

Currículum Vitae  
Humberto Saint-Martin Posada, Investigador  
Titular C, T. C., desde el 30/06/2021  
Instituto de Ciencias Físicas (ICF) , Universidad Nacional Autónoma de México,  
Apartado Postal 48-3, 62251 Cuernavaca, Morelos, México

### **Resumen:**

Desde el comienzo de mi carrera académica hice investigación de alta calidad, como puede apreciarse por ejemplo en que mi primer modelo molecular de agua, publicado hace 30 años y actualizado hace 18, sigue siendo citado. **Continúo siendo un investigador, docente y divulgador activo:** en los últimos cinco años he mantenido la misma calidad y he logrado incrementar mi productividad, de modo que de 2016 a 2021 he publicado trece (13) artículos en revistas del más alto nivel (siete de clasificación Q1 y cinco de Q2) en diversas áreas de la Física, la Química e incluso de las Ciencias Ambientales. En este mismo período he sido el responsable de dos proyectos financiados por la DGAPA a través del PAPIIT y de un proyecto de súper cómputo en el LANCAD, que se ha renovado anualmente. Además, he dirigido 3 tesis doctorales (2 concluidas --C-- y 1 en proceso --P--), 4 de maestría (3 C y 1 P) y 3 de licenciatura (todas C) e impartí 11 cursos de licenciatura, 3 propedéuticos para ingresar a maestría y 5 de maestría. He sido el organizador principal de 4 Talleres de Dinámica Molecular y he sido invitado no sólo a impartir charlas en I. E. S. nacionales y extranjeras, sino también cursos cortos de mi área de competencia. En cuanto a mi participación institucional, he sido representante del ICF ante el Posgrado en Ciencias Físicas (PCF) y el CAACFMI, representante del área de Biofísica y Ciencia de Materiales ante el Consejo Interno (CI) del ICF y miembro de varias comisiones, además de postularme como candidato a la dirección del ICF en dos ocasiones. Quiero resaltar que colaboré en la reforma de la maestría en Física del PCF para recuperar la “calidad internacional” reconocida por el CONACyT y que ahora sigo colaborando con el comité del Campo de Conocimiento (CC) de “Cuántica, Atómica y Molecular” (CAM) para revisar tanto el mapa curricular correspondiente como las asignaturas propias del CC.

### **Resumen cuantitativo:**

Artículos publicados: 42      Artículos en memorias: 4      Capítulos en libros: 1  
Citas: 1130 externas, 61 de colaboradores y 116 propias, con índice  $h = 21$  ( perfil público en <https://scholar.google.com.mx/citations?user=3v-vddsAAAAJ&hl=es&oi=ao> )  
899 totales, con índice  $h = 18$  (Web of Science, ORCID <https://orcid.org/0000-0003-4159-6165>)  
949 totales, con índice  $h = 17$  (Scopus Author ID 6603008819)  
Tesis dirigidas: Concluidas: 3 Doctorado, 3 Maestría, 3 Licenciatura.  
En proceso: 1 Doctorado, 1 Maestría.  
Supervisión de investigadores posdoctorales: 5  
Cursos regulares impartidos semestralmente desde 1985: 80 (14 de ellos en nivel medio superior)  
Cursos diseñados o re-diseñados: 11. Actualmente trabajando en los cursos del CC-CAM en el PCF.  
Miembro del SNI nivel II desde 2006 y hasta la fecha (CVU 12551).  
Nivel de PriDe: D.  
Organización del Taller de Dinámica Molecular: 6 consecutivos (2014 a 2019), no hubo en 2020, retomado en 2021 y 2022.  
Responsable de proyectos financiados por PAPIIT: 3  
Responsable de proyectos financiados por CONACyT: 4  
Premios y distinciones: 9

## Índice:

- I. Datos personales
- II. Formación académica
  - II.A Grados académicos
  - II.B Cursos de especialización
- III. Trabajo actual
- IV. Experiencia en investigación
  - IV.A Formación profesional
  - IV.B Estancias académicas
  - IV.C Miembro de sociedades científicas
  - IV.D Reconocimientos académicos (premios y distinciones)
- V. Responsable de proyectos de investigación
- VI. Lista de publicaciones
  - VI.A Artículos en revistas con arbitraje (de la más reciente a la más antigua)
  - VI.B Capítulos en libros
  - VI.C Memorias in extenso
- VII. Formación de recursos humanos
  - VII.A Dirección de tesis
    - VII.A.1 Doctorado
    - VII.A.2 Maestría
    - VII.A.3 Licenciatura
  - VII.B Asesorías a estudiantes en estancias cortas
  - VII.C Supervisión de investigadores posdoctorales
  - VII.D Desarrollo de infraestructura académica
  - VII.E Cursos regulares
  - VII.F Cursos especiales
  - VII.G Otras actividades académicas
- VIII. Difusión y divulgación
  - VIII.A Artículos de enseñanza
  - VIII.B Pláticas invitadas
  - VIII.C Pláticas de divulgación
  - VIII.D Seminarios institucionales
  - VIII.E Presentaciones en congresos
  - VIII.F Organización de talleres
- IX. Participación institucional
  - IX.A Cargos académico-administrativos
  - IX.B Miembro de comisiones
  - IX.C Arbitrajes
  - IX.D Información adicional

## **I. Datos personales**

Humberto Saint-Martin Posada

- Sexo: Masculino.
- Nacionalidad: Mexicana.
- Estado civil: Soltero. País de residencia: México
- Idiomas: Dominio del inglés. Conocimiento del neerlandés y del francés.

## **II. Formación Académica**

### **A. Grados académicos**

- Licenciatura en Física, 1983, Universidad Nacional Autónoma de México. Tesis: *Modelado Bidimensional por el Método de Diferencias Finitas, para Datos de Georesistividad en Exploraciones Geofísicas.*
- M. C. en Investigación Biomédica Básica, 1988, Universidad Nacional Autónoma de México. Tesis: *No Aditividad en un Potencial Analítico Intermolecular. La Interacción Agua – Agua.*
- Doctorado en Investigación Biomédica Básica, 1992, Universidad Nacional Autónoma de México. Tesis: *Cálculos Moleculares y Simulaciones Numéricas de la Reacción de Hidrólisis del Pirofosfato.*

### **B. Cursos de especialización**

- Curso corto en HP – UX SYSTEM, Cuernavaca, Morelos, México, 1985 (40 horas), y en HP – UX SYSTEM ADMINISTRATION, Cuernavaca, Morelos, México, 1985 (40 horas).
- University of Florida, Gainesville, U. S. A., International Winter Institute on Quantum Chemistry and Solid State Theory, 1987 (360 horas).
- Cuernavaca, Morelos, México, Escuela Latinoamericana de Física, 1989 (360 horas).
- Universidad Autónoma Metropolitana, Porting and Optimization of Fortran and C Codes for the Ardent TITAN. A Course on Vector and Parallel Processors, 1990 (40 horas).

## **III. Trabajo actual**

- Institución: Universidad Nacional Autónoma de México
- Dependencia: Centro de Ciencias Físicas
- Nombramiento: Investigador Titular “B”, T. C., desde 24/04/2008
- Dirección postal: Apartado postal 48-3, Cuernavaca, Morelos 62251
- Teléfono: (55) 5622-7796. Fax: (55) 5622-7775

- Correo electrónico: hstmartin@icf.unam.mx
- Página del I. C. F.: <https://www.fis.unam.mx/directorio/41/humberto-strong-saint-martin-strong-posada>

## **IV. Experiencia en investigación**

### **A. Formación profesional**

- Estudiante asociado al Instituto de Geofísica, UNAM, 1980 – 1984.
- Estudiante asociado al Instituto de Física, UNAM, 1984 – 1992.
- Investigador postdoctoral en el Departamento de Química Biofísica, Rijksuniversiteit Groningen, Neerlanda, 1992 – 1993.
- Investigador Asociado “C”, T. C. del Instituto de Física, UNAM, 1992 – 1998.
- Investigador Asociado “C”, T. C. del Centro de Ciencias Físicas, UNAM, 1998 – 2000.
- Investigador Titular “A”, T. C. del Centro de Ciencias Físicas, UNAM, a partir de septiembre de 2000 y hasta abril de 2008.
- Investigador Titular “B”, T. C. del Instituto de Ciencias Físicas, UNAM, a partir del 24/04/2008.
- \* Investigador Titular “C”, T. C. del Instituto de Ciencias Físicas, UNAM, a partir del 30/06/2021.
- Investigador Invitado (Gast Onderzoeker) en el Departamento de Química Biofísica, Rijksuniversiteit Groningen, Neerlanda, 2002 – 2003 (año sabático). Anfitriones: Dr. Alan E. Mark y Dr. Herman Berendsen.
- Investigador Invitado en el Departamento de Química de la Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa, 2013 – 2014 (año sabático) Anfitrión: Dr. José Alejandro.

### **B. Estancias académicas**

1. National Aeronautics and Space Administration, Houston, Texas, U. S. A., una semana, septiembre, 1985. Para la planeación de un experimento sobre el transporte de agua a través del xilema, a ser realizado en el transbordador espacial *Atlantis*.
2. National Aeronautics and Space Administration, Orlando, Florida, U. S. A., una semana, noviembre, 1985. Para la preparación y el envío del experimento sobre transporte de agua a través del xilema.
3. Department of Chemistry, University of Arizona, Tucson, Arizona, U. S. A., dos semanas, en diciembre, 1989; una semana, en agosto, 1990; una semana, en diciembre, 1990; un mes, en mayo, 1991. Para realizar cálculos ab initio de fosfatos y de su interacción con agua, e implementar programas para hacer simulaciones por Monte Carlo de los fosfatos en solución acuosa. Proyecto conjunto del Laboratorio de Biofísica, UNAM, y del Department of Chemistry, U of A, apoyado por NSF – CONACyT grant No. INT-9016267.

4. Department of Chemistry, University of Arizona, Tucson, Arizona, U. S. A., una semana, en agosto de 1992, por el mismo motivo anterior.

5. Department of Chemistry, University of Warsaw, Varsovia, Polonia, una semana en mayo de 1993, para profundizar sobre los estudios de la hidratación del pirofosfato.

6. Department of Chemistry, University of Arizona, Tucson, Arizona, U. S. A., dos semanas, en marzo de 1994, por el mismo motivo anterior.

De las estancias 3 a 6 resultaron los artículos 2 a 5.

7. Department of Biophysical Chemistry, Rijksuniversiteit Groningen, Neerlanda, dos semanas, entre abril y mayo de 1994, para revisar la propuesta de un nuevo modelo polarizable para interacciones intermoleculares, y replantear la continuación de una colaboración sobre estudios de transporte de iones a través de membranas biológicas.

8. Departamento de Química Física de la Universidad de Murcia, España, una semana en mayo de 1995, para establecer la colaboración sobre estudios del transporte de iones a través de membranas biológicas.

9. Department of Biophysical Chemistry, Rijksuniversiteit Groningen, Neerlanda, dos semanas, entre mayo y junio de 1995, para ultimar los detalles de un modelo polarizable para simulaciones numéricas, el SMMS, y continuar la colaboración sobre estudios del transporte de iones a través de membranas biológicas.

De las estancias 7 y 9 se concretó el artículo 7.

