química
- Química General
- Elementos de Química Ambiental
- Fisicoquímica del Medio Ambiente Natural

1999 a la fecha Profesor Ordinario
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV) -Chihuahua
- México

Cursos:

- Introducción a la Química Computacional
- Introducción a la Nanotecnología
- Modelado Molecular
- Introducción a la Bionanotecnología
- Modelado Químico: De Átomos a Líquidos
- Simulación Computacional de Materiales Moleculares
- Modelado Molecular de la Estructura y Propiedades de Polímeros

5. Creación y Dirección de Grupos de Investigación

1999 Grupo de Química Computacional del CIMAV

2004 Grupo NANOCOSMOS – Grupo de Química Computacional de Moléculas y Nanomateriales

2004 Programa Académico Institucional de Nanotecnología (PRINATEC)

2008 Red MONEAR – Red de Modelado de Materiales Moleculares y Nanoestructuras para Energías Alternativas y Renovables

2010 Departamento de Simulación Computacional y Modelado Molecular del CIMAV

2011 NANOCOSMOS Virtual Lab - Laboratorio Virtual de Nanociencia Molecular Computacional

6. Dirección de Tesis y Formación de Académicos

6.1. Dirección de Tesis de Postgrado

6.1.1. Tesis de Maestría

1. Título de la Tesis: *Estudio de Propiedades Estructurales, Eléctricas, Ópticas y Termoquímicas de Oligotiadiazoles*
Grado Académico: Maestría en Ciencia de Materiales
Candidato: **Norma R. Flores-Holguín**
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua, México, Noviembre de 2002
2. Título de la Tesis: *Estudio Computacional de Híbridos de Fullerenos Oligofenilvinileno*
Grado Académico: Maestría en Ciencia de Materiales
Candidato: **Erika I. López-Martínez**
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua, México, Marzo de 2007
3. Título de la Tesis: *Simulación Computacional de Nanomateriales Basados en el SnO₂*
Grado Académico: Maestría en Ciencia de Materiales
Candidato: **Hazel J. Morales-Rodríguez**
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua, México, Febrero de 2008
4. Título de la Tesis: *Modelación Molecular de Sistemas Fotosensibles para Celdas Solares Sensibilizadas por Colorante*
Grado Académico: Maestría en Ciencias de la Ingeniería
Candidato: **Jesús Adrián Baldenebro-López**
Universidad Autónoma de Sinaloa, Los Mochis, BC, México, Diciembre de 2010
5. Título de la Tesis: *Desarrollo de una Metodología de Establecimiento y Multiplicación In Vitro Utilizando Diferentes Explantes de Vitis Vinifera*
Grado Académico: Maestría en Ciencias de la Productividad Frutícola
Candidato: **Nubia Elizabeth González Montes**
Universidad Autónoma de Chihuahua, Chihuahua, Chih, México, Diciembre de 2011

6.1.2. Tesis de Doctorado

1. Título de la Tesis: *Simulación Computacional y Diseño Molecular de Inhibidores de Corrosión*
Grado Académico: Doctorado en Ciencia de Materiales
Candidato: **Luz María Rodríguez-Valdez**
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua, México, Octubre de 2005
2. Título de la Tesis: *Estudio Computacional del Mecanismo Antioxidante de los Flavonoides Quercetina, (+)-Catequina y Cianidina, Basado en su Secuencia de Desprotonación*
Grado Académico: Doctorado en Ciencia de Materiales
Candidato: **Ana María Mendoza-Wilson**
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua, México, Noviembre de 2006
3. Título de la Tesis: *Simulación Computacional de Antiparasitarios Basados en el Anillo Tiadiazólico*
Grado Académico: Doctorado en Ciencia de Materiales
Candidato: **Norma R. Flores-Holguín**
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua, México, Enero de 2007
4. Título de la Tesis: *Actividad Química de Fármacos contra Mycobacterium Tuberculosis Favorecida por Nanotubos y Fullerenos*
Grado Académico: Doctorado en Ciencia de Materiales
Candidato: **Alejandra Favila-Pérez**
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua, México, Enero de 2008
5. Título de la Tesis: *Estudio Teórico de Efectos de Sustitución por Grupos Funcionales en 4,9-Difenilantrozolinas y Antraceno Derivados en Semiconductores Orgánicos*
Grado Académico: Doctorado en Ciencia de Materiales
Candidato: **Diana Barraza-Jiménez**
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua, México, Noviembre de 2008
6. Título de la Tesis: *Evaluación Teórica de Agentes de Polimerización RAFT Usando Cálculos DFT*
Grado Académico: Doctorado en Ciencia de Materiales
Candidato: **Isis Rodríguez-Sánchez**
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua, Abril de 2009

7. Título de la Tesis: *Análisis y Modelado Molecular del Fluoróforo, Interruptor y Sonda de un Biosensor para Detectar Mycobacterium tuberculosis*
 Grado Académico: Doctorado en Ciencia de Materiales
 Candidato: **Sandra Mónica Alvarado-González**
 Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua, Abril de 2009
8. Título de la Tesis: *Simulación Computacional de la Estructura y Propiedades Moleculares de Pigmentos Carotenoides para Sensibilización de Celdas Solares Fotovoltaicas*
 Grado Académico: Doctorado en Ciencia de Materiales
 Candidato: **Teresita de Jesús Ruiz Anchondo**
 Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua, Octubre de 2010
9. Título de la Tesis: *Estudio Teórico de los Efectos de Impurezas de Substitución de Azufre en Óxido de Zinc Usando Teoría de Funcionales de la Densidad*
 Grado Académico: Doctorado en Ciencia de Materiales
 Candidato: **Manuel Alberto Flores-Hidalgo**
 Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua, Julio de 2011

6.2. Dirección de Tesis de Posgrado en Curso

6.2.1. Tesis de Maestría

1. Título de la Tesis: *Caracterización Molecular Computacional de los Colorantes CT-7 ($C_{33}H_{31}IN_2O_2$), CT-500 ($C_{43}H_{59}IN_2O_4$) y CT-525 ($C_{40}H_{41}IN_2O_2$) para su Posible Aplicación en Celdas Solares*
 Grado Académico: Maestría en Ciencia y Tecnología Ambiental
 Candidato: **Jesús Iván Gómez-Arras**
 Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua
2. Título de la Tesis: *Medición de Eficiencia Teórica de Colorantes Orgánicos para su Aplicación en Celdas Solares Sensibilizadas por Colorante*
 Grado Académico: Maestría en Ciencia y Tecnología Ambiental
 Candidato: **Edgar Israel Armendáriz-Barrio**
 Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua
3. Título de la Tesis: *Modelado Químico-Computacional de los Colorantes CT-300, CT-3S y CT-325 para su Uso en Celdas Solares Sensibilizadas por Colorante*
 Grado Académico: Maestría en Ciencia y Tecnología Ambiental
 Candidato: **Eduardo González-Ochoa**
 Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua

6.2.2. Tesis de Doctorado

1. Título de la Tesis: *Química Computacional de Materiales Fotoelectrocromicos*
Grado Académico: Doctorado en Ciencia de Materiales
Candidato: **Hazel J. Morales-Rodríguez**
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua
2. Título de la Tesis: *Modelado Molecular de Nanomateriales Fotosensibles*
Grado Académico: Doctorado en Ciencia de Materiales
Candidato: **Francisco Cervantes-Navarro**
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua
3. Título de la Tesis: *Modelado Molecular de Tintes Orgánicos para Celdas Solares DSSC*
Grado Académico: Doctorado en Ciencia de Materiales
Candidato: **Jesús Adrián Baldenebro-López**
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua

6.3. Dirección de Postdoctorados

1. Título de la Tesis: *Química Computacional de Aminoácidos, Dipéptidos y Tripéptidos*
Grado Académico: Postdoctorado
Candidato: **Amelia Valdez-Aguirre**
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua, México, Diciembre de 2006
2. Título de la Tesis: *Química Computacional de Materiales Moleculares Derivados de la Capsaicina*
Grado Académico: Postdoctorado
Candidato: **Ramón Olivas-Vargas**
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua, México, Diciembre de 2006
3. Título de la Tesis: *Química Computacional de Materiales Moleculares Autoensamblados*
Grado Académico: Postdoctorado
Candidato: **Marco Gallo-Estrada**
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua, México, Diciembre de 2006
4. Título de la Tesis: *Simulación Computacional de la Estructura y Propiedades Moleculares de Ftalocianinas y sus Complejos Metálicos*
Grado Académico: Postdoctorado
Candidato: **José Zeferino Ramírez-Ramírez**
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, Chihuahua, México, Mayo de 2009

7. Actividades Administrativas

- 1989** Miembro del Comité Organizador del XVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, La Plata República Argentina
- 2001 a la fecha** Miembro del Comité de Evaluadores Acreditados del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (RCEA), Actuando como Revisor y Arbitro de Aspirantes a Becas Externas, de Proyectos de Investigación Internos y Externos, y de Proyectos de Estímulos Fiscales a las Empresas
- 2004 a 2006** Miembro del Comité Organizador Nacional de las Reuniones Mexicanas de Físicoquímica Teórica
- 2005** Presidente del Comité Organizador Local de la Cuarta Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Chihuahua, México
- 2004 a la fecha** Miembro del Consejo Académico Interno del Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV)
- 2004-2009** Coordinador Responsable del Programa Académico Institucional de Nanotecnología (PRINATEC) del Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV)
- 2004-2009** Coordinador del Comité de Admisión al Doctorado en Ciencia de Materiales del Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV)
- 2004 a la fecha** Miembro del Comité de Postgrado del Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV)
- 2005** Miembro del Comité Evaluador del Consejo Nacional de la Enseñanza y el Ejercicio Profesional de las Ciencias Químicas (CONAECQ)
- 2005 a la fecha** Miembro del Consejo Editorial de la Universidad Autónoma de Chihuahua (UACH)
- 2010 a la fecha** Jefe del Departamento de Simulación Computacional y Modelado Molecular del Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV)

8. Premios y Reconocimientos

- 1983-1984** Beca de Iniciación Otorgada por el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) – República Argentina
- 1985-1987** Beca de Perfeccionamiento Otorgada por el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) – República Argentina
- 1985** Invitación Financiada por el Comité Organizador para Participar en el 3er Simposio Brasileiro de Química Teórica, São Carlos, Brasil

- 1987** Invitación Financiada por el Comité Organizador para Participar en el V Congreso Argentino de Fisicoquímica, Mar del Plata, República Argentina
- 1988-1992** Beca Externa Otorgada por el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) – República Argentina para la Realización de Actividades de Investigación Postdoctoral en el Extranjero
- 1988-1989** Beca Postdoctoral de la University of North Carolina at Chapel Hill – USA, para la Realización de Actividades de Investigación en el Departamento de Química de la University of North Carolina at Chapel Hill – Chapel Hill, NC – USA
- 1989** Invitación Financiada por el Comité Organizador para Participar en el XVII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, La Plata, República Argentina
- 1989-1990** Beca Postdoctoral de la Universidad de Puerto Rico – Puerto Rico, para la Realización de Actividades de Investigación en la Facultad de Ciencias de la Universidad de de Puerto Rico – Río Piedras – Puerto Rico
- 1990** Invitación Financiada por la Universidad de Puerto Rico para Participar en el Workshop on Computational Methods in XAFS Analysis, Brookhaven National Laboratory, New York, USA
- 1990** Invitación Financiada por la Comunidad Económica Europea para Participar en el XIX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina – Roma – Italia – Septiembre de 1990
- 1990-1992** Beca Postdoctoral del Ministerio de Educación y Ciencia – España, para la Realización de Actividades de Investigación en la Facultad de Ciencias de la Universidad de Valladolid (UVA) – Valladolid – España
- 1993** Invitación Financiada por la Organización del Tratado del Atlántico Norte (OTAN) para Participar en el NATO - Advanced Study Institute - Metal-Ligand Interactions: From Atoms, to Clusters, to Surfaces, Cetraro, Calabria, Italia
- 1993** Beca Otorgada por la Scretaría de Ciencia y Tecnología (SECYT) - República Argentina, 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 Química Teórica*
- 1993** Beca Otorgada por el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) - República Argentina, por Resolución N° 1585/93 para Atender a la 5th International Conference on the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics - Como - Italia

- 1993** Beca Otorgada por el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) - República Argentina, por Resolución N° 1585/93 para Atender al XXI Congreso Internacional de los Químicos Teóricos de la Expresión Latina - Grenoble - Francia
- 1993** Beca Otorgada por el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) - República Argentina, por Resolución N° 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** Profesor Visitante en el Departamento de Física Teórica de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Valladolid - Valladolid - España
- 1994** Beca Otorgada por la Fundación Antorchas - República Argentina, Dentro del Programa de Subsidios a la Investigación para Científicos Jóvenes, para la Realización del Proyecto: *Estudio de la Reactividad Química, Diseño y Desarrollo de Drogas y Moléculas de Interés Biológico por Medio de Técnicas de Química Computacional, Especialmente Aplicado al Caso de los Triazololes y Compuestos Relacionados*
- 1992-1999** Investigador Adjunto de la Carrera del Investigador Científico y Tecnológico del Consejo de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) - República Argentina
- 1999** Investigador Independiente de la Carrera del Investigador Científico y Tecnológico del Consejo de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) - República Argentina
- 1999-2001** Cátedra Patrimonial de Excelencia Nivel II Otorgada por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) - México
- 1999 a la fecha** Investigador Titular C del Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV) - Chihuahua - México
- 2001-2005** Investigador Nacional Nivel II del Sistema Nacional de Investigadores (SNI) del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) - México
- 2005-2009** Investigador Nacional Nivel II del Sistema Nacional de Investigadores (SNI) del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) - México
- 2004-2009** Coordinador Responsable del Programa Académico Institucional de Nanotecnología (PRINATEC) del Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV) - Chihuahua - México
- 2005** Subsidio Otorgado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) para la Organización de la Cuarta Reunión Mexicana de Físico-química Teórica, Chihuahua, México

- 2006** Reconocimiento al Artículo *Theoretical Study of the Molecular Properties and Chemical Reactivity of (+)-Catechin and (-)-Epicatechin Related to their Antioxidant Ability*, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 761 (2006) 97-106 como "Top 25 Hottest Articles.^{en} la Revista Journal of Molecular Structure: THEOCHEM para el Período Enero a Marzo de 2006
- 2006** Reconocimiento al Artículo *Theoretical Study of the Molecular Properties and Chemical Reactivity of (+)-Catechin and (-)-Epicatechin Related to their Antioxidant Ability*, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 761 (2006) 97-106 como "Top 25 Hottest Articles.^{en} la Revista Journal of Molecular Structure: THEOCHEM para el Período Abril a Junio de 2006
- 2006** Reconocimiento al Artículo *Theoretical Study of the Molecular Properties and Chemical Reactivity of (+)-Catechin and (-)-Epicatechin Related to their Antioxidant Ability*, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 761 (2006) 97-106 como "Top 25 Hottest Articles.^{en} la Revista Journal of Molecular Structure: THEOCHEM para el Período Julio a Septiembre de 2006
- 2007** Reconocimiento al Artículo *DFT of Functionalized Carbon Nanotubes and Fullerenes as Nanovectors for Drug Delivery of Antitubercular Compounds*, *Chemical Physics Letters* 447 (2007) 105-109 como "Top 25 Hottest Articles.^{en} la Revista Chemical Physics Letters para el Período Octubre a Diciembre de 2007
- 2007** Reconocimiento al Artículo *Theoretical Study of the Molecular Properties and Chemical Reactivity of (+)-Catechin and (-)-Epicatechin Related to their Antioxidant Ability*, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 761 (2006) 97-106 como "Top 25 Hottest Articles.^{en} la Revista Journal of Molecular Structure: THEOCHEM para el Período Julio a Septiembre de 2007
- 2008** Reconocimiento al Artículo *Band Structure, Optical Properties and Infrared Spectrum of Glycine-Sodium Nitrate Crystal*, *Journal of Molecular Structure* 875 (2008) 295-301 como "Top 25 Hottest Articles.^{en} la Revista Journal of Molecular Structure para el Período Abril a Junio de 2008
- 2008** Reconocimiento al Artículo *Theoretical Study of the Chemical Reactivity of the Main Species in the α -pinene Isomerization Reaction*, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 854 (2008) 81-88 como "Top 25 Hottest Articles.^{en} la Revista Journal of Molecular Structure: THEOCHEM para el Período Abril a Junio de 2008
- 2008** Reconocimiento al Artículo *Theoretical Study of the Chemical Reactivity of the Main Species in the α -pinene Isomerization Reaction*, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 854 (2008) 81-88 como "Top 25 Hottest Articles.^{en} la Revista Journal of Molecular Structure: THEOCHEM para el Período Octubre a Diciembre de 2008

- 2009** Reconocimiento Otorgado por CONACYT y Gobierno del Estado de Chihuahua por la Participación en el Primer Foro Estatal de Resultados en Ciencia y Tecnología - FOMIX Chihuahua 2009 realizado en Chihuahua, Chih., México.
- 2009** Reconocimiento al Artículo *Characterization of the Semiquinones and Quinones of (-)-Epicatechin by Means of Computational Chemistry*, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 897 (2009) 6-11 como "Top 25 Hottest Articles.^{en} la Revista Journal of Molecular Structure: THEOCHEM para el Período Enero a Marzo de 2009
- 2009** Reconocimiento al Artículo *Theoretical Analysis of Anthracene and its Carbonyl and Carboxyl Derivatives using DFT and TD-DFT*, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 894 (2009) 64-70 como "Top 25 Hottest Articles.^{en} la Revista Journal of Molecular Structure: THEOCHEM para el Período Enero a Marzo de 2009
- 2009** Reconocimiento al Artículo *Theoretical Calculation of the Molecular Dipole Moment, Polarizability and First Hyperpolarizability of Glycinee-Sodium Nitrate*, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 905 (2009) 76-80 como "Top 25 Hottest Articles.^{en} la Revista Journal of Molecular Structure: THEOCHEM para el Período Abril a Junio de 2009
- 2010 a la fecha** Investigador Nacional Nivel III del Sistema Nacional de Investigadores (SNI) del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) – México
- 2010** 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** 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 Físicoquímica Teórica – Pachuca, Hidalgo – México
- 2010** 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 Presentación del Trabajo intitulado Química Computacional de Moléculas y Nanomateriales para Nano- y Foelectroquímica Solar en el marco de la IX Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica – Pachuca, Hidalgo – México