10. Department of Chemistry, University of Arizona, Tucson, Arizona, U. S. A., diez semanas, junio a agosto de 2000, con una beca de la Fundación México - Estados Unidos para la Ciencia, para reactivar la colaboración sobre estudios teóricos de la fisicoquímica del enlace P–O–P. **Se obtuvo el artículo 31.**

11. Department of Biophysical Chemistry, Rijksuniversiteit Groningen, Neerlanda, tres semanas (12 febrero a 3 de marzo de 2001), para implementar el modelo MCDHO en el paquete GROMACS de dinámica molecular y para intentar refinamientos ulteriores.

12. Departamento de Química Física, Facultad de Química de la Universidad de Sevilla, España, tres semanas (14 de mayo a 4 de junio de 2001), estudios sobre la hidratación del anión  $\text{Br}^-$ , **de donde resultó el artículo 11.**

13. Department of Biophysical Chemistry, Rijksuniversiteit Groningen, Neerlanda, tres semanas (7 al 27 de octubre de 2001), para concretar el estudio de dinámica molecular con el modelo MCDHO. Se obtuvo el método de “restricciones flexibles” (flexible constraints).

14. Gastonderzoeker en Department of Biophysical Chemistry, Rijksuniversiteit Groningen, Neerlanda, estancia sabática del 15 de septiembre de 2002 al 15 de septiembre de 2003, para el desarrollo de modelos polarizables de interacciones intermoleculares para simulaciones numéricas de mezclas de disolventes.

De las estancias 11, 13 y 14, resultaron los artículos 10, 13 y 21.

15. Department of Chemistry, University of Arizona, Tucson, Arizona, U. S. A., dos semanas, noviembre de 2004, para implementar el método de restricciones flexibles en una simulación de la transferencia de una vacancia en cadenas de guaninas.

16. Department of Chemistry, University of Arizona, Tucson, Arizona, U. S. A., dos semanas, abril de 2005, para discutir los resultados preliminares de una simulación de la transferencia de una vacancia en cadenas de guaninas.

17. Department of Chemistry, University of Arizona, Tucson, Arizona, U. S. A., dos semanas, septiembre de 2005, para concluir los estudios de una simulación de la transferencia de una vacancia en cadenas de guaninas.

De las estancias 15 a 17 resultó el artículo 19.

18. Universidad Politécnica de Cartagena, España, 1 a 20 de septiembre de 2009, para diseñar un proyecto para estudiar el mecanismo de inserción en membranas biológicas de péptidos antimicrobianos.

19. Departamento de Química Física de la Universidad de Sevilla, España, 21 de septiembre a 11 de octubre de 2009, en que se implementaron potenciales polarizables para soluciones acuosas de aniones haluros en un programa de dinámica molecular.

20. Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, España, 12 a 31 de octubre de 2009, en que se logró determinar las temperaturas de fusión del hielo Ih y de máxima densidad del líquido, modelado con el potencial MCDHO.2 desarrollado en Cuernavaca.

Aunque no se concretó ningún trabajo en colaboración con ese grupo, de la estancia 20 obtuve los conocimientos y habilidades que luego fueron cruciales para los artículos 26, 27 y 28.

### **C. Miembro de Sociedades Científicas:**

- Miembro estudiante de la Sociedad Mexicana de Física, hasta 1992.
- Miembro estudiante de la Sociedad Mexicana de Bioquímica, hasta 1992.
- Miembro regular de la Sociedad Mexicana de Física, hasta 2000.
- Miembro de American Chemical Society, división de Fisicoquímica, desde 2002.
- Miembro de la Academia de Ciencias de Morelos, desde 2007.
- Miembro de la Red Mexicana de Físico-Química Teórica, desde 2012.
- Miembro co-fundador de la Red Mexicana de Modelado y Simulación Molecular, desde 2014. (Red sin financiamiento de ninguna agencia).

### **D. Reconocimientos académicos:**

- Diploma como uno de los tres mejores físicos de la generación 79 – 82, por la Universidad Nacional Autónoma de México.
- Diploma al mérito, por el experimento sobre transporte de nutrientes en plantas, que se realizó a bordo del transbordador espacial, en la misión STS-61-B. Secretaría de Comunicaciones y Transportes, México, 1985.
- Beca para el International Winter Institute on Quantum Chemistry and Solid State Theory, por la University of Florida, 1987.
- Beca Marie Curie para la estancia en la Universidad de Groningen, por la Comunidad Económica Europea, con el registro B/CII\*-923312.5, 1992.
- Premio Weizmann, a una de las mejores tesis doctorales de 1992, por la Academia de la Investigación Científica y el Instituto Weizmann.  
[https://www.amc.edu.mx/amc/index.php?option=com\\_content&view=article&id=131&Itemid=80](https://www.amc.edu.mx/amc/index.php?option=com_content&view=article&id=131&Itemid=80)
- Sistema Nacional de Investigadores, nivel I, 1996-1999, 1999-2002, 2003-2006. Nivel II, 2006 - 2009, 2010-2014, 2015-2019, 2020-2024, CVU 12551.
- Beca para realizar una estancia de verano en la Universidad de Arizona, dentro del programa “ESTANCIAS DE VERANO EN EE. UU. PARA INVESTIGADORES JÓVENES”, por la Fundación México - Estados Unidos para la Ciencia y la Academia Mexicana de Ciencias, julio - agosto de 2000.
- Cátedra "Linus Carl Pauling", para realizar una estancia sabática, en la Universidad Autónoma Metropolitana, del 15 de octubre de 2013 al 14 de octubre de 2014.
- Designación como miembro del jurado para el Reconocimiento Estatal al Mérito en Investigación, por parte de la SICyT de Morelos, 2017 y 2018.

## **V. Responsable de proyectos de investigación**

1. Diseño de potenciales analíticos sofisticados transferibles para simulaciones numéricas de sistemas moleculares (DGAPA) Identificador: IN122809-3 - Responsable: Humberto Saint-Martin - Vigencia: Enero de 2009 a diciembre de 2011.
2. Desarrollo de nuevos métodos para simulaciones numéricas de sistemas moleculares (CONACyT). Identificador: CB-2005-01-49396 - Responsable: Humberto Saint-Martin - Vigencia: Septiembre de 2006 a diciembre de 2010.
3. Diseño de potenciales analíticos sofisticados transferibles para simulaciones numéricas de sistemas moleculares (DGAPA). Identificador: IN109915, Responsable: Humberto Saint-Martin. Vigencia: 15/01/2015 a 31/12/2017, Monto: \$600,000.00.
4. Financiamiento para el 4o Taller de Dinámica Molecular (CONACYT). Identificador: 233330. Responsable: Humberto Saint Martin Posada, Corresponsable: José Alejandro. Vigencia: 01/07/2014 a 31/12/2014, Monto: \$150,000.00

5. Financiamiento para el 7o Taller de Dinámica Molecular (CONACYT). Identificador: 279472. Responsable: Humberto Saint Martin Posada. Vigencia: 30/11/2017, Monto: \$150,000.00.

6. Financiamiento para el 8o Taller de Dinámica Molecular (CONACYT). Identificador: 293012. Responsable: Humberto Saint Martin Posada, Corresponsable: César Millán Pacheco. Vigencia: 7/07/2018 a 30/11/2018, Monto: \$150,000.00.

7. Diseño de potenciales analíticos sofisticados transferibles para simulaciones numéricas de sistemas moleculares (PAPIIT). Identificador: IN110419, Vigencia: 01/2018 a 12/2020. Monto: \$600,000.00.

## VI. Lista de publicaciones:

**En rojo el año de las publicaciones de 2016 a 2020; en azul las de 2009 a 2015, que son después de mi promoción a titular B (entre ambas suman la mitad de mi producción).**

### A. Artículos en revistas con arbitraje

( Cuartil Q#, factor de impacto, F. I.

El número de citas obtenido de mi perfil en scholar.google.com.mx

<https://scholar.google.com.mx/citations?user=3v-vddsAAAAJ&hl=es&oi=ao> )

42. Alejandro Ramírez-Solís, Guillermo Hinojosa, Humberto Saint-Martin, *The quest for negative methane: The CH<sub>4</sub><sup>-</sup> anion*, Int'l. J. Modern Phys. B 36 (23) 2230004, 2022. **Q3, F. I. 1.42**

41. Alejandro Ramírez-Solís, Nicholas G Boekell, César Iván León-Pimentel, Humberto Saint-Martin, Caroline O Bartulovich, Robert A Flowers, *Ammonia Solvation vs Aqueous Solvation of Samarium Diodide. A Theoretical and Experimental Approach to Understanding Bond Activation Upon Coordination to Sm (II)*, J. Org. Chem. 87 (3), 1689-1697, 2021. **Q1, F. I. 4.354.**

40. León-Pimentel, César; Saint-Martin, Humberto; Ramírez-Solís, Alejandro. *Mg(II) and Ca(II) Microsolvation by Ammonia: Born-Oppenheimer Molecular Dynamics Studies*, J. Phys. Chem. A 125 (21), 4565-4577, 2020. **Q2, F. I. 2.600.**

39. Aurélie Barats, Christophe Renac, Anna Maria Orani, Gaël Durrieu, Humberto Saint-Martin, María Vicenta Esteller, Sofía Esperanza Garrido Hoyos, *Tracing source and mobility of arsenic and trace elements in a hydrosystem impacted by past mining activities (Morelos state, Mexico)*, Science of The Total Environment 712, 135565, 2020. **Q1, F. I. 6.551. Citas: 3.**

38. Alejandro Ramírez-Solís, Jacques Vigue, Guillermo Hinojosa, Humberto Saint-Martin, *Solving the CH<sub>4</sub><sup>-</sup> riddle: the fundamental role of spin to explain metastable anionic methane*, Phys. Rev. Lett. 124 (5), 056001, 2020. **Q1, F. I. 8.385. Citas: 1.**

37. Robert Flowers, Alejandro Ramírez-Solís, Caroline Bartulovich, Humberto Saint-Martin, César León-Pimentel, Nicholas Boekell, *Proton donor effects on the reactivity of SmI<sub>2</sub>. Experimental and Theoretical Studies on Methanol Solvation vs. Aqueous Solvation*, Dalton Transactions 49, 7897-7902, 2020. **Q1, F. I. 4.174. Citas: 1.**

36. Alejandro Ramírez-Solís, Caroline O. Bartulovich, César Iván León-Pimentel, Humberto Saint-Martin, William R Anderson Jr, Robert A Flowers, *Experimental and Theoretical Studies on the Aqueous Solvation and Reactivity of SmCl<sub>2</sub> and Comparison with SmBr<sub>2</sub> and SmI<sub>2</sub>*, Inorg. Chem. 58 (20), 13927-13932, 2019. **Q1, F. I. 4.825. Citas: 2.**



35. César Iván León-Pimentel, Manuel Martínez-Jiménez, Humberto Saint-Martin, *Study of the Elusive Hydration of  $Pb^{2+}$  from the Gas Phase to the Liquid Aqueous Solution: Modeling the Hemidirected Solvation with a Polarizable MCDHO Force-Field*, J. Phys. Chem. B 123 (43), 9155-9166, 2019. **Q2, F. I. 2.857. Citas: 2.**
34. Alejandro Ramírez-Solís, Caroline O. Bartulovich, Tesia V. Chciuk, Jorge Hernández-Cobos, Humberto Saint-Martin, Laurent Maron, William R. Anderson Jr., Anna M. Li, and Robert A. Flowers II, *Experimental and Theoretical Studies on the Implications of Halide Dependent Aqueous Solvation of  $Sm(II)$* , J. Am. Chem. Soc. 140 (48), 16731-16739, 2018. **Q1, F. I. 14.612. Citas: 13.**
33. Jorge I. Amaro-Estrada, Jorge Hernández-Cobos, Humberto Saint-Martin, Laurent Maron, and Alejandro Ramírez-Solís. *Hydration of  $CH_3HgOH$  and  $CH_3HgCl$  compared to  $HgCl_2$ ,  $HgClOH$  and  $Hg(OH)_2$ : A DFT microsolvation cluster approach*, J. Chem. Phys. 149, 144301, 2018. **Q2, F. I. 2.991. Citas: 1.**
32. C. I. León-Pimentel, J. I. Amaro-Estrada, J. Hernández-Cobos, H. Saint-Martin, A. Ramírez-Solís, *Aqueous solvation of  $Mg(II)$  and  $Ca(II)$ : A Born-Oppenheimer molecular dynamics study of microhydrated gas phase clusters*, J. Chem. Phys. 148 (14), 144307, 2018. **Q2, F. I. 2.991. Citas: 8.**
31. M. Martínez-Jiménez, H. Saint-Martin, *A four-site molecular model for simulations of liquid methanol and water-methanol mixtures:  $MeOH-4P$* , J. Chem. Theor. Comput. 14 (5), 2526-2537, 2018. **Q1, F. I. 5.011. Citas: 14.**
30. A. Ramírez-Solís, J. I. Amaro-Estrada, C. I. León-Pimentel, J. Hernández-Cobos, S. E. Garrido-Hoyos and H. Saint-Martin, *On the solvation of  $AsO(OH)_3$  vs  $As(OH)_3$ . Born-Oppenheimer molecular dynamics density functional theory cluster studies*, Phys. Chem. Chem. Phys. 20, 16568–16578, 2018. **Q2, F. I. 3.430. Citas: 2.**
29. C. I. León-Pimentel, J. I. Amaro-Estrada, H. Saint-Martin, A. Ramírez-Solís, *Born-Oppenheimer molecular dynamics studies of  $Pb(II)$  micro-hydrated gas phase clusters*, J. Chem. Phys. 146 (8), 084307, 2017. **Q2, F. I. 2.991. Citas: 11.**
28. D. P. Luis, J. López-Lemus, M. Ll. MasPOCH, E. A. Franco-Urquiza, H. Saint-Martin, *Methane hydrate: Shifting the coexistence temperature to higher temperatures with an external electric field*, Mol. Sim., 42 (12): 1014-1023, 2016. **Q3, F. I. 1.716. Citas: 3.**
27. Daniel P. Luis, Alcione García-González, Humberto Saint-Martin, *A theoretical study of the hydration of methane, from the aqueous solution to the  $sI$  hydrate-liquid water coexistence*, Int. J. Mol. Sci., 17 (378), 2016. **Q1, F. I. 4.602. Citas: 6.**
26. D. P. Luis, E. C. Herrera-Hernández, and H. Saint-Martin, *A theoretical study of the dissociation of the  $sI$  methane hydrate induced by an external electric field*, J. Chem. Phys. 143: art. 204503, 2015. **Q2, F. I. 2.991. Citas: 17.**
25. H. M. Manzanilla-Granados, H. Saint-Martin, R. Fuentes-Azcatl, J. Alejandro, *Direct Coexistence Methods to Determine the Solubility of Salts in Water from Numerical Simulations. Test Case  $NaCl$* , J. Phys. Chem. B 119: 8389-8396, 2015. **Q2, F. I. 2.857. Citas: 32.**

24. G. Bravo-Pérez, H. Saint-Martin, *A theoretical study of the confinement of methane in water clusters*, Int'l. J. Quant. Chem. 112 (22), 3655-3660, 2012. **Q3, F. I. 1.747. Citas: 10.**
23. J. Alejandro, G. A. Chapela, H. Saint-Martin, N. Mendoza, *A non-polarizable model of water that yields the dielectric constant and the density anomalies of the liquid: TIP4Q*, Phys. Chem. Chem. Phys. 13 (44): 19741-19749, 2011. **Q2, F. I. 3.430. Citas: 51.**
22. M. L. San-Román, J. Hernández-Cobos, H. Saint-Martin, I. Ortega-Blake, *A theoretical study of the hydration of Rb + by Monte Carlo simulations with refined ab initio-based model potentials*, Theoret. Chem. Acc. 126: 197 - 211, 2010. **Q4, F. I. 1.498. Citas: 23.**
21. A. Villa, B. Hess, H. Saint-Martin, *Dynamics and structure of Ln(III)-aqua ions: A comparative molecular dynamics study using ab initio based flexible and polarizable model potentials*, J. Phys. Chem. B 113 (20), pp. 7270-7281, 2009. **Q2, F. I. 2.857. Citas: 60.**
20. M. Valdez-González, H. Saint-Martin, J. Hernández-Cobos, R. Ayala, E. Sánchez-Marcos, I. Ortega-Blake, *Liquid methanol Monte Carlo simulations with a refined potential which includes polarizability, nonadditivity, and intramolecular relaxation*, J. Chem. Phys. 127 (22): art. no. 224507, 2007. **Q2, F. I. 2.991. Citas: 25.**
19. M. Volobuyev, H. Saint-Martin, L. Adamowicz, *A molecular dynamics calculations of hole transfer rates in DNA strands*, J. Phys. Chem. B 111 (37), pp. 11083-11089, 2007. **Q2, F. I. 2.857. Citas: 10.**
18. M. Carrillo-Tripp, M. L. San-Román, J. Hernández-Cobos, H. Saint-Martin, I. Ortega-Blake, *Ion hydration in nanopores and the molecular basis of selectivity*, Biophys. Chem. 124 (3), 243 – 250, 2006. **Q3, F. I. 1.995. Citas: 44.**
17. M. L. San-Román, M. Carrillo-Tripp, H. Saint-Martin, J. Hernández Cobos, I. Ortega-Blake, *A theoretical study of the hydration of Li + by Monte Carlo simulations with refined ab initio based model potentials*. Theor. Chem. Acc. 115 (2-3), 177 – 189, 2006 (publicado en línea el 19 de enero de 2006). **Q4, F. I. 1.498. Citas: 28.**
16. J. Hernández Cobos, H. Saint-Martin, A. D. Mackie, L. F. Vega, I. Ortega-Blake, *Water liquid - vapor equilibria predicted by refined ab initio derived potentials*. J. Chem. Phys. 123, Art. No. 044506, 2005. **Q2, F. I. 2.991. Citas: 10.**
15. H. Saint-Martin, J. Hernández-Cobos, I. Ortega-Blake, *Water models based on a single potential energy surface and different molecular degrees of freedom*. J. Chem. Phys. 122, Art. No. 224509, 2005. Virtual Journal of Biological Physics Research, 10 (1), 2005. **Q2, F. I. 2.991. Citas: 16.**
14. M. Carrillo-Tripp,<sup>†</sup> H. Saint-Martin, I. Ortega-Blake, *Minimalist molecular model for nanopore selectivity*. Phys. Rev. Lett. 93, Art. No. 168104 (2004). Virtual Journal of Biological Physics Research, 8 (8), 2004. Virtual Journal of Nanoscience and Technology, 10 (17), 2004. **Q1, F. I. 8.385. Citas: 66.**
13. H. Saint-Martin, B. Hess, H. J. C. Berendsen, *An application of flexible constraints in Monte Carlo simulations of the isobaric-isothermal ensemble of liquid water and ice Ih with the polarizable and flexible MCDHO model*. J. Chem. Phys. 120, 11133 (2004). Virtual Journal of Biological Physics Research, 7 (11), 2004. **Q2, F. I. 2.991. Citas: 88.**

12. M. Carrillo-Tripp,<sup>†</sup> H. Saint-Martin, I. Ortega-Blake, *A comparative study of the hydration of Na<sup>+</sup> and K<sup>+</sup> with refined polarizable model potentials*. J. Chem. Phys. 118, 7062 (2003). Virtual Journal of Biological Physics Research, 5 (7), 2003. Seleccionado por Molecular Modeling and Computational Chemistry, MMCC Results 12 (22), 2003. Q2, F. I. 2.991. Citas: 155.
11. R. Ayala, J. M. Martínez, R. R. Pappalardo, H. Saint-Martin, I. Ortega-Blake, E. Sánchez-Marcos, *Development of first-principles interaction model potentials: An application to the study of bromide hydration*. J. Chem. Phys. 117, 10512 (2002). Virtual Journal of Biological Physics Research, 4 (11), 2002. **Q2, F. I. 2.991. Citas: 46.**
10. B. Hess, H. Saint-Martin, H. J. C. Berendsen, *Flexible constraints: an adiabatic treatment of quantum degrees of freedom, with an application to the MCDHO model for water*. J. Chem. Phys. 116, 9602 (2002). Virtual Journal of Biological Physics Research, 3 (11), 2002. **Q2, F. I. 2.991. Citas: 47.**
9. W. J. McCarthy, L. Adamowicz, H. Saint-Martin, I. Ortega-Blake *A comparative ab initio study of the isomerizations and hydrolyses of neutral and anionic M-pyrophosphate complexes, with M = Ca, Zn*. Rev. Soc. Quím. Mex. 46, 145, 2002. (Cambio de nombre a J. Mex. Chem. Soc.) **Q4, F. I. 0.538. Citas: 6.**
8. J. M. Martínez, J. Hernández-Cobos, H. Saint-Martin, R. R. Pappalardo, I. Ortega-Blake, E. Sánchez-Marcos, *Coupling the MCHO polarizable water model to the hydrated ion-water interaction potential: a test on the Cr<sup>3+</sup> hydration*. J. Chem. Phys. 112, 2339, 2000. **Q2, F. I. 2.991. Citas: 47.**
7. H. Saint-Martin, J. Hernández-Cobos, M. I. Bernal-Uruchurtu, I. Ortega-Blake, H. J. C. Berendsen, *A mobile-charge-densities-in-harmonic-oscillators molecular model for numerical simulations. The water-water interaction*. J. Chem. Phys. 113, 10899, 2000. Virtual Journal of Biological Physics Research, 2 (1), 2001. **Q2, F. I. 2.991. Citas: 141.**
6. H. Saint-Martin, L. E. Ruiz-Vicent, *Ab Initio Study of the Hydrolysis Reactions of Neutral and Anionic Mg-pyrophosphate Complexes in the Gas Phase*. J. Phys. Chem. A 103, 6862, 1999. **Q2, F. I. 2.600. Citas: 13.**
5. W. J. McCarthy, D. M. A. Smith, L. Adamowicz, H. Saint-Martin, I. Ortega-Blake, *An ab Initio Study of the Isomerization of Mg- and Ca- Pyrophosphates*. J. Am. Chem. Soc. 120, 6113, 1998. **Q1, F. I. 14.612. Citas: 21.**
4. H. Saint-Martin, L. E. Ruiz-Vicent, A. Ramírez-Solís, I. Ortega-Blake, *Toward an understanding of the hydrolysis of Mg-PPi. An ab initio study of the isomerization reactions of neutral and anionic Mg-pyrophosphate complexes*. J. Am. Chem. Soc. 118, 12167, 1996. **Q1, F. I. 14.612. Citas: 38.**
3. H. Saint-Martin, I. Ortega-Blake, A. Leś y L. Adamowicz, *The Role of Hydration in the Hydrolysis of Pyrophosphate. A Monte Carlo Simulation with Polarizable – Type Interaction Potentials*. Biochim. Biophys. Acta 1207, 12, 1994. **Q2, F. I. 3.465. Citas: 24.**
2. H. Saint-Martin, I. Ortega-Blake, A. Leś and L. Adamowicz, *Ab initio Calculations of the Pyrophosphate Hydrolysis Reaction*. Biochim. Biophys. Acta 1080, 205, 1991. **Q2, F. I. 3.465. Citas: 26.**

1. H. Saint–Martin, C. Medina–Llanos and I. Ortega–Blake, *Nonadditivity in an Intermolecular Analytical Potential. The Water–Water Interaction*. J. Chem. Phys. 93, 6448, 1990.