- 2010** Reconocimiento otorgado por la Universidad Autónoma de Sinaloa a través de la Facultad de Ingeniería Mochis por haber impartido el Seminario "Modelación Molecular de Nanomateriales para Fotosíntesis Artificial- Los Mochis, Sinaloa – México
- 2010** Reconocimiento otorgado por CHOSE and DYERS por la Participación en la International School on Organic Photovoltaics - ISOPHOS 2010 – Ventotene, Lt – Italia
- 2010** 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
- 2010** Reconocimiento otorgado por el Gobierno del Estado de Nuevo León y el Cluster de Nanotecnología de Monterrey, NL por la presentación de la Conferencia "Modelado Molecular de Nanomateriales para Fotovoltaica Molecular.^{em} el marco de Reunión NanoMonterrey 2010 – Monterrey, NL – México
- 2011** Reconocimiento otorgado por el Laboratorio de Innovación Fotovoltaica y Caracterización de Celdas Solares (LIFYCS) por la Participación en en el 1er Taller de Innovación Fotovoltaica y Celdas Solares y en la Conformación de los Grupos Temáticos Interinstitucionales – Centro de Investigación en Energía (CIE) – Temixco, Morelos – México
- 2011** Reconocimiento otorgado por el Laboratorio de Innovación Fotovoltaica y Caracterización de Celdas Solares (LIFYCS) por la Participación en en el 1er Taller de Innovación Fotovoltaica y Celdas Solares con la Ponencia "Modelado Molecular de Nanomateriales para Fotovoltaica Molecular-Centro de Investigación en Energía (CIE) – Temixco, Morelos – México
- 2011** Reconocimiento otorgado HOPV por la Participación en la 3rd Hybrid and Organic Photovoltaics Conference – Valencia – España
- 2011** Reconocimiento otorgado por el Comité Organizador de la IV European School of Molecular Nanoscience, Peñíscola, Castellón, – España, por la presentación de la Conferencia: Computational Molecular Nanoscience in Mexico - The NANOCOSMOS Virtual Lab

A las anteriormente señaladas actividades académicas, deben agregarse seminarios y conferencias periódicas en distintos centros universitarios. Se destacan conferencias en la siguientes instituciones:

- Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Avanzadas (INIFTA), La Plata, República Argentina
- Department of Chemistry, University of North Carolina at Chapel Hill, Chapel Hill, NC, USA

- Departamento de Química de la Universidad de Puerto Rico, Río Piedras, Puerto Rico
- Departamento de Física Teórica de la Universidad de Valladolid, Valladolid, España
- Departamento de Química de la Universidad de La Habana, La Habana, Cuba
- Departamento de Ciencias Básicas de la Universidad Nacional de Luján, Luján, República Argentina
- Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV), Chihuahua, México
- Instituto Tecnológico de Chihuahua II, Chihuahua, México
- Colegio de Bachilleres Nro 1 (COBACH 1), Chihuahua, México
- Colegio de Bachilleres Nro 8 (COBACH 8), Chihuahua, México
- Industrias Monterrey Sociedad Anónima (IMSA), Monterrey, México
- Departamento de Química de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP), Puebla, México
- Sociedad Química de México, México DF, México
- Instituto Tecnológico de Querétaro, Querétaro, México
- College of Nanoscale Science and Engineering, State University of New York (SUNY), Albany, NY, USA
- Departamento de Química de la Universidad de Guanajuato, Guanajuato, México
- Department of Chemistry, Arizona State University, Phoenix, AZ, USA
- Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Pachuca, Hidalgo, México
- Centro de Investigación en Energía (CIE), Temixco, Morelos, México

9. Proyectos de Investigación

1993 Proyecto: *Diseño y Desarrollo de Drogas y Moléculas Bioactivas por Medio de Técnicas de Computación y Química Teórica*
 Centro de Química Inorgánica (CEQUINOR) - Universidad Nacional de La Plata - La Plata - República Argentina

- 1994** Proyecto: *Estudio de la Reactividad Química, Diseño y Desarrollo de Drogas y Moléculas de Interés Biológico por Medio de Técnicas de Química Computacional, Especialmente Aplicado al Caso de los Tiadiazoles y Compuestos Relacionados*
Centro de Química Inorgánica (CEQUINOR) - Universidad Nacional de La Plata - La Plata - República Argentina
- 1994-1999** Proyecto UNLu-1, *Diseño y Desarrollo de Drogas y Moléculas Bioactivas por Medio de Técnicas de Computación y Química Teórica*
Universidad Nacional de Luján - Argentina
- 1994-1999** Proyecto UNLu-2, *Estudio de la Reactividad Química, Diseño, Desarrollo y Modelado Molecular por Medio de Técnicas de Química Computacional, con Especial Aplicación al Caso de Aditivos y Aromatizantes Alimentarios*
Universidad Nacional de Luján - Argentina
- 1999-2001** *Desarrollo de Modelos Moleculares que Describan el Comportamiento de Compuestos Poliméricos Dopados con Diferentes Substancias*
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua, México
- 2000-2001** *Simulación Computacional de Materiales Moleculares con Propiedades Ópticas No Lineales para su Utilización en el Desarrollo de Sensores Químicos*
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua, México
- 2001-2004** Proyecto CONACYT CB-34697-U – *Simulación Computacional de Materiales Moleculares con Propiedades Ópticas No Lineales para su Uso en la Fabricación de Detectores de Fugas de Hidrocarburos*
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua, México
- 2004-2005** Proyecto Fondo Sectorial SAGARPA C-2004-01 – *Simulación Computacional de la Estructura y Propiedades Moleculares de Solanina y Solanidina*
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua, México
- 2005-2006** Proyecto Fondo Mixto de la Ciudad de Puebla - FOMIX PUE-2004-C02-2 – *Simulación Computacional de la Estructura y Propiedades de Materiales Moleculares Potencialmente Útiles para la Fabricación de Dispositivos Fotovoltaicos y Celdas Solares*
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua, México
- 2005-2006** Proyecto ICNAM - CONACYT - University of Texas at Austin (UT - Austin) *UT(Austin) - CIMAV Collaborative Research Proposal in*

Computational Nanotechnology

Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua, México

2006-2007 Proyecto - CIMAV - Universidad Autónoma de Chihuahua (UACH) – *Estudio de los Efectos Producidos por Sistemas Dopantes en Semiconductores Orgánicos Mediante DFT*

Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua, México

2006-2007 Proyecto CIMAV - CONACYT - Centro de Investigación en Polímeros del Grupo COMEX – *Simulación Computacional de las Constantes de Velocidad y las Relaciones de Reactividad de Diferentes Monómeros de Uso Frecuente en la Industria de Pinturas*

Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua, México

2006-2007 Proyecto CIMAV - CONACYT - Centro de Investigación en Polímeros del Grupo COMEX – *Simulación Computacional de la Solubilidad del Complejo Co[(Etilendiamino)(2-Etilhexanoato)₂] en una Mezcla de Disolventes*

Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua, México

2006-2007 Proyecto CIMAV - CONACYT - Centro de Investigación en Polímeros del Grupo COMEX – *Simulación Computacional de Nuevos Cromóforos Luminiscentes Derivados de la Maleiperinona*

Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua, México

2006-2009 Proyecto CIMAV - State University of New York (SUNY) - Albany, NY - USA – *Computational Characterization of the Molecular Structure and Properties of Molecular Devices*

Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua, México

2006-2009 Proyecto CIMAV - State University of New York (SUNY) - Albany, NY - USA – *Computational Development of a DNA Based Nanosensor for the Detection of the Tuberculosis Disease*

Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua, México

2007 Proyecto Financiado por CONACYT y Grupo PROLEC – *Búsqueda del Estado del Arte sobre la Nanotecnología y sus Posibles Implicaciones en Transformadores Eléctricos*

Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua, México

- 2007-2008** Proyecto CIMAV - Universidad Autónoma de Chihuahua (UACH)
 – *Estudio Químico Cuántico de las Propiedades Electrónicas de Materiales Orgánicos Semiconductores*
 Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua, México
- 2007-2008** Proyecto Financiado por CONACYT y la National Science Foundation (NSF), USA para la Realización de Investigaciones Conjuntas entre CIMAV y Texas A & M University, Station College, Texas, USA – *Molecular Dynamics Studies of Self-Assembled Monolayers of Organic Compounds on Metallic Surfaces*
 Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua, México y Texas A & M University, College Station, Texas, USA
- 2007-2009** Proyecto Fondo Mixto del Estado de Chihuahua - FOMIX CHIH-2006-C01-57972 – *Caracterización Molecular Computacional de Materiales para Nanomedicina: Proyecto NANO-TBC*
 Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua, México
- 2007-2010** Proyecto Financiado por CONACYT, Gobierno del Estado de Chihuahua y CIMAV – *Laboratorio Nacional de Nanotecnología en el CIMAV*
 Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua, México
- 2007-2008** Proyecto CIMAV - Universidad Autónoma de Chihuahua (UACH)
 – *Enseñanza de la Química Mediante Simulación Computacional Empleada en la Predicción de Propiedades Moleculares*
 Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua, México
- 2007-2010** Proyecto en Convenio entre el CIMAV y la Arizona State University, Tempe, AZ, USA – *Modelación y Simulación de Estructuras Biomoleculares y Transporte de Carga en Líquidos*
 Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua, México
- 2007-2010** Proyecto en Convenio entre el CIMAV y la Arizona State University, Tempe, AZ, USA – *Desarrollo de Diodos Orgánicos Emisores de Luz y Fotovoltaicos Orgánicos*
 Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua, México
- 2008-2009** Proyecto Financiado por CONACYT y la National Science Foundation (NSF), USA para la Realización de Investigaciones Conjuntas entre CIMAV y Texas A & M University, Station College, Texas, USA – *Molecular Dynamics Studies of Self-Assembled Monolayers of Organic Compounds on Metallic Surfaces*

Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua,
México y Texas A & M University, College Station, Texas, USA

2008-2011 Proyecto en Convenio entre el CIMAV y la Arizona State University, Tempe, AZ, USA – *Printed Carbon Nanotubes for Electronic and Optical Applications*
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua,
México

2008-2011 Proyecto en Convenio entre el CIMAV y la Arizona State University, Tempe, AZ, USA – *Surface Plasmon Enhanced Photovoltaics with Non-planar Geometries for Applications in Organic and Inorganic Photovoltaics*
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua,
México

2008-2010 Proyecto Grupo KUO - CONACYT – *Obtención de Materiales Acrílicos con Propiedades Electrocrómicas*
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua,
México

2008-2011 Proyecto Fondo Mixto del Estado de Baja California - FOMIX BC-2008-68363 – *Caracterización Molecular Computacional de NANOMELFOS - Nanomateriales Moleculares Electroluminiscentes y Fotovoltaicos Orgánicos*
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua,
México

2012-2015 Proyecto de la Convocatoria Conjunta entre CONACYT y CNPq en Nanomateriales - Proyecto No 175089 – *INPEMA - Nanopartículas y Medio Ambiente: Impacto de las Nanopartículas en Muestras Ambientales*
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV), Chihuahua,
México

10. Experiencia Profesional en la Industria Privada

1977-1981 Ayudante de Investigación
Química Estrella, SA - Buenos Aires - República Argentina
Tema de Trabajo: *Estudio de Métodos de Síntesis Orgánica para su Aplicación en la Preparación de Herbicidas y Pesticidas*

1981-1982 Ayudante de Investigación
Alba, SA - Buenos Aires - República Argentina
Tema de Trabajo: *Estudio de Polímeros y su Aplicación en la Preparación de Pinturas en Polvo*

1982-1983 Ayudante de Investigación

Química Estrella, SA - Buenos Aires - República Argentina

Tema de Trabajo: *Estudio de Métodos de Síntesis Orgánica para su Aplicación en la Preparación de Herbicidas y Pesticidas*

11. Contribuciones a Congresos y Simposios

1. 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, **M.D. Glossman**, M.C. Donnamaría, E.A. Castro y F.M. Fernández, Reunión Nacional de Física - La Plata, República Argentina, 1982
2. 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, **M.D. Glossman**, M.C. Donnamaría, E.A. Castro y F.M. Fernández, Tercer Congreso Argentino de Fisicoquímica, La Plata, República Argentina, 1983
3. Aplicación de las Correcciones de Auto-Repulsión e Intercambio a una Nueva Solución de la Ecuación Variacional de Thomas-Fermi, **M.D. Glossman**, M.C. Donnamaría, E.A. Castro y F.M. Fernández, Congreso Iberoamericano de Ciencias Químicas, Lima, Perú, 1983
4. Un Nuevo Método Variacional Aplicado al Oscilador Anarmónico Cuártico, **M.D. Glossman**, E.A. Castro y F.M. Fernández, Congreso Iberoamericano de Ciencias Químicas, Lima, Perú, 1983
5. Determinación de las Propiedades Termodinámicas a Partir de dos Nuevas Formulaciones Analíticas para la Función de Partición del Oscilador de Morse, **M.D. Glossman**, F.M. Fernández y E.A. Castro, Congreso Iberoamericano de Ciencias Químicas, Lima, Perú, 1983
6. Potenciales Heteroatómicos y Funcionales de la Densidad, **M.D. Glossman**, M.C. Donnamaría, E.A. Castro y F.M. Fernández, XVI Congreso Latinoamericano de Química, Río de Janeiro, Brasil, 1984
7. Una Función de Prueba para la Descripción de Propiedades Atómicas Mediante Funcionales de la Densidad, **M.D. Glossman**, M.C. Donnamaría y E.A. Castro, Primer Congreso Panamericano de Química, San Juan, Puerto Rico, 1985
8. Interacciones Repulsivas entre Átomos de Distintos Gases Nobles Utilizando Funcionales de la Densidad, **M.D. Glossman**, M.C. Donnamaría y E.A. Castro, IV Congreso Argentino de Fisicoquímica, Río Cuarto, República Argentina, 1985

9. Llenado de la Tabla Periódica Mediante Funcionales de la Densidad, M.C. Donnamaría, **M.D. Glossman** y E.A. Castro, XVII Congreso Argentino de Química, Bahía Blanca, República Argentina, 1985
10. Función de Wu Modificada para el Cálculo de Algunas Propiedades Atómicas, **M.D. Glossman**, M.C. Donnamaría y E.A. Castro, XVII Congreso Argentino de Química, Bahía Blanca, República Argentina, 1985
11. Un Nuevo Principio Variacional para la Obtención de Soluciones Analíticas de la Ecuación de Thomas-Fermi para Átomos en Campos Magnéticos Intensos, **M.D. Glossman**, M.C. Donnamaría y E.A. Castro, 3er Simposio Brasileiro de Química Teórica, São Carlos, Brasil, 1985
12. Validez del Nuevo Principio Variacional para el Modelo de Thomas-Fermi para Átomos en Campos Magnéticos Fuertes, **M.D. Glossman** y E.A. Castro, XVII Congreso Latinoamericano de Química, Bogotá, Colombia, 1986
13. Solución Analítica Aproximada de la Ecuación de Thomas-Fermi para Iones Positivos en Campos Magnéticos Fuertes, **M.D. Glossman** y E.A. Castro, XVII Congreso Latinoamericano de Química, Bogotá, Colombia, 1986
14. La Corrección por Intercambio Estadístico en el Modelo de Thomas-Fermi para Átomos en Campos Magnéticos Fuertes, **M.D. Glossman** y E.A. Castro, V Congreso Argentino de Físicoquímica, Mar del Plata, República Argentina, 1987
15. Aplicación de la Teoría Thomas-Fermi-Dirac-Weizsacker al Cálculo de Propiedades Atómicas, **M.D. Glossman** y E.A. Castro, V Congreso Argentino de Físicoquímica, Mar del Plata, República Argentina, 1987
16. Atomic Properties Through Extended Thomas-Fermi-Dirac-Weizsacker - Theory, **M.D. Glossman** and E.A. Castro, 4o Simpósio Brasileiro de Química Teórica, Caxambu, Brasil, 1987
17. Una Introducción Elemental a la Teoría de los Funcionales de la Densidad.II. Aplicaciones al Estudio de Átomos, **M.D. Glossman** y E.A. Castro, XVIII Congreso Argentino de Química, Corrientes, República Argentina, 1987
18. Estructura Cristalina y Funcionales de la Densidad, **M.D. Glossman** y E.A. Castro, Reunión Nacional de Física, Bariloche, República Argentina, 1987
19. Variational Principle for Obtaining Approximate Analytical Solutions of the Thomas-Fermi Equation for Atoms in a Strong Magnetic Field, **M.D. Glossman** and E.A. Castro, 10th Canadian Symposium on Theoretical Chemistry, Banff, Alberta, Canadá, 1989

20. Un Estudio Preliminar del Modelo de Funcionales de la Densidad Superlocalizado, **M.D. Glossman** y E.A. Castro, XVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, La Plata, República Argentina, 1989
21. Some Applications of Scheidemann-Dreizler's Solution of the TFDW Equation, **M.D. Glossman** and E.A. Castro, Ohio Supercomputer Center Workshop on Theory and Applications of Density Functional Approaches to Chemistry, Columbus, Ohio, USA, 1990
22. Estudio Variacional del Funcional de Energía Cinética de Plindov y Pogrebnya, **M.D. Glossman** y E.A. Castro, XIX Congresso Internazionale dei Chimichi Teorici dei Paesi di Espressione Latina, Roma, Italia, 1990
23. Análisis de la Solución de Scheidemann-Dreizler de la Ecuación de Thomas-Fermi-Dirac-Weizsacker, **M.D. Glossman** y E.A. Castro, III Congreso Boliviano de Química, La Paz, Bolivia, 1990
24. Distribution of Interatomic Distances in Large Metallic Clusters, **M.D. Glossman**, M.P. Iñiguez and J.A. Alonso, XIII International Symposium on Molecular Beams, El Escorial, Madrid, España, 1991
25. Non-Local Approximation to the Exchange and Kinetic Energy Functionals. Application to Metallic Clusters, **M.D. Glossman**, A. Rubio, Ll. Serra, L.C. Balbás and J.A. Alonso, XIII International Symposium on Molecular Beams, El Escorial, Madrid, España, 1991
26. Distribution of Interatomic Distances in Large Metallic Clusters, **M.D. Glossman**, M.P. Iñiguez and J.A. Alonso, NATO-Advanced Study Institute - Metal-Ligand Interactions: From Atoms, to Clusters, to Surfaces, Cetraro, Calabria, Italia, 1991
27. Non-Local Approximation to the Exchange and Kinetic Energy Functionals. Application to Atoms, **M.D. Glossman**, A. Rubio, L.C. Balbás and J.A. Alonso, 4th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics, Centro Stefano Franscino, Monte Verità, Suiza, 1991
28. Non-Local Approximation to the Exchange and Kinetic Energy Functionals. Application to Metallic Clusters, **M.D. Glossman**, A. Rubio, Ll. Serra, L.C. Balbás and J.A. Alonso, Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física, Universidad de Valladolid, Valladolid, España, 1991
29. Funcional No Local de Energía Cinética: Na_N ($N < 800$), **M.D. Glossman**, II Reunión Nacional sobre Física de Micropartículas, Valladolid, España, 1991
30. Non Local Exchange and Kinetic Energy Density Functionals for Electronic Systems, **M.D. Glossman**, A. Rubio, L.C. Balbás and J.A. Alonso,