**Q2, F. I. 2.991. Citas: 70.**

### **B. Capítulos en libros:**

1. H. Saint–Martin and I. Ortega–Blake, *The Microscopic Structure and Dynamics of Water at a Surface*, chapter 3 in *Biomolecules in Organic Solvents*. A. Gómez–Puyou, ed., CRC Press, Boca Raton, FL, U. S. A., (1992). **Citas: 2.**

### **C. Memorias in extenso:**

1. H. Saint–Martin, *The Use of Refined Potentials in Numerical Simulations of Biological Solutes*, CAM'94 Physics Meeting, AIP Press, (ed. A. Zepeda), New York, (1995).

2. M. A. Hisojo-Zamudio, H. Saint-Martin, *Development of a parallel code for numerical simulations of liquid water with a sophisticated model potential and the PIMC method to include quantum effects*, CiComp'07, U. A. B. C. (2007) (Sólo en versión electrónica).

3. H. Saint-Martin, *Following the path of experimental data from computational biophysics to nanotechnology*, AIP Conference Proceedings 979, pp. 156-165, 2008.

4. Aurélie Barats, AM Orani, C Renac, JP Goudour, G Durrieu, H Saint-Martin, MV Esteller, SE Garrido Hoyos, *Behaviour and mobility of arsenic in a Mexican hydrosystem impacted by past mining activities*, Proceedings of the Sixth International Congress on Arsenic in the Environment (As2016), June 19–23, 2016, Stockholm, Sweden. **Citas: 2.**

## **VII. Formación de recursos humanos.**

### **A. Dirección de tesis:**

#### **A.1 Doctorado:**

1. Nahuel Armando Moreno Pérez, PCF-UNAM, en proceso desde 2019.

2. César Iván León Pimentel, PCF-UNAM, *Estudio de la hidratación de  $Pb^{2+}$  desde la fase gaseosa hasta la solución acuosa*. El Dr. León Pimentel es actualmente Profesor Ordinario de Carrera Asociado “C” en el Departamento de Matemáticas de la Facultad de Química de la UNAM. Candidato a Investigador Nacional, CVU 558438. Seis artículos relacionados con su tesis: 29, 30, 32, 35, 36 y 37. Seguimos colaborando y ya se envió otro más a publicación, el 40.

3. Manuel Martínez Jiménez, PCF-UNAM, *Disoluciones acuosas de metano, etanol y 1-propanol: Estudio de la fase líquida, coexistencias líquido-vapor y líquido-sólido, empleando modelos moleculares refinados*. Defensa de la tesis en agosto de 2019. El Dr. Martínez Jiménez está actualmente ocupando una segunda plaza posdoctoral, en la Universidad de Guanajuato. Candidato a Investigador Nacional, CVU 351689. Dos artículos relacionados con su tesis: 31 y 35. Seguimos colaborando para enviar a publicación otros dos.

4. Mauricio Carrillo Tripp, Posgrado en Ciencias de la UAEMor., *Selectividad iónica de canales biológicos. Simulaciones numéricas de sistemas simplificados usando potenciales refinados. Defensa de la tesis el 24 de enero de 2005. El Dr. Carrillo Tripp es ahora Investigador Cinvestav 3C en la unidad de Monterrey y miembro del S. N. I., nivel 1, CVU 83931. Cuatro artículos relacionados con su tesis: 12, 14, 17 y 18.*

(<https://www.monterrey.cinvestav.mx/Investigaci%C3%B3n/Dr-Mauricio-Carrillo-Tripp>)

### **A.2 Maestría:**

1. Cristian Emmanuel Bahena, PCF-UNAM, en proceso desde 2019.

2. César Iván León Pimentel, PCF-UNAM, *Estudio teórico de la hidratación comparativa de los cationes Ca(II) y Pb(II)*. Defensa de la tesis, en modalidad de protocolo de investigación, el 27/07/2015. Continuó el doctorado bajo mi dirección.

3. Braulio Joel Rojas Mayoral, PCF-UNAM, *Estudio teórico de la hidratación de los lantánidos*. Defendida el 18 de junio de 2015. **El M. en C. Rojas Mayoral actualmente trabaja en el Grupo de Ecología y Conservación de Islas, A.C., en Ensenada, B. C.**

(<https://www.islas.org.mx/directorio?ver=74#gsc.tab=0>)

4. Manuel Martínez Jiménez, PCF-UNAM, *Construcción de modelos moleculares refinados para los alcoholes primarios metanol y etanol*. Defensa de la tesis, en modalidad de protocolo de investigación, el 22/08/2014. **El Dr. Martínez Jiménez pudo obtener los grados de licenciatura y maestría el mismo año 2014 porque ya había cursado las materias de la maestría y sólo requería del grado inmediato anterior para poder defender el protocolo. Realizó ambos trabajos bajo mi dirección y continuó al doctorado.**

### **A.3 Licenciatura:**

1. Manuel Martínez Jiménez, Facultad de Ciencias, UNAM. *Parametrización de un modelo molecular de agua líquida (MCDHO) que reproduce la ecuación de estado densidad vs. Temperatura*. Defensa de la tesis el 09/05/2014.

2. Miguel Ángel Hisojo Zamudio, Facultad de Ciencias, UAEMor., *Desarrollo de una herramienta informática para hacer predicciones teóricas sobre el comportamiento de sistemas moleculares complejos*. Defensa de la tesis el 26 de octubre de 2006. **El Dr. Hisojo Zamudio obtuvo el doctorado el 15/12/2014 en Francia. Actualmente tiene una empresa propia en Neerlanda, desarrollando software para el cuidado de la salud.**

3. Mariana Ávila Montero, Ingeniería Física (Licenciatura), Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, *Canales derivados de anfotericina B en bicapas lipídicas*. Defensa de la tesis el 26 de noviembre de 2004.

### **B. Asesorías a estudiantes en estancias cortas**

1. Rogelio A. Hernández López, de la Facultad de Química de la UNAM, estancia de enero de 2008 a marzo de 2009, financiada por el Banco Santander y por CONACyT. Decidió hacer su doctorado en la Universidad de Harvard y ahora ocupa una plaza posdoctoral en UC-San Francisco.

2. Braulio Joel Rojas Mayoral, de la Licenciatura en Física de la Universidad de Sonora, estancia de enero a abril de 2009, financiada por el Banco Santander. Y de julio a agosto de 2010, estancia de verano financiada por la Academia Mexicana de Ciencias.
3. Gloria Alejandra Amaya Corona, de la Licenciatura en Física de la U. A. B. C., estancia de verano financiada por el programa Delfín. Decidió hacer una tesis de licenciatura experimental.
4. Roberto Mota Navarro, de la Licenciatura en Física de la U. de G., estancia de verano financiada por la Academia Mexicana de Ciencias. Continuó en el PCF-UNAM, dedicado a econofísica.
5. Natsuko Rivera Yoshida Lia, de la Licenciatura en Ciencias de la FC UAEMor., julio-agosto 2010.

### **C. Supervisión de investigadores posdoctorales**

1. Dr. Omar González Amezcua, agosto de 2006 a junio de 2007, financiado por proyecto CONACyT. Tomó una plaza de profesor en la Facultad de la UANL, donde trabaja actualmente.
2. Dr. César Millán Pacheco, enero-septiembre 2010, financiado por proyecto CONACyT. Ahora es catedrático por horas en la Facultad de Farmacia de la UAEMor. **Ha sido co-organizador de los Talleres de Dinámica Molecular de 2014 a 2019. Continuamos colaborando en un par de proyectos que han requerido muchos recursos computacionales. Él se ha mantenido activo con otros proyectos y aunque no pertenece al S. N. I., ha publicado 37 artículos en diferentes revistas científicas (<https://orcid.org/0000-0001-5180-6504>)**
3. Dr. Francisco Noé Mendoza Ambrosio, septiembre 2010 - agosto 2011, beca de CONACyT para apoyo al PCF. **De su estancia resultó el artículo 23. Ahora es profesor-investigador en la Universidad del Papaloapan.**
4. Dr. Daniel Porfirio Luis Jiménez, agosto 2011 a julio 2012, beca de CONACyT para apoyo al PCF. **De su estancia resultaron los artículos 26, 27 y 28. Ahora ocupa una cátedra de CONACyT en el CIDESI y es miembro del S. N. I. en el nivel 1, con CVU 161340.**
5. Dr. Jorge Iván Amaro Estrada, 1 de abril de 2017 a 31 de marzo de 2018, DGAPA-UNAM. **De su estancia resultaron los artículos 29, 30, 32 y 33. Ahora ocupa una plaza posdoctoral en la Universidad de Texas en Austin y es miembro del S. N. I. con nivel 1, CVU 351295. Seguimos colaborando y tenemos resultados para enviar otro artículo a publicación este año.**

### **D. Desarrollo de infraestructura académica**

1. Reestructuración de los programas de Cálculo en la Facultad de Ciencias de la UAEM, 1996.
2. Diseño del Paquete de Biofísica para el Doctorado en Ciencias de la FC – UAEM, 1996.
3. Coordinador del área de Biofísica del Doctorado en Ciencias, en la FC – UAEM, 1994 - 1996, 1998 - 2000, 2004.
4. Reestructuración del Paquete de Biofísica para el Doctorado en Ciencias de la FC – UAEM, 2000.



5. Diseño de dos asignaturas optativas para la Licenciatura en Ciencias de la FC – UAEM, 2005.
6. Reestructuración de la Maestría en Física para el PCF – UNAM, 2014.
7. Diseño de materias optativas para la Maestría en Física del PCF-UNAM, de 2016 a la fecha.

### **E. Cursos regulares**

1. Desde 1985 hasta 1992, cursos de Análisis Vectorial en la Facultad de Ciencias Químicas e Industriales (FCQeI) de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM). Al nivel de la licenciatura.
2. Desde 1985 hasta 1992, cursos de Física, Matemáticas y Ciencias de la Tierra, en Cuernavaca, Morelos, México. Nivel preparatoria.
3. Cursos de matemáticas para la licenciatura en Investigación Biomédica Básica, en la UACPyP del CCH, UNAM, 1989 y 1990.
4. Cursos de Análisis Vectorial en la FCQeI de la UAEM, al nivel de la licenciatura, 1994 – 1996.
5. Cursos de Fisicoquímica en la Maestría en Química Orgánica de la FCQI – UAEM, 1994.
6. Curso de Cálculo I en la Facultad de Ciencias de la UAEM, 1995 y 1997.
7. Curso de Teoría Molecular de Líquidos en el Doctorado de la Facultad de Ciencias de la UAEM, 1998.
8. Curso de Álgebra I en la FC – UAEM, 1998.
9. Curso de Teoría Molecular de Líquidos en el Posgrado en Ciencias Físicas de la UNAM, 1999.
10. Cursos de Fisicoquímica en el Doctorado de la Facultad de Ciencias de la UAEM, 1999 y 2000.
11. Curso de Cálculo I en la Facultad de Ciencias de la UAEM, 2000.
12. Curso de Cálculo Vectorial en la FCQeI-UAEM, al nivel de la licenciatura, septiembre 2001 - enero 2002, febrero - junio 2002, septiembre 2003 - enero 2004, febrero - junio 2004, agosto 2004 - febrero 2005, febrero - julio 2005, agosto 2005 – enero 2006, febrero-julio 2008, agosto 2008 - enero 2009, febrero-julio 2009, enero-junio 2010, agosto-diciembre 2010, febrero-julio 2011, agosto-diciembre 2011, enero-junio 2012, agosto-diciembre 2012, febrero-julio 2015, agosto-diciembre 2015, febrero-julio 2016, agosto-diciembre 2016, febrero-julio 2017, agosto-diciembre 2017, febrero-julio 2018, agosto-diciembre 2018, febrero-julio 2019, agosto-diciembre 2019, febrero-julio 2020, agosto-diciembre 2020. **Impartido 33 veces en los últimos 20 años, con 4 h/semana.**
13. Curso de Fisicoquímica en el Doctorado de la Facultad de Ciencias de la UAEM, febrero - junio 2002, agosto – diciembre de 2012.
14. Curso de Teoría Molecular de Líquidos en el Doctorado de la Facultad de Ciencias de la UAEM, septiembre 2003 - enero 2004.