SANIBEL Symposia on Atomic, Molecular and Condensed Matter Theory, Computational Methods, and the Application of Fundamental Theory to Problems of Biology and Pharmacology, St. Augustine, Florida, USA, 1992

31. Atomic Structure of Metallic Clusters of Medium Size, J.A. Alonso, **M.D. Glossman** and M.P. Iñiguez, Adriatico Research Conference on Clusters and Fullerenes, Trieste, Italia, 1992
32. Asymptotic Properties of Metallic Clusters with the Non-Local Approximation to the Exchange and Kinetic Energy Functional, **M.D. Glossman**, A. Rubio, L.C. Balbás and J.A. Alonso, Sixth International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters, Chicago, USA, 1992
33. Atomic Structure of Metallic Clusters of Large Size, **M.D. Glossman**, Q. Wang, M.P. Iñiguez and J.A. Alonso, Norman March 65th Birthday Celebration - Applications of Density Functional Theory, Oxford, United Kingdom, 1992
34. Funcionales No Locales de la Densidad de Energía Cinética y de Intercambio con Comportamiento Asintótico Correcto. Aplicación al Estudio de Átomos y Especies Iónicas, **M.D. Glossman**, A. Rubio, L.C. Balbás y J.A. Alonso, VIII Congreso Argentino de Fisicoquímica, Mar del Plata, República Argentina, 1993
35. Study of the Relation Between the Chemical Potential of Atoms and Electrostatic Potentials Using Nonlocal Exchange and Kinetic-Energy Functionals, **M.D. Glossman**, L.C. Balbás and J.A. Alonso, 5th International Conference on the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics, Como, Italia, 1993
36. Aplicación de la Teoría del Funcional de la Densidad al Estudio de la Reactividad Química de los Tiadiazoles, **M.D. Glossman**, XXIe Congrès International des Chimistes Theoreticiens D'Expression Latine, Grenoble, Francia, 1993
37. Sensitivity Analysis of Substituted Thiadiazoles, **M.D. Glossman**, VII Simpósio Brasileiro de Química Teórica, Caxambu, Brasil, 1993
38. Electronic Structure and Charge Sensitivity Analysis of 3,4-Diphenyl-1,2,5-Thiadiazole 1,1-Dioxide, **M.D. Glossman**, Sanibel Symposium, Ponte Vedra Beach, USA, 1994
39. Charge Sensitivity Analysis of 1,2,5-Thiadiazoles and their Benzo Derivatives, **M.D. Glossman**, Thirty Years of Density Functional Theory: Concepts and Applications - Satellite Symposium of the 8th International Congress of Quantum Chemistry, Cracow, Poland, 1994
40. Comparación de Métodos Computacionales Aplicados al Estudio de los Tiadiazoles y Compuestos Relacionados, **M.D. Glossman**, XX Congreso Argentino de Química, Córdoba, República Argentina, 1994

41. 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, **M.D. Glossman**, XX Congreso Argentino de Química, Córdoba, República Argentina, 1994
42. Determinación de la Reactividad Química en Diferentes Posiciones en las Moléculas de Tiadiazoles Mediante una Determinación Directa de las Sensibilidades Moleculares, **M.D. Glossman**, XX Congreso Argentino de Química, Córdoba, República Argentina, 1994
43. Una Aproximación del Funcional de la Densidad a la Estructura Molecular de los Tiadiazoles, **M.D. Glossman**, IX Congreso Argentino de Fisicoquímica, San Luis, República Argentina, 1994
44. Estudio de la Correlación entre la Dureza Química, la Polarizabilidad y el Tamaño de Agregados Metálicos de Sodio y Magnesio, **M.D. Glossman**, IX Congreso Argentino de Fisicoquímica, San Luis, República Argentina, 1994
45. Estudio Teórico y Experimental del Espectro Ultravioleta de Derivados del 1,1-Dioxo-2,5-Tiadiazol, **M.D. Glossman**, J.A. Caram, E.O. Vasini, M.V. Mirífico y S.L. Aimone, IX Congreso Argentino de Fisicoquímica, San Luis, República Argentina, 1994
46. Cálculos Semiempíricos en Tiadiazoles Sustituídos: Una Comparación de las Estructuras y Otros Parámetros por Métodos MNDO, AM1 y PM3, **M.D. Glossman**, J.A. Caram, E.O. Vasini, O. Piro y E. E. Castellano, IX Congreso Argentino de Fisicoquímica, San Luis, República Argentina, 1994
47. Blandura Local, Funciones de Fukui y Reactividad Química del 1,1-Dioxo-3-Metil-4-Fenil-2,5-Tiadiazol, **M.D. Glossman**, J.A. Caram, E.O. Vasini, O. Piro y E. E. Castellano, IX Congreso Argentino de Fisicoquímica, San Luis, República Argentina, 1994
48. Electronegativity Equalization Method and Charge Sensitivity Analysis of Substituted Thiadiazoles, **M.D. Glossman**, Sanibel Symposium, St. Augustine, Florida, USA, 1995
49. Charge Sensitivity Analysis of Substituted Thiadiazoles, **M.D. Glossman**, Terceira Conferencia Latinoamericana de Fisico-Química Orgánica, Florianópolis, SC, Brasil, 1995
50. Molecular and Electronic Structure of Some Thiadiazole Derivatives, E.E. Castellano, O.E. Piro, **M.D. Glossman**, J.A. Caram and E.A. Vasini, XVIII Encontro Nacional de Física da Materia Condensada, Caxambu, Brasil, 1995

51. Molecular and Electronic Structure of Some Thiadiazole Derivatives, E.E. Castellano, O.E. Piro, **M.D. Glossman**, J.A. Caram and E.A. Vasini, Reuniao da Sociedade Brasileira de Cristalografia, Caxambu, Brasil, 1995
52. Cálculos del Funcional de la Densidad Locales y No Locales de la Estructura Molecular de Tiadiazoles Isómeros, **M.D. Glossman**, XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Pucón, Chile, 1995
53. Molecular and Electronic Structure of 1,2,5-Thiadiazole 1,1-Dioxide Derivatives, E.E. Castellano, O.E. Piro, J.A. Caram, M.V. Mirífico, S.L. Aimone, E.J. Vasini and **M.D. Glossman**, IUCr XVII Congress and General Assembly, Seattle, Washington, USA, 1996
54. Química Computacional y Diseño Molecular de Aromatizantes Alimentarios, **M.D. Glossman**, XXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Cáceres, España, 1996
55. Aplicación de la Teoría del Funcional de la Densidad al Estudio de la Reactividad Química de los Tiadiazoles Monóxidos, **M.D. Glossman**, XXI Congreso Argentino de Química, Bahía Blanca, 1996
56. Local and Nonlocal Density Functional Calculations of the Molecular Structure of Isomeric Thiadiazole 1-Monoxides, **M.D. Glossman**, 213th ACS National Meeting - Division of Computers in Chemistry, San Francisco, California, USA, 1997
57. Análisis de Sensibilidad de Cargas de Tiadiazoles Monóxidos, **M.D. Glossman**, X Congreso Argentino de Fisicoquímica, San Miguel de Tucumán, 1997
58. Algunas Características de la Distribución de la Densidad Electrónica en Compuestos Aromáticos, **M.D. Glossman**, X Congreso Argentino de Fisicoquímica, San Miguel de Tucumán, 1997
59. Criterios de Aromaticidad Basados en las Relaciones σ/π de la Distribución de la Densidad Electrónica, **M.D. Glossman**, X Congreso Argentino de Fisicoquímica, San Miguel de Tucumán, 1997
60. Estudio Funcional de la Densidad de la Adición de Etileno y Acetileno al 1,3,4-Tiadiazol, **M.D. Glossman**, X Congreso Argentino de Fisicoquímica, San Miguel de Tucumán, 1997
61. Potenciales Químicos, Durezas químicas y Funciones de Fukui de Butadienos, Pirroles y Ciclopentadienos, **M.D. Glossman**, X Congreso Argentino de Fisicoquímica, San Miguel de Tucumán, 1997
62. Aplicación de la Teoría del Funcional de la Densidad al Estudio de Tiadiazolinas y Tiadiazolidinas, **M.D. Glossman**, J.A. Caram, E.J. Vasini, M.V. Mirífico, S.L. Aimone, O.E. Piro y E.E. Castellano, X Congreso Argentino de Fisicoquímica, San Miguel de Tucumán, 1997

63. Estudio Químico-Cuántico de la Función de Fukui como un Índice de Reactividad en Derivados del 1,2,5-Tiadiazol 1,1-Dióxido, **M.D. Glossman**, J.A. Caram, E.J. Vasini, M.V. Mirífico, S.L. Aimone, O.E. Piro y E.E. Castellano, X Congreso Argentino de Fisicoquímica, San Miguel de Tucumán, 1997
64. Estudio Cristalográfico y Químico-Cuántico de la 2-Metil-3-Etoxi-3,4-Difenil 1,2,5-Tiadiazolidina 1,1-Dióxido, **M.D. Glossman**, J.A. Caram, E.J. Vasini, M.V. Mirífico, S.L. Aimone, O.E. Piro y E.E. Castellano, X Congreso Argentino de Fisicoquímica, San Miguel de Tucumán, 1997
65. Análisis Cristalográfico y Químico-Cuántico de la Estructura y Reactividad Química del 3,4-Difenil 1,2,5-Tiadiazol 1-Monóxido, **M.D. Glossman**, J.A. Caram, E.J. Vasini, M.V. Mirífico, S.L. Aimone, O.E. Piro y E.E. Castellano, X Congreso Argentino de Fisicoquímica, San Miguel de Tucumán, 1997
66. Estructura Electrónica y Molecular de Derivados del 1,2,5-Tiadiazol 1,1-Dióxido. Parte II, **M.D. Glossman**, J.A. Caram, E.J. Vasini, M.V. Mirífico, S.L. Aimone, O.E. Piro y E.E. Castellano, X Congreso Argentino de Fisicoquímica, San Miguel de Tucumán, 1997
67. Estudio Topológico y Análisis Vibracional de Tiadiazoles Isómeros, **M.D. Glossman**, XXIV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Puebla, México, 1998
68. Aplicación de Conceptos Derivados de la Teoría del Funcional de la Densidad al Estudio de la Reactividad Química de Tiadiazoles Monóxidos, **M.D. Glossman**, XXIV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Puebla, México, 1998
69. Cálculos del Funcional de la Densidad Locales y No Locales de la Estructura y Reactividad Química de Tiadiazolinas Isómeras, **M.D. Glossman**, XXIV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Puebla, México, 1998
70. Crystal Structure and MO Calculations of Condensed Benzenic 1,2,5-Thiadiazole Derivatives, E.E. Castellano, O.E. Piro, J.A. Caram, M.V. Mirífico, E.J. Vasini and **M.D. Glossman**, 18th Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, Glasgow, Escocia, 1999
71. Descriptores de Reactividad Química y su Aplicación al Estudio de Tiadiazoles, Tiadiazolinas y Tiadiazolidinas, **M.D. Glossman**, XVI Congreso Argentino de Fisicoquímica, Santa Fe, Argentina, 1999
72. Estudio Topológico y Análisis Vibracional de Tiadiazoles Isómeros, B.H. Tiraboschi y **M.D. Glossman**, Jornadas de la Ciencia y la Tecnología, Luján, Argentina, 1999

73. Aplicación de Conceptos Derivados de la Teoría del Funcional de la Densidad al Estudio de la Reactividad Química de Tiadiazoles Monóxidos, B.H. Tiraboschi y **M.D. Glossman**, Jornadas de la Ciencia y la Tecnología, Luján, Argentina, 1999
74. Cálculos del Funcional de la Densidad Locales y No Locales de la Estructura y Reactividad Química de Tiadiazolinas Isómeras, B.H. Tiraboschi y **M.D. Glossman**, Jornadas de la Ciencia y la Tecnología, Luján, Argentina, 1999
75. Simulación Computacional de la Estructura y Reactividad Química de Oligothiadiatzoles, N. Flores-Holguín, A. Márquez-Lucero y **D. Glossman-Mitnik**, 27eme Congr s de Chimistes Theoriciens d'Expression Latine (CHITEL 2001), Toulouse, Francia, 2001
76. DFT Computational Thermochemistry of Oligothiadiatzoles, N. Flores-Holgu n, A. M rquez-Lucero y **D. Glossman-Mitnik**, 9th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics (DFT 2001), San Lorenzo de El Escorial, Madrid, Espa a, 2001
77. Computational Simulation of the Molecular Structure of Oligothiadiatzoles, N. Flores-Holgu n, A. M rquez-Lucero y **D. Glossman-Mitnik**, Electronic Structure and Chemical Reactivity International Symposium (ESCR 2001), Bellaterra, Barcelona, Espa a, 2001
78. Semiempirical Calculations on Emulsion Polymerization Precursors, N. Flores-Holgu n, **D. Glossman-Mitnik**, A. Zaragoza-Contreras and A. M rquez-Lucero, VII International Conference on Advanced Materials (ICM 2001), Canc n, M xico, 2001
79. A DFT Approach to the Molecular Structure and Nonlinear Optical Properties of Oxydized Thiadiazole Derivatives, N. Flores-Holgu n, **D. Glossman-Mitnik** and A. M rquez-Lucero, VII International Conference on Advanced Materials (ICM 2001), Canc n, M xico, 2001
80. Nonlinear Optical Properties of Thiadiazole Oligomers, N. Flores-Holgu n, **D. Glossman-Mitnik** and A. M rquez-Lucero, VII International Conference on Advanced Materials (ICM 2001), Canc n, M xico, 2001
81. A Theoretical Study on the Aromaticity of Thiadiazoles and Related Compounds, N. Flores-Holgu n, **D. Glossman-Mitnik** and A. M rquez-Lucero, VII International Conference on Advanced Materials (ICM 2001), Canc n, M xico, 2001
82. DFT Computational Thermochemistry of Oligothiadiatzoles, N. Flores-Holgu n, **D. Glossman-Mitnik** and A. M rquez-Lucero, VII International Conference on Advanced Materials (ICM 2001), Canc n, M xico, 2001

83. Computational Simulation of the Molecular Structure and Properties of Oligothiadiazoles, N. Flores-Holguín, **D. Glossman-Mitnik** and A. Márquez-Lucero, VII International Conference on Advanced Materials (ICM 2001), Cancún, México, 2001
84. Molecular Design of Organic Nonlinear Optics: Dipole moment, Polarizability and Hyperpolarizabilities of Thiadiazole Oligomers Investigated by Density Functional Theory, N. Flores-Holguín, **D. Glossman-Mitnik** and A. Márquez-Lucero, SPIE's 47th Annual Meeting, Seattle, Washington, USA, 2002
85. Computational Simulation of the Molecular Structure and Properties of Oligothiadiazoles, N. Flores-Holguín, and **D. Glossman-Mitnik**, 4th European Computational Chemistry Conference (EUCCO-CC4), Assisi, Italia, 2002
86. New Materials for Optics and Electronics: DFT Calculations of Oligothiadiazoles, N. Flores-Holguín and **D. Glossman-Mitnik**, Electronic Structure: Properties and Applications (ESPA 2002), Sevilla, España, 2002
87. Oportunidades en Química Computacional, **D. Glossman-Mitnik**, Primera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Guanajuato, México, 2002
88. Simulación Computacional de Moléculas Orgánicas con Posibles Propiedades Inhibidoras de la Corrosión, L.M. Rodríguez-Valdez, A. Martínez-Villafañe y **D. Glossman-Mitnik**, Primera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Guanajuato, México, 2002
89. Construcción de una Supercomputadora Virtual Aplicada a la Química Computacional, L. Licón-Padilla, J. Solís-Correa y **D. Glossman-Mitnik**, Primera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Guanajuato, México, 2002
90. Simulación Computacional de la Estructura y Propiedades Moleculares de los Oligotiadiazoles, N. Flores-Holguín y **D. Glossman-Mitnik**, Primera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Guanajuato, México, 2002
91. Simulación Computacional de Compuestos Orgánicos con Posibles Propiedades Inhibidoras de la Corrosión, L.M. Rodríguez-Valdez, A. Martínez-Villafañe y **D. Glossman-Mitnik**, XVIII Reunión de la Sociedad Mexicana de Electroquímica, 2003
92. Caracterización Molecular Computacional de Flavonoides de Manzana, A.M. Mendoza-Wilson y **D. Glossman-Mitnik**, 29eme Congrès des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine (CHITEL 2003), Marrakech, Marruecos, 2003