15. Curso de Física II para la Licenciatura en Ciencias de la FC-UAEM, febrero - junio 2004.
16. Curso de Física I para la Licenciatura en Ciencias de la FC-UAEM, agosto 2004 - enero 2005.
17. Curso optativo de Simulaciones Numéricas de Sistemas de Partículas Interactivas I para la Licenciatura en Ciencias de la FC-UAEM, agosto 2005 - enero 2006.
18. Curso optativo de Simulaciones Numéricas de Sistemas de Partículas Interactivas II para la Licenciatura en Ciencias de la FC-UAEM, febrero - junio 2006.
19. Curso optativo de Simulaciones Numéricas de Sistemas de Partículas Interactivas III para la Licenciatura en Ciencias de la FC-UAEM, agosto - diciembre 2006.
20. Curso optativo de Simulaciones Numéricas de Sistemas de Partículas Interactivas I para la Licenciatura en Ciencias de la FC-UAEM, agosto 2006 - diciembre 2006.
21. Física de Medios Continuos para la Licenciatura en Ciencias de la FC-UAEM, agosto 2006 - diciembre 2006.
22. Seminario de Pre-Residencia para la Licenciatura en Ciencias de la FC-UAEM, febrero-julio 2008.
23. Curso propedéutico de Mecánica Clásica para el Posgrado en Ciencias Físicas de la UNAM (24 horas), abril-mayo de 2008, septiembre-noviembre de 2010, marzo-mayo de 2013.
24. Físico-química 2 para la Licenciatura en Ciencias de la FC-UAEM, enero-julio 2009.
25. Físico-química 1 para la Licenciatura en Ciencias de la FC-UAEM, julio-agosto 2009, curso intersemestral intensivo.
26. Mecánica Cuántica I para la Maestría en Ciencias Físicas de la UNAM, duración [96] hrs, enero a junio de 2010.
27. Propedéutico de Mecánica Clásica (ingreso a maestría, PCF-UNAM), duración [24] hrs, abril a mayo de 2011.
28. Físicoquímica (Posgrado en Ciencias, FC-UAEM), duración [80] hrs, en el semestre: agosto a diciembre de 2012.
29. Física Molecular (Maestría, PCF-UNAM), duración [80] hrs, agosto a diciembre de 2012.
30. Física Molecular (Maestría, PCF-UNAM), duración [96] hrs (nuevo programa), agosto a diciembre de 2014.
31. Propedéutico de Termodinámica (ingreso a maestría, PCF-UNAM), duración [24] hrs, abril a mayo de 2015.
32. Simulaciones numéricas (Posgrado en FC-UAEM), duración [96] hrs, febrero-julio de 2016.



33. Propedéutico de Termodinámica (ingreso a maestría, PCF-UNAM), duración [24] hrs, abril a mayo de 2018.
34. Mecánica y Dinámica (Licenciatura, CIQ-UAEM), duración [64] hrs, agosto-diciembre 2019.
35. Propedéutico de Termodinámica (ingreso a maestría, PCF-UNAM), duración [24] hrs, abril a mayo de 2019.
36. Propedéutico de Termodinámica (Maestría, PCF-UNAM), duración [24] hrs, octubre a noviembre de 2019.
37. Simulaciones numéricas de sistemas moleculares. Métodos de Dinámica Molecular y de Monte Carlo (Maestría, PCF-UNAM), duración [80] hrs, febrero a julio de 2020.
38. Física Molecular (ingreso a maestría, PCF-UNAM), duración [96] hrs, agosto a diciembre de 2020.
39. Simulaciones numéricas de sistemas moleculares. Métodos de Dinámica Molecular y de Monte Carlo (Maestría, PCF-UNAM), duración [96] hrs (nuevo programa), febrero a julio de 2021.
40. Física Molecular (maestría, PCF-UNAM), duración [80] hrs., agosto a diciembre de 2021.
41. Mecánica Estadística con Dinámica Molecular (maestría, PCF-UNAM), duración [80] hrs., agosto a diciembre de 2022.
42. Física Molecular (maestría, PCF-UNAM), duración [80] hrs., agosto a diciembre de 2022.

### **F. Cursos especiales**

1. Curso especial para maestros de Matemáticas para preparatoria, en la Universidad Autónoma del Estado de Morelos, 1988.
2. Minicurso Modelos de Interacciones Moleculares para las Simulaciones Numéricas de los Fluidos Densos y taller sobre la teoría de los orbitales moleculares en la III Escuela de Verano La Visión Molecular de la Materia, en Cuernavaca, Morelos, durante agosto de 1994.
3. Minicurso Las simulaciones numéricas de los líquidos, en las Escuelas de Verano en Física, que con el título La Visión Molecular de la Materia se llevan a cabo en Cuernavaca, bajo la organización del IFUNAM y de la FC-UAEM.1.-Física Molecular (Posgrado en Universidad Nacional Autónoma de México), duración [96] hrs, en el semestre: 2o.
4. Física pre-universitaria, para alumnos del último año de bachillerato, ICF UNAM, FC UAEMor., 3 horas semanales de febrero a julio de 2007.
5. Curso de Termodinámica para profesores del nivel medio superior (COBAEM), Facultad de Ciencias UAEM, 12 horas, 31 de agosto y 1 de septiembre de 2007.
6. Curso de Mecánica Clásica para la selección de Morelos a la etapa nacional de la Olimpiada de Física. 2 horas semanales, de septiembre a octubre de 2007.

7. Dos Talleres de Biofísica Molecular Computacional, en el IPICYT, uno en noviembre de 2007 y otro en noviembre de 2009.

8. Cursos de manejo de programas de cálculos cuánticos moleculares y de simulaciones numéricas en los Talleres sobre Simulación Molecular efectuados en la Universidad de Guanajuato en 2011 y en 2012 (5 horas en cada ocasión).

9. Biofísica Molecular, en la Escuela de Verano de Física, UNAM, duración [5] hrs, julio de 2012.

10. Curso corto sobre cálculos de energía libre en simulaciones numéricas de sistemas moleculares (12 horas totales) del 10 al 13 de octubre de 2016, en la Universidad Católica Santa María de Arequipa, Perú.

### **G. Otras actividades académicas**

- Sinodal en exámenes departamentales de materias de Física y de Matemáticas de la licenciatura en Ciencias de la UAEM.
- Sinodal en exámenes departamentales de Fisicoquímica, Teoría Molecular de Líquidos, Mecánica Estadística, Simetrías y Orbitales Atómicos, en las tres áreas, física, química y biofísica, del Doctorado en Ciencias de la UAEM.
- Sinodal del examen de admisión al Doctorado en Ciencias de la UAEM.
- Miembro de los Comités Tutores de Erasmo Ovalle García, de Ricardo Robledo Martínez y de Maximiliano Valdez González, estudiantes del Doctorado en Ciencias de la UAEM, ya todos recibidos.
- Miembro del Comité Tutor de Tomás Rocha Rinza, estudiante del Doctorado en Ciencias Químicas de la UNAM, ya recibido.
- Miembro del Comité Tutor de Jorge Iván Amaro Estrada, en la Maestría en Ciencias Físicas de la UAEM, ya recibido.
- Revisor del plan de estudios de la licenciatura en Biofísica de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí 14 y 15 de junio de 2012.

## **VIII. Difusión y divulgación**

### **A. Artículos de enseñanza**

1. H. Saint–Martin, *El Uso de Métodos Teóricos para Estudiar Reacciones Bioquímicas*, Memorias de la IV Escuela de Verano en Física (ed. J. Récamier), Universidad Autónoma del Estado de Morelos, (1995).

2. H. Saint–Martin, J. Hernández–Cobos, I. Ortega–Blake, *Las Simulaciones Numéricas de los Líquidos*, Memorias de la VI Escuela de Verano en Física (ed. J. Récamier), Universidad Autónoma del Estado de Morelos, (1997).

3. H. Saint-Martin, *La Biofísica Molecular Computacional*, Memorias de la XVI Escuela de Verano en Física (eds. R. Pérez, J. Récamier, M. Torres), Instituto de Ciencias Físicas, UNAM (2008).
4. H. Saint-Martin *Las Simulaciones Numéricas de Sistemas Moleculares*, Memorias de la XVII Escuela de Verano en Física (eds. R. Jáuregui, J. Récamier, M. Torres), Instituto de Ciencias Físicas, UNAM (2009).
5. J. I. Amaro-Estrada, C. I. León-Pimentel, A. Ramírez-Solís, H. Saint-Martin, *Enfoque molecular del envenenamiento por plomo*, *Inventio* pp. 31-33, 2016.

## B. Pláticas invitadas

1. *Numerical Simulations of Biological Solutes made with Refined Potentials*, CAM '94, Septiembre de 1994, Cancún, Quintana Roo, México.
2. *El Uso de Métodos Teóricos para Estudiar Reacciones Bioquímicas*, Escuela de Verano La Visión Molecular de la Materia, Agosto de 1995, Cuernavaca, Morelos.
3. *Las Simulaciones Numéricas de los Líquidos y la Descripción de los Fenómenos Bioquímicos*, 19 de septiembre de 1995, en el Ciclo de Conferencias de Otoño '95 de la Sociedad de Alumnos de Ingeniería Física de la Universidad Iberoamericana, México, D. F.
4. *Las Simulaciones Numéricas de los Líquidos: Un Método para el Estudio de los Fenómenos Bioquímicos*, 22 de septiembre, en la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas de la Universidad Autónoma de Puebla.
5. *Following the path of experimental data from computational biophysics to nanotechnology*, September 11, 2007, Third Mexican Meeting on Mathematical and Experimental Physics, México, D. F.
6. *Determination of ion selectivity from the coordination properties of ions*, 9 de octubre de 2007. Pan American Workshop on Molecular and Materials Sciences, Cuernavaca, Morelos.
7. *El presente y el posible futuro del modelado de las moléculas de agua*, 11/12/2009. Primer Simposio sobre Simulación Molecular, desde fluidos simples hasta proteínas. México, D. F.
8. *Using Molecular Dynamics to Study Phase Equilibrium with Direct Coexistence Methods*, charla invitada en el 7th Meeting on Molecular Simulation, México, D. F., 8/12/2015
9. *El estudio de la coexistencia de fases por medio de simulaciones numéricas (métodos directos)*, en el 1er Congreso Latinoamericano de Química, Física y Biología Computacionales, del 3 al 7 de octubre en la Universidad Católica Santa María de Arequipa, Perú, 2016. (<https://www.ucsm.edu.pe/icongresobfqcomputacional/>)
10. *Modelado y simulación de sistemas moleculares; desde cúmulos pequeños hasta fases condensadas*. Seminario impartido el 28 de noviembre de 2017 en el Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos de la UNLP y el CONICET, La Plata, Argentina.