93. Caracterización Molecular Computacional de Inhibidores Orgánicos de Corrosión, L.M. Rodríguez-Valdez, A. Martínez-Villafañe y **D. Glossman-Mitnik**, 29eme Congr s des Chimistes Th oriciens d'Expression Latine (CHITEL 2003), Marrakech, Marruecos, 2003
94. Caracterizaci n Molecular Computacional de Tripanosomicidas Basados en el Anillo Tiadiaz lico, N. Flores-Holgu n y **D. Glossman-Mitnik**, 29eme Congr s des Chimistes Th oriciens d'Expression Latine (CHITEL 2003), Marrakech, Marruecos, 2003
95. Caracterizaci n Molecular Computacional de Flavonoides de Manzana, A.M. Mendoza-Wilson y **D. Glossman-Mitnik**, Segunda Reuni n Mexicana de Fisicoqu mica Te rica, Guanajuato, M xico, 2003
96. Caracterizaci n Molecular Computacional de Inhibidores Org nicos de Corrosi n, L.M. Rodr guez-Valdez, A. Mart nez-Villafa ne y **D. Glossman-Mitnik**, Segunda Reuni n Mexicana de Fisicoqu mica Te rica, Guanajuato, M xico, 2003
97. Caracterizaci n Molecular Computacional de Tripanosomicidas Basados en el Anillo Tiadiaz lico, N. Flores-Holgu n y **D. Glossman-Mitnik**, Segunda Reuni n Mexicana de Fisicoqu mica Te rica, Guanajuato, M xico, 2003
98. Simulaci n Computacional de la Estructura y Propiedades Moleculares de Solanina y Solanidina, **D. Glossman-Mitnik**, XXX Congreso Internacional de Qu micos Te ricos de Expresi n Latina (QUITEL 2004) , Porto, Portugal, 2004
99. Computational Simulation of the Molecular Structure and Properties of Solanine and Solanidine, **D. Glossman-Mitnik**, Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2004), Valladolid, Espa a, 2004
100. Simulaci n Computacional de la Estructura y Propiedades Moleculares de los Oligotiadiazoles, N. Flores-Holgu n y **D. Glossman-Mitnik**, XVII Congreso de la Sociedad Polim rica de M xico, Chihuahua, M xico, 2004
101. Nanofabricaci n de Sensores Utilizando Pol meros Estructurados, E. L pez-Mart nez, **D. Glossman-Mitnik** y A. M rquez-Lucero, XVII Congreso de la Sociedad Polim rica de M xico, Chihuahua, M xico, 2004
102. Caracterizaci n Computacional de la Estructura y Propiedades Moleculares de los Flavonoides Quercetina y (+)-Catequina, A.M. Mendoza-Wilson y **D. Glossman-Mitnik**, XVII Congreso de la Sociedad Polim rica de M xico, Chihuahua, M xico, 2004
103. An lisis de la Glicosilaci n Espont nea del Grupo Amino en Peque os P ptidos, A. Valdez-Aguirre y **D. Glossman-Mitnik**, Tercera Reuni n Mexicana de Fisicoqu mica Te rica, Puebla, M xico, 2004

104. Estudio Computacional de la Estructura y Propiedades Moleculares de los Flavonoides Catequina y Epicatequina, A.M. Mendoza-Wilson y **D. Glossman-Mitnik**, Tercera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Puebla, México, 2004
105. Estudio Computacional de la Estructura y Propiedades Moleculares de Híbridos Fullerenol-Oligofenilvinileno, E. López-Martínez, A. Márquez-Lucero y **D. Glossman-Mitnik**, Tercera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Puebla, México, 2004
106. Estudio CHIH-DFT de la Estructura y Propiedades Moleculares de Solanina y Solanidina, **D. Glossman-Mitnik**, Tercera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Puebla, México, 2004
107. Correlación entre Parámetros Químico-Cuánticos y Eficiencia de Inhibición de Corrosión, L.M. Rodríguez-Valdez, A. Martínez-Villafañe y **D. Glossman-Mitnik**, Tercera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Puebla, México, 2004
108. Caracterización Molecular Computacional de la Molécula de Megazol y sus Análogos, N. Flores-Holguín y **D. Glossman-Mitnik**, Tercera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Puebla, México, 2004
109. Estudio de la Estructura y Propiedades Moleculares de la Capsicina y otros Compuestos Capsicinoides, R. Olivas-Vargas, A. Valdez-Aguirre, C. Contreras-Vega, M.E. Fuentes-Montero y **D. Glossman-Mitnik**, Cuarta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Chihuahua, México, 2005
110. Análisis de Estructura, Espectro Infrarrojo y Ultravioleta de Isoniacida, Piracinamida y Rifampicina Determinados por CHIH-DFT, M.A. Favila-Pérez y **D. Glossman-Mitnik**, Cuarta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Chihuahua, México, 2005
111. Estudio Teórico de la Reactividad de las Moléculas de α -Pineno, Canfeno y Limoneno, N. Flores-Holguín y **D. Glossman-Mitnik**, Cuarta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Chihuahua, México, 2005
112. Modelado Molecular de un Biosensor Basado en la Hibridación DNA-DNA para Detectar Mycobacterium tuberculosis, S.M. Alvarado-González, **D. Glossman-Mitnik**, E. Orrantia-Borunda, S. Arévalo-Gallegos y B.E. Rivera-Chavira, Cuarta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Chihuahua, México, 2005
113. Propiedades Moleculares y Reactividad Química de Cianidina Determinadas Mediante la Química Modelo CHIH(medium)-DFT, A.M. Mendoza-Wilson y **D. Glossman-Mitnik**, Cuarta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Chihuahua, México, 2005

114. Estudio Teórico en Derivados de Imidazolina Empleados como Inhibidores de Corrosión, L.M. Rodríguez-Valdez, W. Villamizar, M. Casales, J.G. González-Rodríguez, A. Martínez-Villafañe, L. Martínez and **D. Glossman-Mitnik**, Cuarta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Chihuahua, México, 2005
115. 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, I. Rodríguez-Sánchez, **D. Glossman-Mitnik** y A. Zaragoza-Contreras, Cuarta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Chihuahua, México, 2005
116. Computational Chemistry of the Structure and Reactivity of Organic Molecular Materials, **Daniel Glossman-Mitnik**, XLI Congreso Mexicano de Química, México DF, México, 2006
117. Cálculos Teóricos de Reactividad en Derivados del Tiadiazol como Posibles Inhibidores de la Corrosión, Luz María Rodríguez-Valdez, Amelia Valdez-Aguirre, Ramón Olivas-Vargas, María Elena Fuentes-Montero, Marco Antonio Chávez-Rojo, César Octavio Contreras-Vega y **Daniel Glossman-Mitnik**, XLI Congreso Mexicano de Química, México DF, México, 2006
118. Selectividades para la Separación de Mezclas Hidrógeno-Metano en Materiales Metal-Orgánicos Utilizando Técnicas Grand Canonical Monte Carlo, Marco Gallo-Estrada y **Daniel Glossman-Mitnik**, V Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, San Luis Potosí, México, 2006
119. Estudio Computacional de la Estructura y Propiedades Moleculares de Derivados del 1,2,5-Tiadiazol 1,1-Dióxido, Hazel Morales-Rodríguez y **Daniel Glossman-Mitnik**, V Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, San Luis Potosí, México, 2006
120. Oportunidades en Química Computacional, **Daniel Glossman-Mitnik**, V Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, San Luis Potosí, México, 2006
121. Simulación Computacional de Efectos Producidos por Grupos Funcionales en 4,9-Difenilanzolona, Empleado como Semiconductor Orgánico Tipo N, Diana Barraza-Jiménez, Marco Gallo-Estrada, Luz María Rodríguez-Valdez y **Daniel Glossman-Mitnik**, V Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, San Luis Potosí, México, 2006
122. Cálculos Ab-Initio de SnO₂:Sb, Hazel Morales-Rodríguez, Francisco Espinosa-Magaña y **Daniel Glossman-Mitnik**, V Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, San Luis Potosí, México, 2006
123. Estudio Computacional del Mecanismo Antioxidante del Flavonoide Quercetina Basado en su Secuencia de Desprotonación, Ana María Mendoza-Wilson y **Daniel Glossman-Mitnik**, V Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, San Luis Potosí, México, 2006

124. Comparación de Análisis Teóricos de Antifímicos contra Experimentales, Alejandra Favila-Pérez y **Daniel Glossman-Mitnik**, V Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, San Luis Potosí, México, 2006
125. Ordenes de Reactividad de Agentes de Transferencia Empleados en la Polimerización RAFT: Estudio teórico, Isis Rodríguez-Sánchez, **Daniel Glossman-Mitnik** y Armando Zaragoza-Contreras, V Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, San Luis Potosí, México, 2006
126. Estudio Computacional de la Estructura y Propiedades Moleculares de Derivados del C60 de Uso en Nanomedicina, Bethsy Aguilar-Castillo y **Daniel Glossman-Mitnik**, V Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, San Luis Potosí, México, 2006
127. Nano-Oportunidades en Química Computacional, **Daniel Glossman-Mitnik**, VI Congreso Internacional en Ciencia e Ingeniería de Materiales, Querétaro, México, 2006
128. Computational Study of the Molecular Structure and Properties of Fullerene-Oligophenylvinylene Hybrids, Erika López-Martínez and **Daniel Glossman-Mitnik**, ESPA 2006 - Electronic Structure: Principles and Applications, Santiago de Compostela, España, 2006
129. Oportunidades en Química Computacional, **Daniel Glossman-Mitnik**, 5to Taller Iberoamericano sobre Educación en Ciencia e Ingeniería de Materiales, Huerta Grande, Córdoba, Argentina, 2006
130. Modelación Molecular por Computadora en la UACH el CIMAV, R. Olivas, A. Valdez, O.C. Contreras, R. Olivera, D. Glossman-Mitnik, M.E. Fuentes y L.M. Rodríguez-Valdez, VI SEAMDIB, La Habana, Cuba, 2006
131. Nanotubos y Fullerenos Funcionalizados con Fármacos, Alejandra Favila-Pérez, Marco Gallo-Estrada y **Daniel Glossman-Mitnik**, 42 Congreso Mexicano de Química, Guadalajara, Jalisco, México, 2007
132. Nanostructured Materials for Solar Energy Conversion and Storage, **Daniel Glossman-Mitnik**, North American Nanocluster Initiative, Phoenix, Arizona, USA, 2007
133. Nano-Opportunities in Computational Chemistry, **Daniel Glossman-Mitnik**, European Fact Finding Mission in Nanotechnology (NanoForum), Saltillo, Coahuila, México, 2007
134. Nano-Oportunidades en Química Computacional, **Daniel Glossman-Mitnik**, 3er Verano de la Investigación Científica, Chihuahua, México, 2007
135. Nano-Oportunidades en Química Computacional, **Daniel Glossman-Mitnik**, 50 Congreso Nacional de Física, 2007

136. Estudio Teórico del Mecanismo de Reacción del α -Pineno-Canfeno, Norma Flores-Holguín y **Daniel Glossman-Mitnik**, VI Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, San Miguel Regla, Hidalgo, México, 2007
137. Electronic Structure of SnO₂:Sb by EELS and Ab Initio Calculations, Hazel Morales-Rodríguez, **Daniel Glossman-Mitnik** and Francisco Espinosa-Magaña, PASI 2007 - Pan American Advanced Study Institute, Zacatecas, México, 2007
138. DFT and Semiempirical Studies of Functionalized Carbon Nanotubes and Functionalized Fullerenes as Nanovectors for Drug Delivery of Antitubercular Compounds, Alejandra Favila-Pérez, Marco Gallo-Estrada and **Daniel Glossman-Mitnik**, PASI 2007 - Pan American Advanced Study Institute, Zacatecas, México, 2007
139. Determinación Teórica de Espectros Electrónicos en Materiales Fotovoltaicos Orgánicos, Erika I. López-Martínez, Luz M. Rodríguez-Valdez, Norma Flores-Holguín y **Daniel Glossman-Mitnik**, VI Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, San Miguel Regla, Hidalgo, México, 2007
140. Caracterización Molecular Computacional de NANOMELFOS, **Daniel Glossman-Mitnik**, 42 Congreso Mexicano de Química, Boca del Río, Veracruz, México, 2007
141. Agentes de Transferencia RAFT: Estudio Teórico, Isis Rodríguez-Sánchez, **Daniel Glossman-Mitnik** y Armando Zaragoza-Contreras, VI Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, San Miguel Regla, Hidalgo, México, 2007
142. Estructura Electrónica del SnO₂:Sb a Través de EELS y Cálculos Ab Initio, Hazel Morales-Rodríguez, **Daniel Glossman-Mitnik** y Francisco Espinosa-Magaña, VI Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, San Miguel Regla, Hidalgo, México, 2007
143. A DFT Study on the Structure and Properties of Oligothiadiazoles, Norma Flores-Holguín and **Daniel Glossman-Mitnik**, PASI 2007 - Pan American Advanced Study Institute, Zacatecas, México, 2007
144. Programa Académico Institucional de Nanotecnología, **Daniel Glossman-Mitnik**, Primer Encuentro de Investigadores del CIMAV, Chihuahua, México, 2008
145. Nanostructured Materials for Solar Energy Conversion and Storage, **Daniel Glossman-Mitnik**, US-Mexico Workshop on Materials Science and Nanotechnology, Chihuahua, México, 2008
146. Maestría en Nanotecnología y Maestría en Comercialización de la Ciencia y la Tecnología, **Daniel Glossman-Mitnik**, Reunión Nacional de Subdirectores Académicos, Matamoros, Tamaulipas, México, 2008

147. Molecular Modeling of β -Carotene as a Natural Dye for Dye-Sensitized Solar Cells, Teresita Ruiz-Anchondo and **Daniel Glossman-Mitnik**, 6th ESPA 2008 - Electronic Structure: Principles and Applications, Palma de Mallorca, España, 2008
148. Estudio Teórico de las Energías de Formación de Carbocationes Presentes en la Isomerización del α -Pino, Norma Flores-Holguín, Alfredo Aguilar-Elguézabal, Luz María Rodríguez-Valdez y **Daniel Glossman-Mitnik**, 3rd Mexican Workshop on Nanostructured Materials, México DF, México, 2008
149. Molecular Modeling of β -Carotene as a Natural Dye for Dye-Sensitized Solar Cells, Teresita Ruiz-Anchondo and **Daniel Glossman-Mitnik**, North American Nanocluster Initiative Meeting, Chihuahua, México, 2008
150. Molecular Modeling of β -Carotene as a Natural Dye for Dye-Sensitized Solar Cells, Teresita Ruiz-Anchondo and **Daniel Glossman-Mitnik**, Nanomaterials for Sustainable Energy Future: Energy Conversion, Oak Ridge, Tennessee, USA, 2008
151. Modelado Molecular en la Caracterización de β -Caroteno, Teresita Ruiz-Anchondo y **Daniel Glossman-Mitnik**, Quinto Congreso CIMAV, Chihuahua, México, 2008
152. Estudio Comparativo de Funcionales en la Descripción Electrónica y Estructural de Ftalocianina Libre y Algunos de sus Complejos Metálicos, José Zeferino Ramírez y **Daniel Glossman-Mitnik**, Quinto Congreso CIMAV, Chihuahua, México, 2008
153. Estructura Electrónica del ZnO Nanoestructurado y su Aplicación en Celdas Fotovoltaicas, Hazel Morales-Rodríguez, Francisco Espinosa-Magaña y **Daniel Glossman-Mitnik**, VII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Xalapa, Veracruz, México, 2008
154. Caracterización Molecular del β , β -Caroteno, Teresita Ruiz-Anchondo y **Daniel Glossman-Mitnik**, VII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Xalapa, Veracruz, México, 2008
155. Estudio Comparativo de Funcionales en la Descripción Electrónica y Estructural de Ftalocianina Libre y Algunos de sus Complejos Metálicos, José Zeferino Ramírez y **Daniel Glossman-Mitnik**, VII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Xalapa, Veracruz, México, 2008
156. Estudio de la Estructura y Propiedades Electrónicas en Derivados Pirrólicos y Fullerenos, Empleando la Teoría de Funcionales de la Densidad. Nora Sánchez-Bojorge, Norma Flores-Holguín, Luz María Rodríguez-Valdez y **Daniel Glossman-Mitnik**, VII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Xalapa, Veracruz, México, 2008

157. Estudio Teórico de los Sitios de Reacción en Derivados Pirrólicos, Nora Sánchez-Bojorge, Norma Flores-Holguín, Luz María Rodríguez-Valdez y **Daniel Glossman-Mitnik**, XXXIII Semana de la Química, Universidad Autónoma de Chihuahua, Chihuahua, México, 2008
158. Caracterización Molecular Computacional de Materiales para Nanomedicina: Proyecto NANO-TBC, **Daniel Glossman-Mitnik**, Primer Foro Estatal de Resultados en Ciencia y Tecnología - FOMIX Chihuahua 2009
159. Computational Determination of the Molecular Structure and Properties of Nanostructured Materials for Organic Photovoltaics, Teresita Ruiz-Anchondo, Hazel Morales-Rodríguez, Alberto Flores-Hidalgo and **Daniel Glossman-Mitnik**, Hybrid and Organic Photovoltaics Conference - HOPV 2009, Benidorm, España 2009
160. Nanotecnología en el CIMAV, Francisco Espinosa-Magaña, Jesús González-Hernández y **Daniel Glossman-Mitnik**, Red de Nanociencias y Nanotecnología - Puebla, México, 2009
161. Molecular Modeling of the Melting Temperature of a Tuberculosis DNA Nanobiosensor, Mónica Alvarado-González, Erasmo Orrantia-Borunda and **Daniel Glossman-Mitnik**, 14th European Congress of Biotechnology - Barcelona, España, 2009
162. Modelado Computacional de Materiales Moleculares y Nanoestructuras para Energías Alternativas y Renovables, **Daniel Glossman-Mitnik**, Semana de la Ingeniería 2009 - Universidad Politécnica del Valle de México - Tultitlán, México, 2009
163. Calculated I-V Curves for Oligoanilines and F-OPE (fluoro oligo phenyleneethynylene) Using Non-Equilibrium Green function Formalism (NEGF and DFT), L. Serrato, M. Gallo, M.T. Romero and **Daniel Glossman-Mitnik**, XV International Conference on Advanced Materials (ICM 2009), Cancún, México, 2009
164. Theoretical Study of the Electronic Structure in Organic Molecules and the Applications in Photovoltaic Devices, R.M. Gutiérrez-Pérez, N. Flores-Holguín, N. Sánchez-Bojorge, **Daniel Glossman-Mitnik** and L.M. Rodríguez-Valdez, XV International Conference on Advanced Materials (ICM 2009), Cancún, México, 2009
165. Thiadiazoles as organic photovoltaic materials: a theoretical properties study, N. Sánchez-Bojorge, L.M. Rodríguez-Valdez, **Daniel Glossman-Mitnik** and N. Flores-Holguín, XV International Conference on Advanced Materials (ICM 2009), Cancún, México, 2009
166. Computational Determination of the Molecular Structure and Properties of Nanostructured Materials for Organic Photovoltaics, Teresita Ruiz-Anchondo, Hazel Morales-Rodríguez, Alberto Flores-Hidalgo and **Daniel**

- Glossman-Mitnik**, International School of Hybrid and Organic Photovoltaics - ISOPHOS09, Valencia, España, 2009
167. Nano-Oportunidades en Química Computacional, **Daniel Glossman-Mitnik**, 5to Verano de la Investigación Científica, Chihuahua, México, 2009
 168. Computational Study of Electronic Properties in Pyrrolic Derivatives and Their Applications in Photovoltaic Devices, Rocío Margarita Gutiérrez-Pérez, Norma Flores-Holguín, **Daniel Glossman-Mitnik**, Marco Antonio Chávez-Rojo and Luz María Rodríguez-Valdez, 65th Southwest Regional Meeting of the American Chemical Society, El Paso, Texas, USA, 2009
 169. 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, Marco Gallo, L.E. Serrato-Villegas and **Daniel Glossman-Mitnik**, 2009 AIChE Annual Meeting, Nashville, Tennessee, USA, 2009
 170. Separación de Mezclas Equimolares de Hidrógeno y Metano en Materiales Metal-Orgánicos (MOFs) Utilizando Simulación Molecular, Marco Gallo, L.E. Serrato-Villegas and **Daniel Glossman-Mitnik**, IX Congreso Internacional de la Sociedad Mexicana del Hidrógeno, Saltillo, Coahuila, México, 2009
 171. Theoretical Study of of Photoelectronic Properties of Organic Donor-Acceptor Molecules, Erika I. López-Martínez, Luz María Rodríguez-Valdez, Norma Flores-Holguín, Alfredo Márquez-Lucero and **Daniel Glossman-Mitnik**, NANOMEX 09 - Encuentro Internacional e Interdisciplinario en Nanociencia y Nanotecnología, Ensenada, BC, México, 2009
 172. Descripción Electrónica y Estructural de TiOPc, SnPc y PbPc y sus Aductos con C60: Un Estudio DFT, José Zeferino Ramírez y **Daniel Glossman-Mitnik**, VII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Colima, México, 2009
 173. Nanotecnología en CIMAV y Modelado Molecular y Simulación Computacional de Nanomateriales para Fotovoltaica Molecular, **Daniel Glossman-Mitnik**, 1ra. Reunión México-Brasil de Nanotecnología, Chihuahua, México, 2009
 174. Modelación Molecular de Colorantes Funcionales para Celdas Solares Empleando Elementos Finitos, Jesús Adrián Baldenebro López, **Daniel Glossman-Mitnik**, Norma Rosario Flores-Holguín, José Humberto Castorena-González y Joel Andrés Calderón Guillén, 1er Congreso Nacional de Ciencia e Ingeniería de Materiales - 1-CNCIM-2010, Puebla, México, 2010
 175. A Computational Study of Low Band-Gap Polymers for Organic Photovoltaics: The Conceptual DFT Perspective, Norma Rosario Flores-Holguín,

- Luz María Rodríguez-Valdez, and **Daniel Glossman-Mitnik**, Hybrid and Organic Photovoltaics 2010 - HOPV2010, Assisi, Italia, 2010
176. A Theoretical Characterization of 1,3,4- and 1,2,5-Thiadiazole Polymers for Photovoltaic Uses, Nora Sánchez-Bojorge, Luz María Rodríguez-Valdez, **Daniel Glossman-Mitnik**, and Norma Rosario Flores-Holguín, Hybrid and Organic Photovoltaics 2010 - HOPV2010, Assisi, Italia, 2010
 177. A Theoretical Investigation of Pyrrolic Derivatives for Organic Photovoltaic Devices, Rocío Gutiérrez-Pérez, Norma Rosario Flores-Holguín, **Daniel Glossman-Mitnik**, and Luz María Rodríguez-Valdez, Hybrid and Organic Photovoltaics 2010 - HOPV2010, Assisi, Italia, 2010
 178. The Conceptual DFT Perspective in a Computational Study of Low Band-Gap Polymers for Molecular Photovoltaics, Norma Rosario Flores-Holguín, Luz María Rodríguez-Valdez and **Daniel Glossman-Mitnik**, NANOTECH 2010 - León, Guanajuato, México, 2010
 179. The Conceptual DFT Perspective in a Computational Study of Low Band-Gap Polymers for Molecular Photovoltaics, Norma Rosario Flores-Holguín, Luz María Rodríguez-Valdez, Erasmo Orrantia-Borunda and **Daniel Glossman-Mitnik**, IV International Conference on Molecular Materials - MOLMAT 2010 - Montpellier, France, 2010
 180. Nanomaterials Molecular Photovoltaics: A Conceptual and Computational DFT Study of Low Band-Gap Polymers, **Daniel Glossman-Mitnik**, Norma Rosario Flores-Holguín and Luz María Rodríguez-Valdez, Electronic Structure - Principles and Applications - ESPA 2010 - Oviedo, España, 2010
 181. Nanomaterials for Molecular Photovoltaics: A Conceptual and Computational Study of Low Band-Gap Polymers, **Daniel Glossman-Mitnik**, Norma Rosario Flores-Holguín and Luz María Rodríguez-Valdez, International Conference on Ordered 1-D Nanostructures for Photovoltaics - 1DNP 2010 - Mallorca, España, 2010
 182. Molecular Modeling of Nanomaterials for Energy Conversion and Storage, **Daniel Glossman-Mitnik**, International School of Organic Photovoltaics - ISOPHOS 2010 - Ventotene, Italia, 2010
 183. Nanomaterials for the Energy Challenge, **Daniel Glossman-Mitnik**, IX SBPMat 2010 - Ouro Preto, Minas Gerais, Brasil, 2010
 184. Nanomaterials for Molecular Photovoltaics: A Conceptual and Computational Study of Low Band-Gap Polymers, **Daniel Glossman-Mitnik**, Norma Rosario Flores-Holguín and Luz María Rodríguez-Valdez, IX SBPMat 2010 - Ouro Preto, Minas Gerais, Brasil, 2010

185. Density Functional Theory Study of Convergence in the HOMO-LUMO Gap of Fluorene-Thiadiazole Oligomers, Norma Rosario Flores-Holguín, Luz María Rodríguez-Valdez, and **Daniel Glossman-Mitnik**, IX SBP-Mat 2010 - Ouro Preto, Minas Gerais, Brasil, 2010
186. Electronic Structure Study using DFT in Organic Dendrimers with Possible Applications in Photovoltaic Devices, Luz María Rodríguez-Valdez, Rocío Margarita Gutiérrez-Pérez, Norma Rosario Flores-Holguín and **Daniel Glossman-Mitnik**, IX SBPMat 2010 - Ouro Preto, Minas Gerais, Brasil, 2010
187. Density Functional Theory Study of Spectroscopic Properties of Chlorophyll a and Analogues Molecules, Cecilia Aguilar-Elguézabal, Luz María Rodríguez-Valdez, **Daniel Glossman-Mitnik** and Norma Rosario Flores-Holguín, XIX International Materials Research Congress - Cancún, Quintana Roo, México, 2010
188. Nanomaterials for the Energy Challenge, **Daniel Glossman-Mitnik**, Solar Fuels / Photochemistry 2010 - Puerto Morelos, Quintana Roo, México, 2010
189. Química Computacional de Moléculas y Nanomateriales para Nano- y Fotoelectroquímica Solar, **Daniel Glossman-Mitnik**, IX Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica - Pachuca, Hidalgo, México, 2010
190. Cálculos ab initio del Transporte Electrónico en 4-(3-Nitro-4-Pentafluoro Feniletinil Feniletinil) Bencenotiolayo (FNPPB-O), L. Serrato-Villegas, M.T. Romero, Marcos Delgado-Ríos, **Daniel Glossman-Mitnik**, and Marco Gallo, IX Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica - Pachuca, Hidalgo, México, 2010
191. Estudio Químico-Teórico de Oligómeros de Fluorotiadiazoles y su Aplicación en Dispositivos Fotovoltaicos, Nora Aydee Sánchez-Bojorge, Norma Flores-Holguín, **Daniel Glossman-Mitnik** and Luz María Rodríguez-Valdez, IX Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica - Pachuca, Hidalgo, México, 2010
192. Estudio Computacional de Tinte Índigo y Derivados, para su Uso en Celdas Solares con Óxido de Zinc, Francisco Cervantes-Navarro y **Daniel Glossman-Mitnik**, IX Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica - Pachuca, Hidalgo, México, 2010
193. Caracterización Electrónica y Estructural de los Aduetos entre C60 y Ftalocianina, Porfirazina y sus Respectiveos Complejos con Mg, Cu y Zn, José Zeferino-Ramírez y **Daniel Glossman-Mitnik**, IX Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica - Pachuca, Hidalgo, México, 2010

194. Nanomaterials for Molecular and Organic Photovoltaics: The Conceptual DFT Perspective, Norma Rosario Flores-Holguín, Luz María Rodríguez-Valdez and **Daniel Glossman-Mitnik**, 3rd Hybrid and Organic Photovoltaics 2011 - HOPV 2011, Valencia, España, 2011
195. Conceptual DFT Study of Nanomaterials for Molecular and Organic Photovoltaics, Norma Rosario Flores-Holguín, Luz María Rodríguez-Valdez and **Daniel Glossman-Mitnik**, International Conference Nanoscale Materials and Devices for Energy Conversion, Storage and Biosensors 2011 - NanoEnergy11, Natal, Brasil, 2011
196. Conceptual DFT Study of Nanomaterials for Molecular and Organic Photovoltaics, Norma Rosario Flores-Holguín, Luz María Rodríguez-Valdez and **Daniel Glossman-Mitnik**, Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists - WATOC 2011, Santiago de Compostela, España, 2011
197. Modelado Molecular de Nanomateriales para Fotovoltaica Molecular, **Daniel Glossman-Mitnik**, 1er Taller de Innovación Fotovoltaica y Caracterización de Celdas Solares - LIFyCS 2011, Temixco, Morelos, México, 2011
198. Theoretical Study of Fluorene-Thiadiazole Oligomers for Photovoltaic Applications, Nora A. Sánchez-Bojorge, **Daniel Glossman-Mitnik**, Luz María Rodríguez-Valdez and Norma Rosario Flores-Holguín, Photovoltaic Technical Conference - PVTC 2011, Aix en Provence, Francia, 2011
199. Nanomaterials for Molecular and Organic Photovoltaics: The Conceptual DFT Perspective, Norma Rosario Flores-Holguín, Luz María Rodríguez-Valdez and **Daniel Glossman-Mitnik**, 14th International Density Functional Theory Conference Applications in Physics, Chemistry, Biology and Pharmacy - DFT 2011, Atenas, Grecia, 2011
200. Cálculo de la Densidad de Estados de Nanoalambres de ZnO, Hazel Jaynelle Morales Rodríguez, **Daniel Glossman-Mitnik** y Francisco Espinosa-Magaña, X Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica - Pachuca, Hidalgo, México, 2011
201. Simulación Computacional de la Estructura Molecular y Propiedades del Colorante Denominado Dye-7 para su Uso en Energía Fotovoltaica, Jesús Baldenebro-López, Norma Flores-Holguín, José Castorena González y **Daniel Glossman-Mitnik**, X Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica - Pachuca, Hidalgo, México, 2011
202. DFT Study of Triphenylamine-Based Dyes for their Use as Sensitizers in Molecular Photovoltaics, Jesús Baldenebro-López, José Castorena González, Norma Flores-Holguín, Jorge Almaral-Sánchez, and **Daniel Glossman-Mitnik**, 4th International Conference on Hybrid and Organic Photovoltaics - Uppsala, Sweden, 2012

203. Computational Molecular Nanoscience in Mexico: The NANOCOSMOS Virtual Lab, **Daniel Glossman-Mitnik**, 1st International Symposium on Nanoscience and Nanomaterials - Ensenada, BC, Mexico, 2012
204. Comparative Computational Characterization of Au₄ Cluster on a Singler-Wall Nanotube with and without Defects Using ONIOM Method, Diana Barraza-Jiménez, Donald H. Galván, Alberto Flores-Hidalgo, Álvaro Posadas-Amarillas, **Daniel Glossman-Mitnik** and Miguel José-Yacamán, 1st International Symposium on Nanoscience and Nanomaterials - Ensenada, BC, Mexico, 2012
205. Applications of Computational Molecular Nanoscience, **Daniel Glossman-Mitnik**, Vth International Conference on Molecular Materials - MOLMAT 2012 - Barcelona, España, 2012
206. Computational Simulations in the NANOCOSMOS Virtual Lab, **Daniel Glossman-Mitnik**, 8th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications - ESPA 2012 - Barcelona, España, 2012
207. Computational Molecular Nanoscience for Photodynamic Therapy Drug Design, Erasmo Orrantia-Borunda, Norma Flores-Holguín, and **Daniel Glossman-Mitnik**, 15th European Congress of Biotechnology - Istanbul, Turquía, 2012
208. Silver Reactivity with Biological Molecules, A Theoretical Study, Linda Landeros-Martínez, Erasmo Orrantia-Borunda, Luz M. Rodríguez-Valdez, Norma Flores-Holguín and **Daniel Glossman-Mitnik**, XXI International Materials Research Congress - Cancún, Q. Roo, México, 2012
209. Computational Molecular Nanoscience Study of Copper Complexes for Dye-Sensitized Solar Cells, Jesús Baldenebro-López, Norma Flores-Holguín, and **Daniel Glossman-Mitnik**, Conferencia Internacional Nanoenergía - Cartagena de Indias, Colombia, 2012

12. Publicaciones Científicas

12.1. Artículos Publicados

1. M.C. Donnamaría, **M.D. Glossman**, E.A. Castro and F.M. Fernández, Z Variable Calculations with the Statistical Thomas-Fermi, Thomas-Fermi-Amaldi, Thomas-Fermi-Dirac and Thomas-Fermi-Amaldi-Dirac models for Ions, *MATCH (Comm. in Math. Chem.)* 14 (1983) 247
2. **M.D. Glossman**, M.C. Donnamaría, E.A. Castro and F.M. Fernández, A Further Test on the Fermi-Amaldi Correction, *Boletín de la Sociedad Chilena de Química*, 28(4) (1983) 17

3. **M.D. Glossman**, E.A. Castro y F.M. Fernández, La Teoría de Perturbaciones Aplicada al Modelo de la Partícula en una Caja Unidimensional con Base Convexa, *Ingeniería y Ciencia Química*, 6 (1983)
4. M.C. Donnamaría, **M.D. Glossman**, E.A. Castro y F.M. Fernández. Matrices de Densidad.I. La Matriz de Densidad Reducida y el Problema de la N-Representabilidad, *Folia Chimica Theoretica Latina XII(4)*, (1984) 1
5. **M.D. Glossman**, M.C. Donnamaría, E.A. Castro y F.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*, L(2) (1984) 143
6. **M.D. Glossman**, E.A. Castro and F.M. Fernández, 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* 5(4) (1984) 145
7. **M.D. Glossman**, M.C. Donnamaría, E.A. Castro and F.M. Fernández, The Exchange and Self-Interaction Corrections for a New Variational Solution of the Thomas-Fermi Differential Equation, *Journal de Physique* 46 (1985) 69
8. M.C. Donnamaría, **M.D. Glossman**, E.A. Castro and F.M. Fernández, Matrices de Densidad.II. Aplicaciones de las Matrices de Densidad Reducidas, *Folia Chimica Theoretica Latina XIII(3)* (1985) 61
9. M.C. Donnamaría, **M.D. Glossman** and J.A. Alonso, Asymmetric Rare Gas Pairs Potentials with Energy Density Functionals, *Journal of Chemical Physics* 85(11) (1986) 6637
10. **M.D. Glossman** and E.A. Castro, Approximate Analytical Solution of the Thomas-Fermi-Amaldi Equation for Negative Ions in a Superstrong Magnetic Field, *MATCH (Comm. in Math. Chem.)* 19 (1986) 3
11. **M.D. Glossman**, M.C. Donnamaría and E.A. Castro, A Short Numerical Test for Ludeña's Functional, *Few-Body Systems* 3(2) (1987) 95
12. **M.D. Glossman** and E.A. Castro, Approximate Analytical Solution of the Thomas-Fermi Equation for Positive Ions in a Strong Magnetic Field, *Zeitschrift fur Physik D* 6 (1987) 81
13. **M.D. Glossman**, M.C. Donnamaría, E.A. Castro and F.M. Fernández, Application of the Modified Wu Function to the Calculation of Some Neutral Properties, *Acta Physica Slovaca* 37(5) (1987) 298
14. **M.D. Glossman**, M.C. Donnamaría and E.A. Castro, An Intermediate Solution Between Csavevsky's and Kesarwani-Varshni's Trial Density Functions, *MATCH (Comm. in Math. Chem.)* (1987) 223

15. **M.D. Glossman and E.A. Castro**, Quality of Simple Approximate Solutions for the Thomas-Fermi Model of Atoms and Ions in Strong Magnetic Fields, *Journal of Physics B* 21 (1988) 411
16. **M.D. Glossman** and E.A. Castro, The Exchange Correction in the Thomas-Fermi Model for Atoms in Strong Magnetic Fields, *South Afric. Journal of Physics* 11(1) (1988) 18
17. **M.D. Glossman** and E.A. Castro, Variational Principle for Obtaining Approximate Analytical Solutions of the Thomas-Fermi Equation for Atoms in a Strong Magnetic Field, *Bulgarian Journal of Physics* 15(5) (1988) 4
18. **M.D. Glossman** y E.A. Castro, Teoría de los Funcionales de la Densidad y Reactividad Química, *Folia Chimica Theoretica Latina* 16(2) (1988) 71
19. **M.D. Glossman** and E.A. Castro, Variational Test on the Relationship Between Gradient Expansion Terms in the Kinetic Energy Density Functional, *Physical Review A* 39(9) (1989) 4870
20. **M.D. Glossman** and E.A. Castro, Atomic Calculations Through a Modified Thomas-Fermi-Dirac-Weizsacker Theory, *Zeitschrift fur Physik D* 13 (1989) 13
21. **M.D. Glossman** y E.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, Vol 1, Ao 2*, (1989)
22. **M.D. Glossman** and E.A. Castro, Calculation of $\langle p \rangle$ and $\langle p^{-1} \rangle$ from Variational Atomic Densities, *Chemical Physics Letters* 167(4) (1990) 305
23. **M.D. Glossman** and E.A. Castro, Some Applications of Scheidemann-Dreizler's Solution of the TFDW Equation, *Chemical Physics Letters* 170(1) (1990) 61
24. **M.D. Glossman** and E.A. Castro, Atomic Properties Through Thomas-Fermi-Dirac-Weizsacker Theory, *Acta Physica Hungarica* 67(1-2) (1990) 183
25. **M.D. Glossman**, E.A. Castro and F.M. Fernández, Variational Treatment of the Particle in a One Dimensional Box with Convex Bottom, *Boletín de la Sociedad de Química del Perú* LVI(2) (1990) 87
26. **M.D. Glossman**, M.P. Iñiguez and J.A. Alonso, Distribution of Interatomic Distances in Large Metallic Clusters, *Zeitschrift fur Physik D* 22(2) (1992) 541
27. **M.D. Glossman**, Variational Study of a New Approximation for the Kinetic Energy Density Functional, *Chemical Physics Letters* 188(3-4) (1992) 310