11. *Modelado y simulación de sistemas moleculares; desde cúmulos pequeños hasta fases condensadas*. Charla invitada al 2o Congreso Latinoamericano de Física, Química y Biología Computacionales, del 22 al 24 de noviembre de 2017 en la Universidad Católica Santa María de Arequipa, Arequipa, Perú.

12. *Modelado y simulación de sistemas moleculares; desde cúmulos pequeños hasta fases condensadas*. Departamento de Ingeniería Química del Instituto Tecnológico Nacional de México en Celaya, 18 de mayo de 2018.

13. *Estudios teóricos de metales y metaloides contaminantes de agua, Charla invitada al 1<sup>er</sup> Congreso Internacional y 3<sup>er</sup> Congreso Latinoamericano de Física, Química y Biología Computacionales, 20 de enero de 2020 en la Universidad Católica Santa María de Arequipa, Arequipa, Perú.*

14. *Modelado y simulación de sistemas moleculares, desde cúmulos pequeños hasta fases condensadas*, videoconferencia en el C. U. C. E. I. de la Universidad de Guadalajara, 4 de diciembre de 2020.

15. *Análisis dinámico y estructural de un modelo de membrana*, videoconferencia en la Universidad Católica Santa María de Arequipa, Arequipa, Perú, 15 de diciembre de 2020.

### **C. Pláticas de divulgación**

1. *Cómo moja el agua*, en la preparatoria del Colegio Williams de Cuernavaca, dentro del programa de divulgación de la Academia de la Investigación Científica, A. C., Junio de 1994.

2. *La Investigación Científica en el Laboratorio de Cuernavaca*, en el Laboratorio de Cuernavaca del IFUNAM, dentro del programa El Bachillerato es la Cantera de la Investigación, de CTIC, UNAM, Agosto de 1994.

3. *El Doctorado en Ciencias de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos*, 20 de julio de 1995, para el Sector Morelos de la Asociación Farmacéutica Mexicana, en Cuernavaca, Morelos.

4. *Física Bioquímica por Computadora*, 8 de diciembre de 1995, durante la semana de Química en la F. C. Q. I. de la UAEM.

5. *Videojuegos moleculares*, plática de divulgación impartida en la XI Jornada estatal de ciencia, tecnología e innovación, Morelos 2107, el 23 de octubre.

### **D. Seminarios institucionales**

1. *The Role of Hydration in the Pyrophosphate Hydrolysis Reaction. A Monte Carlo Study with Polarizable Potentials*. 6 de mayo de 1993, Departamento de Química Cuántica, Universidad de Varsovia, Polonia.

2. *Polarizability in a Molecular Model for Numerical Simulations. The Water – Water Interaction*. 29 de Septiembre de 1993, en la reunión anual de BIOMOS, Burg Arras, Alemania.

3. *Un Modelo Molecular Polarizable para Simulaciones Numéricas, Basado en Propiedades de la Molécula Aislada. La Interacción Agua – Agua*. 11 de Noviembre de 1993, Laboratorio de Cuernavaca del IFUNAM, Cuernavaca, Morelos, México.

4. *A Molecular Model for Numerical Simulations of Liquids, Based on Single Molecule Properties. How Far Can We Get?*. 28 de Febrero de 1994, Chemistry Department, University of Arizona, E. U. A.
5. *Many-body Nonadditive Effects in the Hydration of Phosphates*. 6 de Mayo de 1994, Department of Biophysical Chemistry, Rijksuniversiteit Groningen, Neerlanda.
6. *Un Modelo Polarizable para Simulaciones Numéricas: El SMMS*. 24 de Mayo de 1995, Departamento de Química Física, Universidad de Murcia, España.
7. *A Polarizable Model for Numerical Simulations: The SMMS*. 2 de junio de 1995, Department of Biophysical Chemistry, Rijksuniversiteit Groningen, Neerlanda.
8. *El modelado de moléculas de agua. De la molécula aislada a las fases condensadas*. 20 de julio de 2000, Centro de Ciencias Físicas, UNAM.
9. *El modelado de moléculas de agua. De la molécula aislada a las fases condensadas*. 18 de septiembre de 2000, Departamento de Física, CINVESTAV-IPN.
10. *La inevitable levedad del protón: un estudio sobre los efectos que la deslocalización produce en la estructura y en la termodinámica de los líquidos de moléculas ligadas por puentes de hidrógeno*. 1 de octubre de 2003, Centro de Ciencias Físicas, UNAM.
11. *El uso de modelos moleculares complejos en las simulaciones numéricas de disoluciones acuosas*. 15 de noviembre de 2006, Centro de Ciencias Químicas, UAEMor.
12. *Determinación de la selectividad iónica a partir de las propiedades de coordinación de los iones*. 18 de septiembre de 2007, IPICYT, San Luis Potosí.
13. *La hidratación de los iones y las bases moleculares de la selectividad*,
  - (a) Universidad Politécnica de Cartagena, 14/09/2009
  - (b) Universidad de Sevilla, 02/10/2009
  - (c) Universidad Complutense de Madrid, 16/10/2009
  - (d) Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, 04/11/2009
14. *La caracterización de procesos moleculares espontáneos por medio de simulaciones numéricas*, 11 de marzo de 2010, seminario interno del ICF UNAM.
15. *Modelado y simulación de sistemas moleculares, desde cúmulos pequeños hasta fases condensadas*. Coloquio semanal del ICF UNAM, el 28 de febrero de 2018.

#### **E. Presentaciones en congresos**

1. H. Saint–Martin and E. Lima–Lobato, *Modelado Geoelectrico Bidimensional por el Método de las Diferencias Finitas*. Congreso de la Unión Geofísica Mexicana, México, D. F. (1982).
2. I. Ortega–Blake and H. Saint–Martin, *Transporte de Nutrientes en Plantas, en Ausencia de Gravedad*. XXIX Congreso Nacional de Física, Colima, Colima (1986).

3. H. Saint–Martin and I. Ortega–Blake, *Modelo Analítico para Interacciones Moleculares, que puede Incluir No Aditividad*. XXIX Congreso Nacional de Física, Colima, Colima (1986).
4. H. Saint–Martin and I. Ortega–Blake, *Un Potencial Analítico para simulaciones por Monte Carlo de Agua Líquida*. XXX Congreso Nacional de Física, Mérida, Yucatán (1987).
5. H. Saint–Martin and I. Ortega–Blake, *Cálculos Moleculares de la Reacción de Hidrólisis del Pirofosfato*. VI Reunión de Bioenergética y Biomembranas, Taxco, Guerrero (1989).
6. H. Saint–Martin and I. Ortega–Blake, *La Reacción de Hidrólisis del Pirofosfato en la Fase Gaseosa*. XVIII Congreso Nacional de Bioquímica, San Luis Potosí, S. L. P. (1990).
7. H. Saint–Martin and I. Ortega–Blake, *La Estructura Molecular del Agua en el Interior de las Micelas Invertidas*. XVIII Congreso Nacional de Bioquímica, San Luis Potosí, S. L. P. (1990).
8. H. Saint–Martin and I. Ortega–Blake, *The Microscopic Structure and Dynamics of Water at a Surface*. Symposium on Biomolecules in Organic Solvents, Taxco, Guerrero (1992).
9. H. Saint–Martin, I. Ortega–Blake, A. Leś and L. Adamowicz, *Numerical Simulations of the Pyrophosphate Hydrolysis Reaction in Aqueous Solution*. Symposium on Biomolecules in Organic Solvents, Taxco, Guerrero (1992).
10. H. Saint–Martin and I. Ortega–Blake, *Water Structure at the Lipid – Water Interphase*. ASBMB and Biophysical Society Joint Meeting, Houston, Texas (1992).
11. H. Saint–Martin y H. J. C. Berendsen, *A Polarizable Model for Numerical Simulations. The Water – Water Interaction*. 11th. International Biophysics Congress, IUPAB, 25 – 30 de Julio, 1993, Budapest, Hungría.
12. I. Ortega-Blake, N. Pastor, H. Saint-Martin y J. Hernández-Cobos, *Simulación de agua líquida utilizando un potencial refinado*, Congreso Nacional de Física, SMF, Octubre, 1993, Acapulco, Guerrero, México.
13. H. Saint-Martin, I. Ortega-Blake, A. Leś y L. Adamowicz, *Many–body nonadditive effects on the hydration of phosphates*, CAM '94, Septiembre de 1994, Cancún, Quintana Roo, México.
14. H. Saint-Martin, I. Ortega-Blake, A. Leś y L. Adamowicz, *An Ab Initio Study of the Combined Role of  $Mg^{2+}$  and Water on the Hydrolysis of Pyrophosphate*, Sanibel Simposium, del 25 de febrero al 4 de marzo de 1995, St. Augustine, Florida, U. S. A.
15. L. E. Ruiz-Vicent, H. Saint Martin e I. Ortega Blake, *La Hidratación Sucesiva del Pirofosfato*. XXXVIII Congreso Nacional de Física, del 16 al 20 de octubre de 1995, Zacatecas, Zacatecas, México.
16. H. Saint-Martin e I. Ortega-Blake, *The Microscopic Structure of Water Confined between Dielectric Walls*. 12th. International Biophysics Congress, IUPAB, 11 – 16 de Agosto, 1996, Amsterdam, Neerlanda.
17. B. Venegas Cotero, S. Rebolledo, I. Ortega-Blake, H. Saint-Martin, *Membrane structure effects on the amphotericine B ionic channel*. 12th. International Biophysics Congress, IUPAB, 11 – 16 de Agosto, 1996, Amsterdam, Neerlanda.

18. H. Saint-Martin, H. J. C. Berendsen, *A Simple Polarizable Model for Water*. 25th International Conference on Solution Chemistry, IUPAC, 26 – 31 de Agosto, 1997, Vichy, Francia.
19. I. Ortega Blake, J. Hernandez Cobos, M. I. Bernal Uruchurtu, H. Saint-Martin, *The Effect of Potential Refinement to Include Further Molecular Detail in the Numerical Simulations of Liquid Water*. 25th International Conference on Solution Chemistry, IUPAC, 26 – 31 de Agosto, 1997, Vichy, Francia.
20. L. E. Ruiz-Vicent, H. Saint-Martin, I. Ortega Blake, *A Theoretical Study of the Hydrolysis of Mg-PPi Complexes, in Presence of Water Molecules*. X Congreso de Bioenergética y Biomembranas, SMB, 9 – 13 de Noviembre, 1997, Toluca, Edo. Mex.
21. M. Carrillo Tripp, H. Saint-Martin, I. Ortega Blake, J. Hernández Cobos, *The Molecular Ordering Induced in Liquid Water by its Confinement between Dielectric Walls*. International Materials Research Congress, 31 de Agosto – 3 de Septiembre de 1998, CanCún, Quintana Roo.
22. I. Ortega Blake, H. Saint-Martin, J. Hernández Cobos, M. I. Bernal Uruchurtu, *Los Efectos del Refinamiento de un Potencial Ab Initio en la Descripción del Agua Líquida*. XXIV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL), 20 – 25 de Septiembre de 1998, Puebla, Puebla.
23. H. Saint-Martin, I. Ortega Blake, L. Adamowicz, W. J. McCarthy, *Hacia la Comprensión de la Hidrólisis del Enlace Fosfoanhidrido*. XXIV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL), 20 – 25 de Septiembre de 1998, Puebla, Puebla.
24. M. Carrillo Tripp, H. Saint-Martin, I. Ortega Blake, J. Hernández Cobos, *El Ordenamiento Molecular Inducido en el Agua Líquida por el Confinamiento entre Paredes Dieléctricas*. XXIV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, 20 – 25 de Septiembre de 1998, Puebla, Puebla.
25. H. Saint-Martin, *An Ab Initio Study of the Hydrolysis Reactions of Neutral and Anionic Mg-Pyrophosphate Complexes in the Gas Phase*. US-Latin American-Canada-Caribbean Workshop on Molecular and Materials Sciences: Theoretical and Computational Aspects, 24 – 26 de Febrero, 1999, Cuernavaca, Morelos.
26. I. Ortega-Blake, H. Saint-Martin, J. Hernández-Cobos, M. I. Bernal-Uruchurtu, *Numerical simulations of supercritical water with refined ab initio potentials*. XIII International Conference on the Properties of Water and Steam, 12 – 16 de septiembre, 1999, Toronto, Canadá.
27. M. Carrillo Tripp, H. Saint-Martin, I. Ortega-Blake, *A highly refined study of the hydration of  $K^+$  and  $Na^+$  and its implication on the selectivity models of ion channels*. 45th Annual Meeting of the Biophysical Society, Boston, MA, USA, Feb 2001.
28. J. Hernández-Cobos, H. Saint-Martin, I. Ortega-Blake, A. D. Mackie, L. F. Vega, *Liquid-vapor equilibrium using ab initio based models*. ESPA2002, Sevilla, España, Septiembre 2002.

29. J. Hernández-Cobos, H. Saint-Martin, I. Ortega-Blake, *Water potentials based on a single potential energy surface and different molecular degrees of freedom*. ESPA2002, Sevilla, España, Septiembre 2002.
30. H. Saint-Martin, B. Hess, H. J. C. Berendsen, *Flexible constraints in Monte Carlo simulations of liquid water and ice Ih*. ESPA2002, Sevilla, España, Septiembre 2002.
31. A. Villa, H. Saint-Martin, B. Hess, A. E. Mark, *A comparative molecular dynamics study of the hydration of lanthanide (III) cations using ab initio based flexible and polarizable model potentials*. 28th International Conference on Solution Chemistry, Debrecen, Hungría, Agosto 23 a 28, 2003.
32. B. Hess, A. Villa, H. Saint-Martin, *A refined model for small polar molecules*. 29th International Conference on Solution Chemistry, Portoroz, Eslovenia, Agosto 20 a 25, 2005.
33. M. Carrillo-Tripp, H. Saint-Martin, J. Hernández-Cobos, I. Ortega-Blake, *Ion selectivity*. IUPAB, Montpellier, Francia, Agosto 26 a Septiembre 1, 2005.
34. M. Carrillo-Tripp, H. Saint-Martin, J. Hernández-Cobos, I. Ortega-Blake, *Ion selectivity*. ACS, Washington, D. C., E. U. A., Septiembre 1 a 5, 2005.
35. H. Saint-Martin, I. Ortega-Blake, J. Hernández-Cobos, M. L. SanRomán, M. C. Vargas, *Determination of ion selectivity from the coordination properties of ions*, 234th ACS National Meeting, Boston, MA, E. U. A., 24 a 28 de agosto de 2007.
36. R. A. Hernández López, O. González Amezcua, A. H. De Vries, H. Saint-Martin, I. Ortega Blake, *Estudio teórico de la agregación de anfotericina-B in vacuo, en DMSO y en agua*, XXVII Congreso de la Sociedad Mexicana de Bioquímica, noviembre de 2008.
37. R. A. Hernández López, O. González Amezcua, A. H. De Vries, H. Saint-Martin, I. Ortega Blake, J. *Aggregation of polyene antibiotics in aqueous solution. An MD study*. Biophysical Society 53rd Annual Meeting, Boston, MA, E. U. A. 27/02/2009 a 04/03/2009.
38. G. Bravo Pérez, H. Saint-Martin, *Estudio teórico de la hidratación del metano*, VIII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Colima, Col., 12/11/2009 a 14/11/2009.
39. B. Rojas, H. Saint-Martin, *Estudio teórico del intercambio de moléculas de agua en los lantánidos hidratados Ln(III)*, VIII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Colima, Col., 12/11/2009 a 14/11/2009.
40. M. Carrillo Tripp, A. H. De Vries, R. A. Hernández López, C. Vargas, H. Saint-Martin, I. Ortega Blake, *Molecular action mechanism of amphotericin-B and structural analogues on biological membranes*. Biophysical Society 54th Annual Meeting, San Francisco, CA, E. U. A. 20/02/2010 a 24/02/2010.
41. G. Bravo Pérez, H. Saint-Martin, *La importancia de las caras pentagonales en los clatratos de metano, Cálculos ab initio y simulaciones numéricas*. IX Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Pachuca, Hgo., 11/11/2010 a 13/11/2010.



42. G. Bravo Pérez, H. Saint-Martin, *Theoretical study of methane-clathrate formation at the liquid-solid interphase*. PACIFICHEM 2010, 15/12/2010 a 20/12/2010, Honolulu HI, E. U. A.
43. C. Millán Pacheco, H. Saint/Martin, A. H. de Vries, I. Ortega Blake, *Networking of sterols in lipid bilayers*, 8th European Biophysics Congress, Budapest, Hungría, 23 a 27 de agosto de 2011.
44. G. Bravo-Pérez y H. Saint-Martin, *Un estudio teórico del equilibrio de los clatratos de metano*. X Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, en Pachuca, Hidalgo, del 10 al 12 de noviembre de 2011.
45. D. P. Luis Jiménez y H. Saint-Martin, *Coexistencia Sólido-Líquido-Vapor de hidratos de metano: Simulación molecular*. X Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, en Pachuca, Hidalgo, del 10 al 12 de noviembre de 2011.
46. F. N. Mendoza y H. Saint-Martin, *Simulación numérica de disoluciones de cationes alcalinos*. X Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, en Pachuca, Hidalgo, del 10 al 12 de noviembre de 2011.
47. F. N. Mendoza y H. Saint-Martin, *Simulación numérica de disoluciones de cationes alcalinos*. 3rd Meeting on Molecular Simulations, en la UAM-Iztapalapa, del 7 al 9 de diciembre de 2011.
48. D. P. Luis Jiménez y H. Saint-Martin, *Coexistencia Sólido-Líquido-Vapor de hidratos de metano: Simulación molecular*. 3rd Meeting on Molecular Simulations, en la UAM-Iztapalapa, del 7 al 9 de diciembre de 2011.
49. G. Amaya, R. Morales-Nava, C. Millán-Pacheco, H. Saint-Martin, A. H. De Vries, I. Ortega-Blake, *A Multidisciplinary Approach for Understanding the Mode of Action and for Design of Polyenes*. 17th International Biophysics Congress, en Beijing, China, del 30 de octubre al 3 de noviembre de 2011.
50. F. N. Mendoza, B. Rojas Mayoral, H. Saint-Martin, *Simulating diluted aqueous solutions of cations with sophisticated analytical model potentials*. 243rd ACS National Meeting and Exposition, San Diego, California, EUA, 25 a 29 de marzo de 2012.
51. B. Rojas Mayoral, H. Saint-Martin, *Cálculos cuánticos de la hidratación de lantánidos trivalentes*. LV Congreso Nacional de Física, Morelia, 8 a 12 de octubre de 2012.
52. B. Rojas Mayoral, H. Saint-Martin, *Cálculos cuánticos de la hidratación de lantánidos trivalentes*. XI Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Toluca, 8 a 10 de noviembre de 2012.
53. G. Bravo Pérez, H. Saint-Martin, *Estudio del confinamiento de la molécula de CO<sub>2</sub> en cajas de agua mediante cálculos cuánticos con efectos de dispersión*. XI Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Toluca, 8 a 10 de noviembre de 2012.
54. C. León Pimentel, H. Saint-Martin, *Estudio Teórico de la Hidratación de Pb(II)*, póster en la XIV Reunión Mexicana de Físico-Química Teórica, Tonalá, Jalisco, 18 a 21 de noviembre, 2015.
55. M. Martínez Jiménez, H. Saint-Martin, *Desarrollo de un modelo polarizable para alcoholes primarios*, póster en la XIV Reunión Mexicana de Físico-Química Teórica, Tonalá, Jalisco, 18 a 21 de noviembre, 2015.

56. M. Martínez Jiménez, *Desarrollo de un modelo polarizable para alcoholes primarios*, póster en la 7th Meeting on Molecular Simulation, México, D. F., del 7 al 9 de diciembre, 2015.
57. D. Porfirio Luis, E. C. Herrera Hernández, H. Saint-Martin, *Un estudio teórico de la disociación del hidrato de metano sI, inducida por un campo eléctrico externo*, póster en la XIV Reunión Mexicana de Físico-Química Teórica, Tonalá, Jalisco, 18 a 21 de noviembre, 2015.
58. M. Martínez Jiménez, H. Saint-Martin, póster "*Mezclas agua-metanol: un estudio sistemático de la fase líquida y de la interfaz con el hielo Ih*", XV Reunión Mexicana de Físico Química Teórica, 17 a 19 de noviembre, Mérida, Yucatán, 2016.
59. I. E. Romero, C. I. León-Pimentel, J. I. Amaro-Estrada, H. Saint-Martin, A. Ramírez-Solís, "*Estudios teóricos de la solvatación acuosa del catión Pb(2+) con modelos de cúmulos*", presentación oral (C. I. L. P.) en la XV Reunión Mexicana de Físico Química Teórica, del 17 al 19 de noviembre en Mérida, Yucatán, 2016.
60. C. I. León-Pimentel, J. I. Amaro-Estrada, H. Saint-Martin, A. Ramírez-Solís, póster "*Estudio BOMD de la transferencia de protón en micro-cúmulos [Pb(H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>]<sup>2+</sup>*" en la XV Reunión Mexicana de Físico Química Teórica, del 17 al 19 de noviembre en Mérida, Yucatán, 2016.
61. M. Martínez-Jiménez, H. Saint-Martin, póster "*Methanol-water mixtures: a systematic study of liquid phase using nonpolarizable models*" en el 8th Meeting on Molecular Simulation, del 7 al 9 de diciembre de 2016, en la Ciudad de México.
62. Manuel Martínez Jiménez y Humberto Saint-Martin, *Un modelo molecular de 4 sitios para la simulación de metanol líquido y las mezclas agua-metanol: TIP4P/MeOH*, póster presentado por M. Martínez en la XVI Reunión Mexicana de Físico Química Teórica, 16 a 18 de noviembre de 2017, Puebla, Puebla.
63. César Iván León Pimentel, J. I. Amaro Estrada, H. Saint-Martin, A. Ramírez Solís, J. Hernández, *Estudio BOMD de las propiedades de coordinación y espectroscópicas de cúmulos microhidratados de Ca(II) y Mg(II)*, póster presentado por C. I. León Pimentel en la XVI Reunión Mexicana de Físico Química Teórica, 16 a 18 de noviembre de 2017, Puebla, Puebla.
64. Manuel Martínez Jiménez y Humberto Saint-Martin, *A four-site molecular model for simulations of liquid methanol and water-methanol mixtures: TIP4P/MeOH*, póster presentado por Manuel Martínez Jiménez en 9th Meeting on Molecular Simulation, 6 a 8 de diciembre de 2017, CdMx.
65. César Iván León Pimentel, J. I. Amaro Estrada, H. Saint-Martin, A. Ramírez Solís, J. Hernández, *Estudio BOMD de las propiedades de coordinación y espectroscópicas de cúmulos microhidratados de Ca(II) y Mg(II)*, póster presentado por C. I. León Pimentel en 9th Meeting on Molecular Simulations, 6 a 8 de diciembre de 2017, CdMx. **Ganador de un premio por parte de JCTC, como uno de los tres mejores pósteres.**
66. J. I. Amaro-Estrada, H. Saint-Martin, J. Hernández, L. Maron, A. Ramírez-Solís, *Estudios teóricos de la solvatación de las formas más abundantes de mercurio en ambientes acuosos*, póster presentado por J. I. Amaro-Estrada en la 3a. Reunión Construyendo el Futuro-Encuentros de Ciencia, del 21 al 24 de noviembre de 2017, en la ciudad de Morelia, Michoacán. **Sólo por invitación.**

67. J. I. Amaro-Estrada, H. Saint-Martin, J. Hernández, L. Maron, A. Ramírez-Solís, *Estudios teóricos de la solvatación de las formas más abundantes de mercurio en ambientes acuosos*, póster presentado por H. Saint-Martin en 9th Meeting on Molecular Simulations, diciembre de 2017.