28. **M.D. Glossman**, A. Rubio, L.C. Balbás and J.A. Alonso, Non-Local Exchange and Kinetic Energy Functionals for Electronic Systems, *Int. J. Quantum Chem., Quantum Chem. Symp.* 26 (1992) 347
29. **M.D. Glossman**, A. Rubio, L.C. Balbás and J.A. Alonso, Non-Local Approximation to the Exchange and Kinetic Energy Functionals. Application to Atoms, *New Journal of Chemistry* 16 (1992) 1115
30. **M.D. Glossman**, A. Rubio, L.C. Balbás, J.A. Alonso and Ll. Serra, Non-Local Approximation to the Exchange and Kinetic Energy Functionals. Application to Metallic Clusters, *Int. J. Quantum Chem.* 45 (1993) 333
31. J.A. Alonso, **M.D. Glossman** and M.P. Iñiguez, Atomic Structure of Metallic Clusters of Medium Size, *International Journal of Modern Physics B* 6 (1993) 3613
32. **M.D. Glossman**, A. Rubio, L.C. Balbás and J.A. Alonso, Non Local Exchange and Kinetic Energy Density Functionals for Electronic Systems. Application to Atoms and Ions, *Physical Review A* 47 1804 (1993) 1804
33. **M.D. Glossman**, M.P. Iñiguez and J.A. Alonso, Stabilities of Large Sodium Clusters for Different Atomic Arrangements, *Physical Review B* 47 (1993) 4747
34. **M.D. Glossman**, A. Rubio, L.C. Balbás and J.A. Alonso, Non Local Exchange and Kinetic Energy Density Functionals with Correct Asymptotic Behavior for Electronic Systems, *Int. J. Quantum Chem.* 49 (1994) 171
35. Q. Wang, **M.D. Glossman**, M.P. Iñiguez and J.A. Alonso, Atomic Structure of Metallic Clusters of Large Size, *Philosophical Magazine B* 69(5) (1994) 1045
36. **M.D. Glossman**, Application of Density Functional Theory Concepts to the Study of the Chemical Reactivity of Thiadiazoles, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 330 (1995) 385
37. **M.D. Glossman**, L.C. Balbás and J.A. Alonso, Incipient Manifestation of the Shell Structure of Atoms Within the WDA Model for the Exchange and Kinetic Energy Density Functionals, *Chemical Physics* 196(3) (1995) 455
38. E.E. Castellano, O.E. Piro, J.A. Caram, M.V. Mirífico, S.L. Aimone, E.J. Vasini and **M.D. Glossman**, Molecular and Electronic Structure of 1,2,5-Thiadiazole Derivatives, *Acta Crystallographica Section A, Vol A52, Supplement, C-267* (1996)
39. **M.D. Glossman**, Local and Nonlocal Density Functional Calculations of the Molecular Structure of Isomeric Thiadiazoles, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 390(1-3) (1997) 67

40. E.E. Castellano, O.E. Piro, J.A. Caram, M.V. Mirífico, S.L. Aimone, E.J. Vasini and **M.D. Glossman**, Crystallographic Study and Molecular Orbital Calculations of 1,2,5-Thiadiazole 1,1-Dioxide Derivatives, *Journal of Physical Organic Chemistry* 11 (1998) 91
41. S.L. Aimone, M.V. Mirífico, J.A. Caram, **D. Glossman Mitnik**, O.E. Piro, E.E. Castellano and E.J. Vasini, Unexpected Production of 2,4,6-Triphenyl-1,3,5-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* 41 (2000) 3531-3535
42. **D. Glossman-Mitnik** and A. Márquez-Lucero, Local and Nonlocal Density Functional Calculations of the Molecular Structure of Thiadiazole Monoxides, *International Journal of Quantum Chemistry* 81(1) (2001) 105-115
43. **D. Glossman-Mitnik** and A. Márquez-Lucero, Application of Density Functional Theory Concepts to the Study of the Chemical Reactivity of Isomeric Thiadiazolines, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 535(1-3) (2001)
44. *D. Glossman-Mitnik* and A. Márquez-Lucero, HF and DFT Calculations of the Molecular Structure of Isomeric Thiadiazole Dioxides, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 536(1) (2001) 41-51
45. **D. Glossman Mitnik** and A. 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* 538(1-3) (2001) 201-210
46. N. A. Ogorodnikova and **D. Glossman Mitnik**, Ab Initio Study of the Additivity Concept Applied for the Effects of One Substituent Within Cyclic Compounds, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 538(1-3) (2001) 267-285
47. E.E. Castellano, O.E. Piro, J.A. Caram, M.V. Mirífico, S.L. Aimone, E.J. Vasini, A. Márquez-Lucero and **D. Glossman-Mitnik**, 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* 562(1-3) (2001) 157-166
48. **D. Glossman-Mitnik** and A. Márquez-Lucero, Influence of the Basis Set and Correlation Method on the Calculation of Molecular Structures: Thiadiazoles Revisited, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 548(1-3) (2001) 153-163
49. **D. Glossman-Mitnik**, A Theoretical Study on the Aromaticity of Thiadiazoles and Related Compounds, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 549(3) (2001) 285-288

50. E.E. Castellano, O.E. Piro, J.A. Caram, M.V. Mirífico, S.L. Aimone, E.J. Vasini, A. Márquez-Lucero and **D. Glossman Mitnik**, 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-Etoxy-5-Methyl-3,4-Diphenyl 1,2,5-Thiadiazoline 1,1-Dioxide, *Journal of Molecular Structure* 597 (2001) 163-175
51. E.E. Castellano, O.E. Piro, J.A. Caram, M.V. Mirífico, S.L. Aimone, E.J. Vasini, A. Márquez-Lucero and **D. Glossman-Mitnik**, Crystallographic Study and Molecular Orbital Calculations of Thiadiazole Derivatives. 2. 3,4-Diphenyl-1,2,5-Thiadiazole 1-Monoxide, *Journal of Molecular Structure* 604 (2002) 195-203
52. N. Flores-Holguín and **D. Glossman-Mitnik**, An Introductory Study of the Molecular Structure and Properties of Oligothiadiazoles, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 634 (2003) 67-76
53. **D. Glossman-Mitnik**, Influence of the Basis Set and Correlation Method on the Calculation of the Dipole Moments of Isomeric Thiadiazoles, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 634 (2003) 77-81
54. L.M. Rodríguez-Valdez, A. Martínez-Villafañe and **D. Glossman-Mitnik**, CHIH-DFT Determination of the Molecular Structure, Infrared and Ultraviolet Spectra of Potentially Organic-Corrosion Inhibitors, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 681(1-3) (2004) 83-88
55. N. Flores-Holguín and **D. Glossman-Mitnik**, CHIH-DFT Determination of the Molecular Structure, Infrared and Ultraviolet Spectra of the Antiparasitic Drug Megazol, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 681(1-3) (2004) 77-82
56. A.M. Mendoza-Wilson and **D. Glossman-Mitnik**, CHIH-DFT Determination of the Molecular Structure, Infrared and Ultraviolet Spectra of the Flavonoid Quercetin, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 681(1-3) (2004) 71-76
57. L.M. Rodríguez-Valdez, A. Martínez-Villafañe and **D. Glossman-Mitnik**, Computational Simulation of the Molecular Structure and Properties of Heterocyclic Organic Compounds with Possible Corrosion Inhibition Properties, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 713 (2005) 65-70
58. L.M. Rodríguez-Valdez, A. Martínez-Villafañe and **D. Glossman-Mitnik**, CHIH-DFT Theoretical Study of Isomeric Thiatriazoles and their Potential Activity as Corrosion Inhibitors, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 716 (2005) 61-65
59. A.M. Mendoza-Wilson and **D. Glossman-Mitnik**, CHIH-DFT Study of the Electronic Properties and Chemical Reactivity of Quercetin, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 716 (2005) 67-72

60. N. Flores-Holguín and **D. Glossman-Mitnik**, CHIH-DFT Determination of the Electrical, Optical and Magnetic Properties and NICS Aromaticity of Megazol, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 717 (2005) 1-3
61. A. Carrillo, I.R. Martín-Domínguez, **D. Glossman-Mitnik** and A. Márquez-Lucero, 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* 119 (2005) 157-168
62. N. Flores-Holguín and **D. Glossman-Mitnik**, CHIH-DFT Determination of the Chemical Reactivity of the Antiparasitic Drug Megazol, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 723 (2005) 231-234
63. **D. Glossman-Mitnik**, G3-B3 Calculation of the Molecular Structure and Descriptors of isomeric Thiadiazoles, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 725 (2005) 27-30
64. H.A. Monreal-Romero, A. Martínez-Villafañe, J.G. Chacón-Nava, **D. Glossman-Mitnik**, P.E. García-Casillas and C.A. Martínez, Synthesis of TiO₂ Nanorods in the Presence of Linear DNA Plasmid pBR322 by a Sol-Gel Process, *Nanotechnology* 16 (2005) 1272-1277
65. Humberto Monreal, Alberto Martínez-Villafañe, José G. Chacón-Nava, **Daniel Glossman-Mitnik**, Carlos A. Martínez y Perla G. Casillas, Obtención de (Nanocilindros) de TiO₂ Dirigido por ADN Mediante Sol-Gel, *Revista del Centro de Investigación - Universidad La Salle* 6 (2005) 21-26
66. Ana María Mendoza-Wilson and **Daniel Glossman-Mitnik**, Theoretical Study of the Molecular Properties and Chemical Reactivity of (+)-Catechin and (-)-Epicatechin Related to their Antioxidant Ability, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 761 (2006) 97-106
67. Luz María Rodríguez-Valdez, Amelia Valdez-Aguirre, María E. Fuentes-Montero, A. Martínez-Villafañe y **Daniel Glossman-Mitnik**, Cálculos Teóricos de Reactividad en Derivados de Tiadiazol como Posibles Inhibidores de la Corrosión, *Journal of the Mexican Chemical Society* 2 (2006) 106
68. Luz María Rodríguez-Valdez, W. Villamisar, M. Casales, J.G. González-Rodríguez, Alberto Martínez-Villafañe, L. Martínez and **Daniel Glossman-Mitnik**, Computational Simulation of the Molecular Structure and Corrosion Properties of Amidoethyl, Aminoethyl and Hydroxyethyl Imidazolines Inhibitors, *Corrosion Science* 48 (2006) 4053-4064
69. **Daniel Glossman-Mitnik**, CBS-QB3 Calculation of the Molecular Structure and Descriptors of Isomeric Thiadiazoles, *Journal of Molecular Graphics and Modelling* 25 (2006) 455-458

70. **Daniel Glossman-Mitnik**, Computational Chemistry of the Structure and Reactivity of Organic Molecular Materials, *Journal of the Mexican Chemical Society* 2 (2006) 54
71. **Daniel Glossman-Mitnik**, CHIH-DFT Determination of the Molecular Structure and Infrared and Ultraviolet Spectra of Azathiophenes, *Theoretical Chemistry Accounts* 117 (2007) 57-68
72. **Daniel Glossman-Mitnik**, CHIH-DFT Determination of the Molecular Structure, IR and UV Spectra of Solanidine, *Journal of Molecular Modeling* 13 (2007) 43-46
73. **Daniel Glossman-Mitnik**, CHIH-DFT Computational Molecular Characterization of Acenaphtho[1,2-c]-1,2,5-Thiadiazole 1,1-Dioxide, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 811 (2007) 373-378
74. **Daniel Glossman-Mitnik**, CHIH-DFT Determination of the Dipole moment, Polarizability and Hyperpolarizability of γ -Solanine, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 808 (2007) 81-84
75. **Daniel Glossman-Mitnik**, CHIH-DFT Determination of the Molecular Structure and Infrared and Ultraviolet Spectra of γ -Solanine, *Spectrochimica Acta Part A* 66 (2007) 208-211
76. Alejandra Favila-Pérez, Marco Gallo-Estrada y **Daniel Glossman-Mitnik**, Nanotubos y Fullerenos Funcionalizados con Fármacos, *Boletín de la Sociedad Química de México* 1 (2007) 112
77. Ana María Mendoza-Wilson, Daniel Lardizábal-Gutiérrez, Enrique Torres-Moye, Luis Fuentes-Cobas, René R. Balandrán-Quintana, Alejandro Camacho-Dávila, Armando Quintero-Ramos, and **Daniel Glossman-Mitnik**, Optimized structure and thermochemical properties of flavonoids determined by the CHIH(medium)-DFT model chemistry versus experimental techniques, *Journal of Molecular Structure* 871 (2007) 114-130
78. Alejandra Favila, Marco Gallo and **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* 13 (2007) 505-518
79. **Daniel Glossman-Mitnik**, Caracterización Molecular Computacional de NANOMELFOS, *Boletín de la Sociedad Química de México* 1 (2007) 110
80. Marco Gallo, Alejandra Favila and **Daniel Glossman-Mitnik**, DFT Studies of Functionalized Carbon Nanotubes and Fullerenes as Nanovectors for Drug Delivery of Antitubercular Compounds, *Chemical Physics Letters* 447 (2007) 105-109

81. J. Hernández-Paredes, **Daniel Glossman-Mitnik**, O. Hernández-Negrete, H. Esparza-Ponce, M.E. Alvarez R, R. Rodríguez-Mijangos and A. Duarte-Moller, Thermal, Mechanical, and Electronic Properties of Glycine-Sodium Nitrate Crystal, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 69 (2008) 1974-1979
82. J. Hernández-Paredes, **D. Glossman-Mitnik**, H.E. Esparza-Ponce, M.E. Alvarez-Ramos and A. Duarte-Moller, Band Structure, Optical Properties and Infrared Spectrum of Glycine-Sodium Nitrate Crystal, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 875 (2008) 295-301
83. **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* 862 (2008) 60-65
84. Norma Flores-Holguín, Luz María Rodríguez-Valdez and **Daniel Glossman-Mitnik**, Computational Note on the Calculation of the Dipole Moment, Polarizability and Hyperpolarizability of Solanidine, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 849 (2008) 122-123
85. Mónica Alvarado-González, Erasmo Orrantia-Borunda and **Daniel Glossman-Mitnik**, Computational Note on the Calculation of the pKa of Fluorescein, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 869 (2008) 105
86. Ana María Mendoza-Wilson, Graciela Dolores Avila-Quezada, René Renato Balandrán-Quintana and **Daniel Glossman-Mitnik**, 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
87. **Daniel Glossman-Mitnik**, Diana Barraza-Jiménez, Alberto Flores-Hidalgo and Luz María Rodríguez-Valdez, Molecular Structure and Substitution Effects on Diphenylanthrazolines for Organic Semiconductors: A Theoretical Study, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 863 (2008) 99
88. Norma Flores-Holguín, A. Aguilar-Elguézabal, L.M. Rodríguez-Valdez and **Daniel Glossman-Mitnik**, Theoretical Study of Chemical Reactivity of the Main Species in the α -Pinene Isomerization Reaction, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 851 (2008) 81-88
89. Diana Barraza-Jiménez, Alberto Flores-Hidalgo and **Daniel Glossman-Mitnik**, Theoretical Analysis of Anthracene and Its Carbonyl and Carboxyl Derivatives Using DFT and TD-DFT, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 894 (2009) 64-70
90. Ana María Mendoza-Wilson, Graciela Dolores Avila-Quezada, René Renato Balandrán-Quintana, **Daniel Glossman-Mitnik** and Saúl Ruiz-Cruz, Characterization of the Semiquinones and Quinones of (-)-Epicatechin

by Means of Computational Chemistry, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 897 (2009) 6-11

91. Erika I. López-Martínez, Luz María Rodríguez-Valdez, Norma Flores-Holguín, Alfredo Márquez-Lucero and **Daniel Glossman-Mitnik**, Theoretical Study of Electronic Properties of Organic Photovoltaic Materials, *Journal of Computational Chemistry* 30 (2009) 1027-1037
92. Isis Rodríguez-Sánchez and **Daniel Glossman-Mitnik**, 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* 901 (2009) 258-259
93. Marco Gallo-Estrada and **Daniel Glossman-Mitnik**, Fuel Gas Storage and Separations by Metal-Organic Frameworks: Simulated Adsorption Isotherms for H₂, CH₄ and their Equimolar Mixture, *Journal of Physical Chemistry C* (2009) 6634-6642
94. Javier Hernández-Paredes, Alberto Duarte-Moller **Daniel Glossman-Mitnik** and Norma Flores-Holguín, Theoretical Calculations of Molecular Dipole Moment, Polarizability and First Hyperpolarizability of Glycine-Sodium Nitrate, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 905 (2009) 76-80
95. Isis Rodríguez-Sánchez, Armando Zaragoza-Contreras and **Daniel Glossman-Mitnik**, On the Theoretical Evaluation of the Order of Reactivity of Transfer Agents Utilized in RAFT Polymerization: Group Z, *Journal of Molecular Modeling* 15 (2009) 1133-1143
96. Mónica Alvarado-González, **Daniel Glossman-Mitnik** and Erasmo Orrantia-Borunda, Molecular Modeling of the Melting Temperature of a Tuberculosis DNA Nanobiosensor, *New Biotechnology* Volume 25 Supplement 1 (2009) Page S30
97. **Daniel Glossman-Mitnik**, Computational Molecular Characterization of Coumarin-102, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 911 (2009) 105-108
98. Mónica Alvarado-González, Paul S. Crozier, Norma Flores-Holguín, Erasmo Orrantia-Borunda and **Daniel Glossman-Mitnik**, Computational Prediction of the Melting Temperature of a DNA Biosensor to Detect Mycobacterium Tuberculosis, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 912 (2009) 60-62
99. Nora A. Sánchez-Bojorge, Norma Flores-Holguín, Luz María Rodríguez-Valdez and **Daniel Glossman-Mitnik**, Computational Note on the Chemical Reactivity of Pyrrole Derivatives, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 912 (2009) 119-120

100. Teresita Ruiz-Anchondo and **Daniel Glossman-Mitnik**, Computational Molecular Characterization of the β,β -Carotene Molecule, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 913 (2009) 215-220
101. **Daniel Glossman-Mitnik**, Acerca del Programa Académico Institucional de Nanotecnología en CIMAV, *Ingeniería Civil* 108 (2009) 11-12
102. **Daniel Glossman-Mitnik**, Computational Study of 3,4-Diphenyl-1,2,5-Thiadiazole 1-Oxide for Organic Photovoltaics, *International Journal of Photoenergy* Volume 2009, Article ID 806714, 8 pages doi:10.1155/2009/806714
103. **Daniel Glossman-Mitnik**, Isis Rodríguez-Sánchez, Armando Zaragoza-Contreras, On the Theoretical Evaluation of the Order of Reactivity of Transfer Agents Utilized in RAFT Polymerization. Part 2: Group R, *Journal of Molecular Modeling* 16(1) (2010) 95-105
104. Mónica Alvarado-González, Norma Flores-Holguín, Marco Gallo, Erasmo Orrantia-Borunda and **Daniel Glossman-Mitnik**, TD-DFT/IEFPCM Determination of the Absorption and Emission Spectra of DABCYL, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 945(1-3) (2010) 101-103
105. Teresita Ruiz-Anchondo, Norma Flores-Holguín and **Daniel Glossman-Mitnik**, Natural Carotenoids as Precursors of Nanomaterials for Molecular Photovoltaics: A Computational DFT Study, *Molecules* 15 (2010) 4490-4510
106. Sergio A. Payán-Gómez, Norma Flores-Holguín, Antonino Pérez-Hernández, Manuel Piñón-Miramontes and **Daniel Glossman-Mitnik**, Computational Molecular Characterization of the Flavonoid Rutin, *Chemistry Central Journal* 4 (12) (2010)
107. Manuel Alberto Flores-Hidalgo, Diana Barraza-Jiménez and **Daniel Glossman-Mitnik**, Excited States Analysis of Sulfur Substitutional Impurities on (ZnO)₆ Clusters Using DFT and TD-DFT, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 957 (2010) 100-107
108. Ana María Mendoza-Wilson, Rogerio L. Sotelo-Mundo, René R. Balandrán-Quintana, **Daniel Glossman-Mitnik**, Marco Antonio Santiz-Gómez and Karina D. García-Orozco, Exploration of the Kinetic and Thermochemical Abilities for the Free Radical Scavenging of Two Quercetin Conformers, *Journal of Molecular Structure* 981 (2010) 187-193
109. Norma Flores-Holguín, Luz María Rodríguez-Valdez and **Daniel Glossman-Mitnik**, Nanomaterials for Photoelectrochemical Solar Cells: Computational Molecular Characterization of 3,4-Diphenyl-4-(4-Hydroxyphenyl) 1,2,5-Thiadiazoline 1,1-Dioxide, *Journal of New Materials for Electrochemical Systems* 13(4) (2010) 361-367

110. Norma Flores-Holguín, Luz María Rodríguez-Valdez and **Daniel Glossman-Mitnik**, 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* 8(1) (2011) 74-79
111. Manuel Alberto Flores-Hidalgo, Diana Barraza-Jiménez and **Daniel Glossman-Mitnik**, Effects of Moderate Ammounts of Sulfur Substitutional Impurities on ZnO Structure Using Density Functional Theory Calculations, *The Open Nanoscience Journal* 5 (2011) 1-10
112. Manuel Alberto Flores-Hidalgo, Diana Barraza-Jiménez and **Daniel Glossman-Mitnik**, Effects of Sulfur Substitutional Impurities on (ZnO)₆ Clusters Using Density Functional Theory, *Computational and Theoretical Chemistry* 965 (2011) 154-162
113. Diana Barraza-Jiménez, Alberto Flores-Hidalgo, **Daniel Glossman-Mitnik**, Donald GalvGalván-Martínez and Martha Hermosillo-Cereceres, Computational Characterization of Sodium Selenite using Density Functional Theory, *Journal of Molecular Modeling* 17(4) (2011) 701-708
114. Sergio A. Payán-Gómez, Norma Flores-Holguín, Antonino Pérez-Hernández, Manuel Piñón-Miramontes and **Daniel Glossman-Mitnik**, Computational Molecular Characterization of the Flavonoid Morin and Its Pt(II), Pd(II) and Zn(II) Complexes, *Journal of Molecular Modeling* 17 (5) (2011) 972
115. Manuel Alberto Flores-Hidalgo, Diana Barraza-Jiménez and **Daniel Glossman-Mitnik**, Effects of Sulfur Substitutional Impurities on ZnO Structure Using Density Functional Theory, *International Journal of Nanoscience* 10 (3) (2011) 381-390
116. Rocío Margarita Gutiérrez-Pérez, Norma Flores-Holguín, **Daniel Glossman-Mitnik** and Luz María Rodríguez-Valdez, Electronic Structure Study Using Density Functional Theory in Organic Dendrimers, *Journal of Molecular Modeling* 12 (8) (2011) 1963-1972
117. **Daniel Glossman-Mitnik**, Computational Molecular Nanoscience: A Study of the Molecular Structure and Properties of a RAFT Polymerization Agent, *Research Journal of Chemical Sciences* 1 (9) (2011) 6-10
118. Lilia E. Serrato-Villegas, María T. Romero, Marcos Delgado-Ríos, **Daniel Glossman-Mitnik** and Marco Gallo, Ab-initio study of Electron Transport in 4(3-nitro-4-pentafluorophenylethynyl phenylethynyl)benzenethiol (FNPPB-o), *Journal of Molecular Modeling* 18 (2012) 611-621
119. Jesús Baldenebro-López, José Castorena-González, Norma Flores-Holguín, Joel Calderón-Guillén and **Daniel Glossman-Mitnik**, Computational Simulation of the Molecular Structure and Properties of Dye-7 for Organic Photovoltaics, *Journal of Molecular Modeling* 18 (3) (2012) 835-842

120. Jesús Baldenebro-López, José Castorena-González, Norma Flores-Holguín, Jorge Almaral-Sánchez and **Daniel Glossman-Mitnik**, DFT Study of Three Triphenylamine Dyes for their Use as Sensitizers in Molecular Photovoltaics, *international Journal of Molecular Sciences* 13 (2012) 4438-4442
121. Ana María Mendoza-Wilson, Graciela Dolores Avila-Quezada, René Renato Balandrán-Quintana and **Daniel Glossman-Mitnik**, 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* 989 (2012) 100
122. Francisco Cervantes-Navarro and **Daniel Glossman-Mitnik**, The Indigo Molecule Revisited Again: Assessment of the Minnesota Family of Density Functionals for the Prediction of Its Maximum Absorption Wavelengths in Various Solvents , *Journal of Chemistry*, vol. 2013, Article ID 153126, 4 pages, 2013. doi:10.1155/2013/153126
123. Francisco Cervantes-Navarro and **Daniel Glossman-Mitnik**, DFT Study of the Effect of Substituents on the Absorption and Emission Spectra of Indigo, *Chemistry Central Journal* 6 (70) (2012) 1-11

12.2. Artículos en Prensa y Sometidos

1. Mónica Alvarado-González, Marco Gallo, Pablo López-Albarrán, Norma Flores-Holguín and **Daniel Glossman-Mitnik**, DFT Study of the Interaction Between the Conjugated Fluorescein and DABCYL System, Using Fluorescence Quenching Method, *Journal of Molecular Modeling*, aceptado
2. Diana Barraza-Jiménez, D.H. Galván, Álvaro Posadas-Amarillas, Manuel Alberto Flores-Hidalgo, **Daniel Glossman-Mitnik** and Miguel José-Yacamán, Comparative Computational Characterization of Au₄ on a Carbon Nanotube with and without Defects using ONIOM Method, *Journal of Molecular Modeling*, aceptado
3. Norma Flores-Holguín, Alfredo Aguilar-Elguézabal, Luz María Rodríguez-Valdez and **Daniel Glossman-Mitnik**, A Theoretical Study of the Carbocation Formation Energy Involved in the Isomerization of α -Pinene, *Chemical Physics Letters*, aceptado
4. Norma Flores-Holguín, Alfredo Aguilar-Elguézabal, Alberto Rosas-Aburto and **Daniel Glossman-Mitnik**, Theoretical Study of the Properties of Conducting Polymers, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, sometido

5. Manuel Alberto Flores-Hidalgo, Diana Barraza-Jiménez, Donald Homero Galván-Martínez and **Daniel Glossman-Mitnik**, Computational Study of a (ZnO)₁₂ Cluster Using Hybrid and Hybrid Meta Density Functionals, *Journal of Simulation and Materials Science Engineering*, sometido
6. Marco Plinio Ramos-Alegría, Teresita Ruiz-Anchondo, Jaime Martínez-Tellez and **Daniel Glossman-Mitnik**, Clasificación Polifenólica y Capacidad Antioxidante en Uvas y Vinos Tintos, *TecnoCiencia*, sometido
7. J.C. Espinoza-Hicks, A. Camacho-Dávila, N. Flores-Holguín, G.V. Nevarez-Moorillón, **Daniel Glossman-Mitnik** and L.M. Rodríguez-Valdez, Synthesis of a Novel Chalcone Derivative: Comparison of Theoretical and Experimental NMR Chemical Shifts, *International Journal of Quantum Chemistry*, sometido
8. H.J. Morales-Rodríguez, N. Flores-Holguín, **Daniel Glossman-Mitnik** and F. Espinosa-Magaña, First Principles Calculations of the Electronic Structures of ZnO Nanoclusters, *International Journal of Quantum Chemistry*, sometido
9. Francisco Cervantes-Navarro and **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*, sometido
10. Nora H. Sánchez-Bojorge, Norma Flores-Holguín, Luz M. Rodríguez-Valdez and **Daniel Glossman-Mitnik**, DFT Calculation of the HOMO-LUMO Distribution, Band Gap and Absorption Spectra for Fluorene-1,3,4-Thiadiazole Oligomers, *Journal of Computational Chemistry*, sometido
11. Mónica Alvarado-González, Norma Flores-Holguín, and **Daniel Glossman-Mitnik**, Computational Molecular Nanoscience Study of the Structure and Properties of the Chlorophyll a Molecule, *International Journal of Molecular Sciences*, sometido
12. Guillermo Salgado-Morán, Ricardo Vivas-Reyes, Laura Amador-Falcón, Daniela Rodríguez-Clavijo, Rosa Baldiris-Ávila, Verónica Valdiris-Ávila and **Daniel Glossman-Mitnik**, Virtual Screening of Matrix Metalloproteinase Inhibitors Using Molecular Docking and 3D-QSAR Analysis, *Future Medicinal Chemistry*, sometido
13. Francisco Cervantes-Navarro and **Daniel Glossman-Mitnik**, Density Functional Study of the Effects of Substituents on the Chemical Reactivity of the Indigo Molecule, *Journal of Molecular Modeling*, sometido
14. Jesús Baldenebro-López, Norma Flores-Holguín, José Castorena-González, Jorge Almaral-Sánchez and **Daniel Glossman-Mitnik**, Computational Molecular Nanoscience Study of the Properties of Copper Complexes for Dye-Sensitized Solar Cells, *The Journal of Physical Chemistry C*, sometido

15. Guillermo Salgado-Morán, Samuel Ruiz-Nieto and **Daniel Glossman-Mitnik**, Computational Molecular Nanoscience Study of the Structure and Properties of Ethambutol, *Molecules*, sometido

13. Capítulos de Libros

1. *Improved Variational Calculations with Atomic Energy Functionals Using an Additional Restriction on the Density*, **M. Daniel Glossman** and Eduardo A. Castro, en *Density Functional Approaches to Chemistry*, J. Labanowski and J. Andzelm, Eds., Springer-Verlag, New York, 1991
2. *Atomic Structure of Metallic Clusters of Medium Size*, Julio A. Alonso, **Daniel Glossman** and M. Pilar Iñiguez, en *Cluster and Fullerenes*, T.P. Martin and E. Tossati, Eds., World Scientific, Singapore, 1993
3. *Charge Sensitivity Analysis of Substituted Thiadiazoles*, **Daniel Glossman**, en *Actualidades de Fisicoquímica Orgánica*, E. Humeres, Ed., Universidade de Santa Catarina Press, Florianópolis, Brasil, 1996
4. *Molecular Design of Organic Nonlinear Optics: Dipole Moment, Polarizability and Hyperpolarizability of Thiadiazole Oligomers Investigated by Density Functional Theory Methods*, Alfredo Márquez-Lucero, Norma Flores-Holguín and **Daniel Glossman-Mitnik**, en *Linear and Nonlinear Optics of Organic Materials II*, M. Eich and M.G. Kuzyk, Eds., SPIE Press, 2002

14. Otras Actividades Científicas

14.1. Revisor habitual de las Sigüientes Revistas Nacionales e Internacionales:

1. Journal of the American Chemical Society
2. International Journal of Quantum Chemistry
3. Journal of Molecular Structure
4. Journal of Molecular Structure: THEOCHEM
5. Journal of Molecular Modeling
6. Journal of Molecular Graphics and Modeling
7. Polymer
8. Journal of Physical Organic Chemistry

14.2. Revisor de Proyectos de Investigación de las Sigui- entes Instituciones:

1. Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) – México
2. Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) – República Argentina
3. Universidad de Buenos Aires (UBA) – República Argentina

14.3. Miembro de las Sigui- entes Sociedades Científicas y Redes de Investigación:

1. Sociedad Química de México
2. American Chemical Society
3. Red de Nanociencias y Nanotecnología
4. Red de Fuentes de Energía
5. American Nano Society
6. Sociedad de Energía Fotovoltaica Inorgánica y Nanomolecular
7. Red de Nanotecnologías para Energía de la Región Iberoamericana

14.4. Divulgación y Difusión Científica y Tecnológica

1. Conferencia Presentada en la 8va Semana de la Ciencia y la Tecnología, Organizada por el Colegio de Bachilleres de Chihuahua Plantel 1 – *Simulación Computacional de Materiales Moleculares* – Chihuahua, México – Octubre de 2001
2. Conferencia Presentada en la 8va Semana de la Ciencia y la Tecnología, Organizada por el Colegio de Bachilleres de Chihuahua Plantel 8 – *Simulación Computacional de Materiales Moleculares* – Chihuahua, México – Octubre de 2001
3. Conferencia Presentada en la 8va Semana de la Ciencia y la Tecnología, Organizada por el Instituto Tecnológico de Chihuahua II – *Simulación Computacional de Materiales Moleculares* – Chihuahua, México – Octubre de 2001
4. Artículo Periodístico Aparecido en el Periódico *El Herald de Chihuahua* con el Nombre de *Dise ando la Materia por Computadora* – Julio de 2003
5. Conferencia Presentada en la XI Semana de la Ciencia y Tecnología, con el Título de: *it Nanotecnología* – Monterrey, NL – Octubre de 2004

6. Conferencia Presentada en la V Semana de la Calidad de IMSA, Organizada por IMSA MEX, SA de CV, con el Título de *Simulación Computacional en Nanotecnología* – Agosto de 2005
7. Artículo Periodístico Aparecido en el Periódico *El Heraldó de Chihuahua* con el Nombre de *Nanomateriales* – Agosto de 2006
8. Participación en el Simposio Organizado por la Sociedad Química de México durante el XLI Congreso Mexicano de Química, con la Presentación de la Conferencia *Structure and Reactivity in Theoretical and Computational Organic Chemistry* – México, DF - México – Septiembre de 2006
9. Conferencia Presentada en el VI Congreso Internacional en Ciencia e Ingeniería de Materiales, Organizado por el Instituto Tecnológico de Querétaro – *Nano-Oportunidades en Química Computacional* – Querétaro, México – Noviembre de 2006
10. Conferencia Presentada Durante la NANOFORUMEULA Fact Finding Mission, Organizado por CONACYT y la Unión Europea – *Nano-Opportunities in Computational Chemistry* – Saltillo, Coahuila, México – Agosto de 2007
11. Conferencia Presentada en la Reunión Nacional de Subdirectores Académicos, Organizada por la Dirección General de Educación Superior Tecnológica (DGEST) y el Instituto Tecnológico de Matamoros – *Maestría en Nanotecnología y Maestría en Comercialización de la Ciencia y la Tecnología* – Tamaulipas, Matamoros, México – Marzo de 2008
12. Conferencia Presentada en el Instituto Tecnológico de Monterrey – *Nanotecnología en el CIMAV* – Chihuahua, México, Septiembre de 2008

14.5. Desarrollos Tecnológicos para la Industria Privada

1. Nombre del Desarrollo: *Búsqueda del Estado del Arte sobre la Nanotecnología y sus Posibles Implicaciones en transformadores Eléctricos*
 Empresa: Grupo PROLEC
 Costo: \$ 143,492.-
2. Nombre del Desarrollo: *Simulación Computacional de las Constantes de Velocidad y las Relaciones de Reactividad de Diferentes Monómeros de Uso Frecuente en la Industria de Pinturas*
 Empresa: COMEX, SA de CV
 Costo: \$ 240,000.-
3. Nombre del Desarrollo: *Simulación Computacional de la Solubilidad del Complejo $Co[(Etilendiamo)(2-Etilhexanoato)_2]$ en una Mezcla de Disolventes*
 Empresa: COMEX, SA de CV
 Costo: \$ 285,000.-

4. Nombre del desarrollo: *Simulación Computacional de Nuevos Cromóforos Luminescentes Derivados de la Maleiperinona*
Empresa: COMEX, SA de CV
Costo: \$ 240,000.-