68. M. Martínez Jiménez, H. Saint-Martin, póster Simulaciones de la fase líquida y la coexistencia líquido-vapor de las disoluciones acuosas de etanol t 1-propanol, presentado en la XVII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, en ITESM Monterrey, del 22 al 24 de noviembre de 2018.

69. C. I. León Pimentel, A. Ramírez Solís, H. Saint-Martin, Charla *Estudio de propiedades de hidratación de cationes y ácidos mediante dinámica molecular de Born-Oppenheimer*, impartida por C. I. León Pimentel en la XVII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, ITESM Monterrey, del 22 al 24 de noviembre de 2018.

70. M. Martínez Jiménez, H. Saint-Martin, Póster *Numerical simulations of the liquid phase and the liquid-vapor coexistence of ethanol – water and 1 – propanol – water mixtures*, 10th Meeting on Molecular Simulation, en Cuernavaca, del 8 al 10 de noviembre de 2018.

71. C. I. León Pimentel, A. Ramírez Solís, H. Saint-Martin, Charla *Aqueous solvation of divalent cations and acids through Born-Oppenheimer molecular dynamics simulations and polarizable force fields*, impartida por C. I. León Pimentel en 10th Meeting on Molecular Simulation, en Cuernavaca, del 8 al 10 de noviembre de 2018.

72. H. Saint-Martin, charla *A theoretical approach to the determination of ion selectivity from the coordination properties of ions*, 4th Annual World Congress on Smart Materials, efectuado en Osaka, Japón, del 6 al 9 de marzo de 2018.

73. C. I. León Pimentel, M. Martínez Jiménez, H. Saint-Martin, *Study of the Elusive Hydration of Pb(II) from the Gas Phase to the Infinitely Diluted Aqueous Solution*, en la reunión de otoño de la American Chemical Society, efectuada en San Diego, CA, EE. UU., del 25 al 29 de agosto de 2019.

74. C. I. León Pimentel, J. Hernández Cobos, A. Ramírez Solís, H. Saint-Martin, *Proton hydration in gas phase clusters. A Born-Oppenheimer Molecular Dynamics hybrid DFT study of HCl in a water nanodroplet*, en la reunión de otoño de la American Chemical Society, efectuada en San Diego, CA, EE. UU., del 25 al 29 de agosto de 2019.

## F. Organización de Talleres

11. **Organizador principal** del 10º Taller de Dinámica Molecular efectuado en el Hotel Puerta Paraíso en Cuernavaca, del 25 al 29 de julio de 2022. El evento resultó autofinanciable y generó recursos propios. Se realizó en formato virtual completamente. Además de provenientes de muy diversas instituciones de México, se contó con la participación de instituciones de varios países latinoamericanos: Chile, Argentina, Perú, Colombia, Ecuador, Panamá, Costa Rica y Guatemala.  
[https://www.fis.unam.mx/taller\\_dm.php](https://www.fis.unam.mx/taller_dm.php)

10. **Organizador principal** del 10º Taller de Dinámica Molecular efectuado en el Hotel Puerta Paraíso en Cuernavaca, del 26 al 30 de julio de 2021. El evento resultó autofinanciable y generó recursos propios. Se realizó en formato virtual completamente.  
[https://www.fis.unam.mx/taller\\_dm.php](https://www.fis.unam.mx/taller_dm.php)

9. **Organizador principal** del 9º Taller de Dinámica Molecular efectuado en el Hotel Puerta Paraíso en Cuernavaca, del 29 de julio al 2 de agosto de 2019. Además del financiamiento por parte del ICF, el evento resultó autofinanciable y generó recursos propios.  
[https://www.fis.unam.mx/taller\\_dm.php](https://www.fis.unam.mx/taller_dm.php)
8. **Organizador principal** del 8º Taller de Dinámica Molecular efectuado en la Facultad de Farmacia de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos, del 6 al 10 de agosto de 2018. Con financiamiento del ICF y de CONACyT.  
<http://quimica.izt.uam.mx/8vo-taller-de-dinamica-molecular-cuernavaca-2018/>
7. **Organizador principal** del 7º Taller de Dinámica Molecular, efectuado del 31 de julio al 4 de agosto de 2017 en las instalaciones de la Facultad de Farmacia de la UAEM, con financiamiento por parte de CONACyT y del ICF, y apoyo de la SICyT del Estado de Morelos.  
<http://quimica.izt.uam.mx/7mo-taller-de-dinamica-molecular-cuernavaca-2017/>
6. **Organizador principal** del 6º Taller de Dinámica Molecular, efectuado del 25 al 29 de julio de 2016 en las instalaciones de la Facultad de Farmacia de la UAEM, con apoyo de la SICyT del Estado de Morelos y financiamiento del ICF.  
<http://quimica.izt.uam.mx/taller-de-dinamica-molecular-cuernavaca-2016/>
5. **Organizador principal** del 5º Taller de Dinámica Molecular, efectuado del 25 al 29 de julio de 2015 en las instalaciones del ICF y del CCG, con apoyo de la SICyT del Estado de Morelos y financiamiento del ICF. <http://quimica.izt.uam.mx/cuernavaca-2015/>
4. **Organizador principal** del 4º Taller de Dinámica Molecular, efectuado del 28 de julio al 1 de agosto de 2014 en las instalaciones de la FC-UAEM, del ICF y del CCG, con financiamiento de CONACyT y del ICF. <http://quimica.izt.uam.mx/cuernavaca-2014/>
3. Miembro del Comité Organizador del 3º Taller de Dinámica Molecular, efectuado en la Universidad de Guanajuato agosto de 2013. Organizadora principal: Dra. Ana Laura Benavides.
2. Miembro del Comité Organizador del 2º Taller de Dinámica Molecular, efectuado en la Universidad de Guanajuato del 20 a 24 de agosto de 2012. Organizadora principal: Dra. Ana Laura Benavides.
1. Miembro del Comité Organizador del 1º Taller de Dinámica Molecular, efectuado en la Universidad de Guanajuato del 25 al 29 de julio de 2011. Organizadora principal: Dra. Ana Laura Benavides.

## **IX. Participación institucional**

### **A. Cargos académico-administrativos**

1. Jefe de Sección Académica en la Subdependencia Laboratorio de Cuernavaca, del IFUNAM, Junio de 1994 a Septiembre de 1997.
2. Presidente de la Academia General de Física de la UAEM, Marzo de 2001 a Junio de 2003.
3. Secretario Académico de la Facultad de Ciencias de la UAEMor., de julio de 2007 a enero de 2008.
4. Vicepresidente del Colegio de Personal Académico 2007, 2008, 2014 hasta octubre de 2015.

5. Coordinador del área de Biofísica del Posgrado en Ciencias de la UAEMor., de julio de 2008 a enero de 2011.

### **B. Miembro de Comisiones**

1. Representante suplente del área de Biofísica y Ciencia de Materiales ante el Consejo Interno del ICF 2011, 2013, 2018, 2020, 2021.

2. Representante titular del área de Biofísica y Ciencia de Materiales ante el Consejo Interno del ICF 2012, 2015, 2016, 2019.

3. Representante de los Tutores del Instituto de Ciencias Físicas ante el Posgrado en Ciencias Físicas de la UNAM, desde enero de 2012 hasta marzo de 2017.

4. Representante suplente del ICF ante el CAACFMI desde 2012 hasta septiembre de 2016. Titular desde entonces.

5. Miembro de las brigadas de "combate contra incendios" y de "búsqueda y evacuación" del ICF desde 2012.

6. Miembro de la Comisión de Estudiantes del ICF desde 2017.

7. Miembro de la Comisión de Biblioteca del ICF desde 2019.

8. Miembro de la Comisión de Ética del ICF desde 2019.

9. Miembro de la Comisión Interna de Igualdad de Género del ICF a partir de febrero de 2021.

### **C. Arbitrajes**

1. Miembro de la Comisión Dictaminadora del Área de Ciencias Exactas e Ingeniería de la UAEM, a partir del 10 de octubre de 2011 y hasta el 9 de octubre de 2013.

En 2012:

1. ISRN Physical Chemistry
2. Chemosphere
3. Journal of Molecular Modeling
4. PLoS ONE
5. Revista Mexicana de Física
6. Revisor de proyectos enviados a CONACyT.

En 2014:

1. Physical Chemistry Chemical Physics
2. The Journal of Physical Chemistry B

En 2016:

1. Miembro del Jurado para el Reconocimiento al Mérito Estatal en Investigación, otorgado por la SICyT de Morelos.

2. Evaluador de proyectos para PAPIIT.

En 2017:

1. Miembro del Jurado para el Reconocimiento al Mérito Estatal en Investigación, otorgado por la SICyT de Morelos.

En 2018:

1. Realicé arbitrajes para dos proyectos de la ANR de Francia  
2. Arbitrajes para tres proyectos, dos revisiones de informes técnicos y una solicitud de año sabático para CONACyT  
3. Arbitraje de un artículo para J. Mol. Liq.  
4. Arbitraje de dos artículos para Physica A  
5. Miembro del Jurado para el Reconocimiento al Mérito Estatal en Investigación, otorgado por la SICyT de Morelos.

En 2019:

1. Árbitro para J. Mol. Liq.

En 2020:

1. Miembro de la Comisión de Evaluación para la convocatoria *Ciencia de Frontera 2019* de CONACyT.

#### **D. Información adicional**

Fui candidato a la Dirección del ICF en dos ocasiones: en 2014 formé parte del grupo de cinco aspirantes seleccionado por el Coordinador de la Investigación Científica para entrevistarse con el Rector, Dr. José Ramón Narro Robles. En 2018 estuve en la terna seleccionada por el Rector, Dr. Enrique Graue Wiechers para entrevistarse con la H. Junta de Gobierno. En este año 2022 nuevamente presenté mi candidatura.