14.6. Reportes Técnicos

1. Reporte Técnico Final del Proyecto *Desarrollo de Modelos Moleculares que Describan el Comportamiento de Compuestos Poliméricos para su Uso en la Fabricación de Sensores para Fugas de Hidrocarburos*, Presentado ante CONACYT como parte de la Cátedra Patrimonial de Excelencia Nivel II
2. Reporte Técnico Final del Proyecto *Simulación Computacional de Materiales Moleculares con Propiedades Ópticas No Lineales para su Uso en la Fabricación de Detectores de Fugas de Hidrocarburos*, Presentado ante CONACYT como parte de la Cátedra Patrimonial de Excelencia Nivel II
3. Reporte Técnico Final del Proyecto *Simulación Computacional de Materiales Moleculares con Propiedades Ópticas No Lineales para su Utilización en el Desarrollo de Sensores Químicos*, Presentado ante CONACYT
4. Reporte Técnico Final del Proyecto *Simulación Computacional de la Estructura y Propiedades Moleculares de Solanina y Solanidina*, Presentado ante CONACYT y Fondo Sectorial SAGARPA
5. Reporte Técnico Final del Proyecto *Simulación Computacional de la Estructura y Propiedades de Materiales Moleculares Potencialmente Útiles para la Fabricación de Dispositivos Fotovoltaicos y Celdas Solares*, Presentado ante CONACYT y Fondo Mixto de la Ciudad de Puebla, México
6. Reporte Técnico Final del Proyecto *Búsqueda del Estado del Arte sobre la Nanotecnología y sus Posibles Implicaciones en Transformadores Eléctricos*, Presentado ante Grupo PROLEC, México
7. Reporte Técnico Final del Proyecto *Simulación Computacional de Nuevos Cromóforos Luminescentes Derivados de la Maleiperinona*, Presentado ante CONACYT y Grupo COMEX, México
8. Reporte Técnico Final del Proyecto *Simulación Computacional de la Solubilidad del Complejo $\text{Co}[(\text{Etilendiamino})(2\text{-Etilhexanoato})_2]$ en una Mezcla de Disolventes*, Presentado ante CONACYT y Grupo COMEX, México
9. Reporte Técnico Final del Proyecto *Simulación Computacional de las Constantes de Velocidad y las Relaciones de Reactividad de Diferentes Monómeros de Uso Frecuente en la Industria de Pinturas*, Presentado ante CONACYT y Grupo COMEX, México
10. Primer Reporte Técnico del Proyecto *Caracterización Molecular Computacional de Materiales para Nanomedicina: Proyecto NANO-TBC*, Presentado ante CONACYT y Fondo Mixto del Estado de Chihuahua

11. Segundo Reporte Técnico del Proyecto *Caracterización Molecular Computacional de Materiales para Nanomedicina: Proyecto NANO-TBC*, Presentado ante CONACYT y Fondo Mixto del Estado de Chihuahua
12. Tercer Reporte Técnico del Proyecto *Caracterización Molecular Computacional de Materiales para Nanomedicina: Proyecto NANO-TBC*, Presentado ante CONACYT y Fondo Mixto del Estado de Chihuahua
13. Primer Reporte Técnico del Proyecto *Molecular Dynamics Studies of Self-Assembled Monolayers of Organic Compounds on Metallic Surfaces*, Presentado ante CONACYT and National Science Foundation (NSF), USA
14. Reporte Técnico Final del Proyecto *Caracterización Molecular Computacional de Materiales para Nanomedicina: Proyecto NANO-TBC*, Presentado ante CONACYT y Fondo Mixto del Estado de Chihuahua
15. Reporte Técnico Final del Proyecto *Laboratorio Nacional de Nanotecnología en el CIMAV*, Presentado ante el CONACYT
16. Reporte Técnico Final del Proyecto Fondo Mixto del Estado de Baja California - FOMIX BC-2008-68363 – *Caracterización Molecular Computacional de NANOMELFOS - Nanomateriales Moleculares Electroluminiscentes y Fotovoltaicos Orgánicos*, Presentado ante el CONACYT y Fondo Mixto del Estado de Baja California

14.7. Asistencia a Congresos y Cursos Científicos

1. Reunión Nacional de Física 82, La Plata, República Argentina, 1982
2. Tercer Congreso Argentino de Fisicoquímica, La Plata, República Argentina, 1983
3. Seminario Sobre la Utilidad de la Química Teórica en el Planteo y Resolución de los Problemas Químicos e Interpretación y Correlación de sus Resultados, Asociación Química Argentina, Buenos Aires, República Argentina, 1983
4. Historia y Filosofía de las Ciencias, Universidad Nacional de La Plata, La Plata, República Argentina, 1983
5. Métodos de la Química Cuántica Basados en el Formalismo de la Segunda Cuantización, Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), La Plata, República Argentina, 1983
6. Introducción a la Programación FORTRAN y Manejo de Computadora HP 1000, Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), La Plata, República Argentina, 1983
7. Preparación y Presentación de Manuscritos Científicos, Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), La Plata, República Argentina, 1983

8. Escuela de Verano 1984 - Curso de Química Teórica: Teoría de Reacciones Orgánicas, Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), La Plata, República Argentina, 1984
9. Piaget para Químicos y por Químicos, Asociación Química Argentina, Buenos Aires, República Argentina, 1984
10. IV Congreso Argentino de Fisicoquímica, Río Cuarto, República Argentina, 1985
11. 3er Simposio Brasileiro de Química Teórica, São Carlos, Brasil, 1985
12. Escuela de Verano 1985 - Curso de Química Teórica: Métodos de Cálculo de Estructuras Electrónicas Moleculares, Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), La Plata, República Argentina, 1985
13. Escuela de Verano 1986 - Curso de Química Teórica: Cálculo Numérico y Programación, Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), La Plata, República Argentina, 1986
14. Colloque Franco Latinoamericaine de Physique, Buenos Aires, República Argentina, 1986
15. V Congreso Argentino de Fisicoquímica, Mar del Plata, República Argentina, 1987
16. Introduction to Personal Computers, University of North Carolina at Chapel Hill, Chapel Hill, NC, USA, 1988
17. Introduction to DOS, University of North Carolina at Chapel Hill, Chapel Hill, NC, USA, 1988
18. Short Course on Word Perfect, University of North Carolina at Chapel Hill, Chapel Hill, NC, USA, 1989
19. XVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, La Plata, República Argentina, 1989
20. XIX Congresso Internazionale dei Chimichi Teorici dei Paesi di Espressione Latina, Roma, Italia, 1990
21. Workshop on Computational Methods in XAFS Analysis, Brookhaven National Laboratory, New York, USA, 1990
22. XIII International Symposium on Molecular Beams, El Escorial, Madrid, España, 1991
23. NATO-Advanced Study Institute - Metal-Ligand Interactions: From Atoms, to Clusters, to Surfaces, Cetraro, Calabria, Italia, 1991

24. II Reunión Nacional sobre Física de Micropartículas, Universidad de Valladolid, Valladolid, España, 1991
25. 4th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics, Monte Verità, Ascona, Suiza, 1991
26. V Cursos de Introducción a la Informática: Lenguaje C, Universidad de Valladolid - Facultad de Ciencias, Valladolid, España, 1991
27. V Cursos de Introducción a la Informática: Sistema operativo UNIX, Universidad de Valladolid - Facultad de Ciencias, Valladolid, España, 1991
28. 1992 SANIBEL Symposia on Atomic, Molecular and Condensed Matter Theory, Computational Methods, and the Application of Fundamental Theory to Problems of Biology and Pharmacology, St. Augustine, Florida, USA, 1992
29. 15th Annual Interdisciplinary Cancer Research Workshop, New Orleans, Louisiana, USA, 1992
30. International School of Theoretical Chemistry in Pinar del Río, Pinar del Río, Cuba, 1992
31. Norman March 65th Birthday - Applications of Density Functional Theory, Oxford, United Kingdom, 1992
32. VIII Congreso Argentino de Fisicoquímica, Mar del Plata, República Argentina, 1993
33. 5th International Conference on the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics, Como, Italia, 1993
34. XXIe Congres International des Chimistes Theoreticiens D'Expression Latine, Grenoble, Francia, 1993
35. Taller de Primavera de Química Cuántica, Puerto Solís, Uruguay, 1993
36. STN Workshops - Introducción a la Búsqueda en Línea para Químicos, Asociación Química Argentina, 1994
37. STN Workshops - Introducción a Patentes en STN, Asociación Química Argentina, 1994
38. STN Workshops - Información Sobre Regulación y Cumplimiento en STN, Asociación Química Argentina, 1994
39. STN Workshops - Comandos Avanzados de STN, Asociación Química Argentina, 1994
40. STN Workshops - STN para Usuarios de Otras Herramientas, Asociación Química Argentina, 1994

41. IX Congreso Argentino de Fisicoquímica, San Luis, República Argentina, 1994
42. XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Pucón, Chile, 1995
43. X Congreso Argentino de Fisicoquímica, San Miguel de Tucumán, República Argentina, 1997
44. Workshop: Introduction to Gaussian - Theory and Practice, Silicon Graphics Computer Systems, Buenos Aires, República Argentina, 1999
45. Jornadas de la Ciencia y la Tecnología, Universidad Nacional de Luján, Luján, República Argentina, 1999
46. Taller: Configuración de un Cluster Intel, Universidad Nacional Autónoma de México, México DF, México, 2001
47. Taller: Aplicaciones Prácticas en Clusters, Universidad Nacional Autónoma de México, México DF, México, 2001
48. 27eme Congres de Chimistes Theoriciens d'Expression Latine, Toulouse, Francia, 2001
49. 9th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics, San Lorenzo de El Escorial, Madrid, España, 2001
50. Electronic Structure and Chemical Reactivity International Symposium, Bellaterra, Barcelona, España, 2001
51. 4th European Computational Chemistry Conference (EUCC4), Assisi, Italia, 2002
52. Electronic Structure: Properties and Applications (ESPA 2002), Sevilla, España, 2002
53. Primera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Cuernavaca, México, 2002
54. XVIII Reunión de la Sociedad Mexicana de Electroquímica, Chihuahua, México, 2003
55. Segunda Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Guanajuato, México, 2003
56. XXX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 2004), Porto, Portugal, 2004
57. Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2004), Valladolid, España, 2004

58. XVII Congreso de la Sociedad Polimérica de México, Chihuahua, México, 2004
59. Tercera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Puebla, México, 2004
60. Cuarta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Chihuahua, México, 2005
61. TEX-MEMS VII, International Conference on Micro Electro Mechanical Systems, El Paso, Texas, USA, 2005
62. XLI Congreso Mexicano de Química, México DF, México, 2006
63. V Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, San Luis Potosí, México, 2006
64. VI Congreso Internacional en Ciencia e Ingeniería de Materiales, Querétaro, México, 2006
65. ESPA 2006: Electronic Structure: Principles and Applications, Santiago de Compostela, España, 2006
66. 5to Taller Iberoamericano sobre Educación en Ciencia e Ingeniería de Materiales, Huerta Grande, Córdoba, Argentina, 2006
67. The Molecular Foundry User Workshop, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, California, USA, 2006
68. European Fact Finding Mission in Nanotechnology (NanoForum), Saltillo, Coahuila, México, 2007
69. 42 Congreso de la Sociedad Química de México, Guadalajara, Jalisco, México, 2007
70. VI Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, San Miguel Regla, Hidalgo, México, 2007
71. Taller en Ciencia de Materiales México - Estados Unidos, Chihuahua, México, 2008
72. Quinto Congreso CIMAV, Chihuahua, México, 2008
73. VII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Xalapa, Veracruz, México, 2008
74. 6th. Congress ESPA 2008 - Electronic Structure: Principles and Applications, Palma de Mallorca, España, 2008
75. Primer Encuentro de Investigadores CIMAV, Chihuahua, México, 2008
76. Simposio de Teoría de Funcionales de la Densidad, Dedicado a los 60 Años del Profesor José Luis Gázquez-Mateos, Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa, México DF, México, 2008

77. Nanomaterials for Sustainable Energy: Energy Conversion, Oak Ridge, Tennessee, USA, 2008
78. US-Mexico Workshop on Materials Science and Nanotechnology, Chihuahua, México, 2008
79. Reunión Nacional de Subdirectores Académicos, Matamoros, Tamaulipas, México, 2008
80. 6th ESPA 2008 - Electronic Structure: Principles and Applications, Palma de Mallorca, España, 2008
81. 3rd Mexican Workshop on Nanostructured Materials, México DF, México, 2008
82. North American Nanocluster Initiative Meeting, Chihuahua, México, 2008
83. Quinto Congreso CIMAV, Chihuahua, México, 2008
84. VII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Xalapa, Veracruz, México, 2008
85. XXXIII Semana de la Química, Universidad Autónoma de Chihuahua, Chihuahua, México, 2008
86. Primer Foro Estatal de Resultados en Ciencia y Tecnología - FOMIX Chihuahua 2009
87. Hybrid and Organic Photovoltaics Conference - HOPV 2009, Benidorm, España 2009
88. Red de Nanociencias y Nanotecnología - Puebla, México, 2009
89. 14th European Congress of Biotechnology - Barcelona, España, 2009
90. Semana de la Ingeniería 2009 - Universidad Politécnica del Valle de México - Tultitlán, México, 2009
91. XV International Conference on Advanced Materials (ICM 2009), Cancún, México, 2009
92. International School of Hybrid and Organic Photovoltaics - ISOPHOS09, Valencia, España, 2009
93. 5to Verano de la Investigación Científica, Chihuahua, México, 2009
94. 65th Southwest Regional Meeting of the American Chemical Society, El Paso, Texas, USA, 2009
95. 2009 AIChE Annual Meeting, Nashville, Tennessee, USA, 2009
96. IX Congreso Internacional de la Sociedad Mexicana del Hidrógeno, Saltillo, Coahuila, México, 2009

97. NANOMEX 09 - Encuentro Internacional e Interdisciplinario en Nanociencia y Nanotecnología, Ensenada, BC, México, 2009
98. VII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Colima, México, 2009
99. 1ra. Reunión México-Brasil de Nanotecnología, Chihuahua, México, 2009
100. 1er Congreso Nacional de Ciencia e Ingeniería de Materiales - 1-CNCIM-2010, Puebla, México, 2010
101. Hybrid and Organic Photovoltaics 2010 - HOPV2010, Assisi, Italia, 2010
102. NANOTECH 2010 - León, Guanajuato, México, 2010
103. IV International Conference on Molecular Materials - MOLMAT 2010 - Montpellier, France, 2010
104. Electronic Structure - Principles and Applications - ESPA 2010 - Oviedo, España, 2010
105. International Conference on Ordered 1-D Nanostructures for Photovoltaics - 1DNP 2010 - Mallorca, España, 2010
106. International School of Organic Photovoltaics - ISOPHOS 2010 - Ventotene, Italia, 2010
107. IX SBPMat 2010 - Ouro Preto, Minas Gerais, Brasil, 2010
108. XIX International Materials Research Congress - Cancún, Quintana Roo, México, 2010
109. Solar Fuels / Photochemistry 2010 - Puerto Morelos, Quintana Roo, México, 2010
110. IX Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica - Pachuca, Hidalgo, México, 2010
111. 3rd Hybrid and Organic Photovoltaics 2011 - HOPV 2011, Valencia, España, 2011
112. International Conference Nanoscale Materials and Devices for Energy Conversion, Storage and Biosensors 2011 - NanoEnergy11, Natal, Brasil, 2011
113. Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists - WATOC 2011, Santiago de Compostela, España, 2011
114. 1er Taller de Innovación Fotovoltaica y Caracterización de Celdas Solares - LIFyCS 2011, Temixco, Morelos, México, 2011
115. Photovoltaic Technical Conference - PVTC 2011, Aix en Provence, Francia, 2011

14.8. Producción en Docencia

- Autor y Coautor de las Guías de Trabajos Prácticos de las Asignaturas: Química-Física I, Química-Física II y Química-Física III, de la Carrera de Licenciatura en Ciencias Químicas de la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad de Buenos Aires - Años 1983 a 1988
- Autor y Coautor de las Guías de Trabajos Prácticos y de Laboratorio de la Asignatura: Fisicoquímica de la Carrera de Ingeniería en Alimentos, del Departamento de Ciencia y Tecnología de la Universidad Nacional de Quilmes - Año 1993
- Autor y Coautor de las Guías de Trabajos Prácticos de las Asignaturas: Introducción a la Química, Química General y Química General (Ingeniería Industrial) de las Carreras de Ingeniería en Alimentos, Ingeniería Industrial y Licenciatura en Ciencias Biológicas del Departamento de Ciencias Básicas de la Universidad Nacional de Luján - Años 1994 a 1997
- Autor y Coautor de los Apuntes Teóricos y Guías de Trabajos Prácticos de las Asignaturas: Elementos de Química Ambiental y Fisicoquímica del Medio Natural, de la Carrera de Licenciatura en Información Ambiental de la Universidad Nacional de Luján - Años 1997 a 1999
- Participación en el Diseño y Elaboración de Planes de Estudio de la Maestría y Doctorado en Ciencias de Materiales del Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV), Chihuahua, México, 2001
- Diseño y Elaboración de los Programas de las Asignaturas de la la Maestría y Doctorado en Ciencias de Materiales del Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV), Chihuahua, México, 2001
Asignaturas:
 - Introducción a la Química Computacional
 - Modelado Molecular de la Estructura y Propiedades de Polímeros
 - Modelado Químico: de Átomos a Líquidos
 - Simulación Computacional de Materiales Moleculares
- Participación en el Diseño y Elaboración de Planes de Estudio de la Maestría en Ciencias de Materiales - Orientación Nanotecnología del Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV), Chihuahua, México, 2001
- Diseño y Elaboración de los Programas de las Asignaturas de la la Maestría en Ciencias de Materiales - Orientación Nanotecnología del Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV), Chihuahua, México, 2001
- Participación en el Diseño y Elaboración de Planes de Estudio de la Maestría en Nanotecnología del Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV), Chihuahua, México, 2008

14.9. Comités Tutorales, Jurados y Comités Sinodales

- Miembro de Comités Tutorales de Numerosos Alumnos de la Maestría y el Doctorado en Ciencia de Materiales del Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV)
- Miembro de Comités Sinodales de Numerosos Alumnos de la Maestría en Ciencia de Materiales del Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV)
- Miembro de Comités Sinodales de Numerosos Alumnos de Doctorado en Química y Doctorado en Ciencia de Materiales, de Instituciones tales como la Universidad de Valladolid - España, el Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC (CIMAV) - México, la Universidad Autónoma de San Luis Potosí (UASLP) - México y la Universidad Autónoma de Sinaloa, Los Mochis, Sinaloa, México
- Miembro del Jurado para la Designación de Ayudantes de Segunda - Orientación Química General e Inorgánica – Departamento de Ciencias Básicas - Universidad Nacional de Luján - República Argentina