

CURRICULUM VITAE

Nombre: Carlos Amador Bedolla

Nombramiento actual: Profesor Titular C T. C.

Lugar de adscripción: Departamento de Física y Química Teórica. Facultad de Química. Universidad Nacional Autónoma de México.

Teléfono oficina: 55 5616-2604

Correo electrónico: carlos.amador@unam.mx

Formación

Licenciatura, Químico, Facultad de Química, UNAM (1977-1982)

Tesis: Densidad Local de Susceptibilidad de Espín (12.05.1983)

Maestría en Ciencias Químicas (Fisicoquímica), Facultad de Química, UNAM (1982-1984)

Tesis: Estabilidad Magnética Local. Aplicación al Hierro Ferromagnético (10.10.1984)

Doctorado en Ciencias Químicas (Fisicoquímica), Facultad de Química, UNAM (1986-1989)

Tesis: Níquel-platino: tientos y aproximaciones (24.11.1989)

Posdoctorado. Research Associate. Department of Physics. Case Western Reserve University, Cleveland, Ohio, USA. Julio 1990 a julio 1992

Posdoctorado. Staff Scientist. Department of Materials Science. University of California, Berkeley, California, USA. Febrero 1994 a enero de 1995

Sabático. Visiting Scholar. Department of Chemistry, University of California, Berkeley. Agosto 2005 a febrero 2006, mayo 2006

Sabático. Visiting Scientist. Department of Chemistry and Chemical Biology, Harvard University. Febrero a agosto de 2007

Sabático. Visiting Scientist. Department of Chemistry and Chemical Biology, Harvard University. Febrero a agosto de 2010

Sabático. Visiting Scientist. Department of Chemistry and Chemical Biology, Harvard University. Julio 2013 a junio 2014

Docencia

1. Cálculo II. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 23-2
2. Cálculo I. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 23-1
3. Cálculo II. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 22-2
4. Cálculo I. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 22-1
5. Química Cuántica II. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 21-2
6. Química Cuántica I. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 21-1
7. Química Cuántica II. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 20-2
8. Temas Selectos de Matemáticas I. Titular. Programa de Maestría y Doctorado en Ciencias Químicas. Maestría. 20-1
9. Química Cuántica I. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 19-2
10. Cálculo II. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 19-2
11. Cálculo I. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 19-1
12. Química Cuántica I. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 18-2
13. Termodinámica Química I. Programa de Maestría y Doctorado en Ciencias Químicas. Maestría. 18-2
14. Termodinámica Química II. Programa de Maestría y Doctorado en Ciencias Químicas. Maestría. 18-2
15. Química Cuántica II. Titular. Facultad de Química, Licenciatura. 18-1
16. Fundamentos de Espectroscopía. Facultad de Química. Licenciatura. 17-2

17. Herramientas de Modelación Molecular. Titular (con José Luis Medina Franco). Programa de Maestría y Doctorado en Ciencias Químicas. Maestría. 17-2
18. Temas Selectos de Matemáticas I. Titular. Programa de Maestría y Doctorado en Ciencias Químicas. Maestría. 17-2
19. Química Cuántica I. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 17-1
20. Química Cuántica II. Titular. Facultad de Química, Licenciatura. 16-2
21. Teoría de Funcionales de la Densidad. Titular. Programa de Maestría y Doctorado en Ciencias Químicas. Maestría. 16-1
22. Seminario: Transferencia de Carga en Compuestos Orgánicos. Titular. Programa de Maestría y Doctorado en Ciencias Químicas. Doctorado. 15-2
23. Estructura de la Materia. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 15-2
24. Química Cuántica II. Titular. Facultad de Química, Licenciatura. 15-2
25. Regiones Socioeconómicas. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 15-1
26. Química Cuántica I. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 15-1
27. Physical Sciences I. Titular (con Alán Aspuru-Guzik). Harvard University. Licenciatura. 14-2
28. Química Cuántica I. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 13-2
29. Seminario de Investigación. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 13-2
30. Regiones Socioeconómicas. Titular (con José Narro Robles y Hortensia Santiago Frago). Facultad de Química. Licenciatura. 13-2
31. Temas Selectos de Matemáticas I. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 13-1
32. Fundamentos de Espectroscopía. Facultad de Química. Licenciatura. 13-1
33. Seminario de Investigación. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 13-1
34. Regiones Socioeconómicas. Titular (con José Narro Robles y Hortensia Santiago Frago). Facultad de Química. Licenciatura. 12-2
35. Fundamentos de Espectroscopía. Facultad de Química. Licenciatura. 12-2
36. Seminario de Investigación. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 12-2
37. Ciencia y Sociedad. Titular (con José Narro Robles y Hortensia Santiago Frago). Facultad de Química. Licenciatura. 12-1
38. Fundamentos de Espectroscopía. Facultad de Química. Licenciatura. 12-1
39. Seminario de Investigación. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 12-1
40. Física I. Curso extracurricular intersemestral (20 horas). Facultad de Química, enero 2011
41. Química Cuántica II. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 11-1
42. Métodos de Monte Carlo en Simulaciones Clásicas y Cuánticas. Titular. Posgrado Universitario en Ciencias Químicas. Posgrado. 10-1
43. Magnetismo Molecular. Titular. Posgrado Universitario en Ciencias Químicas. Posgrado. 10-1
44. Química Cuántica II. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 10-1
45. Química Cuántica I. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 09-2
46. Química Cuántica II. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 09-1
47. Química Cuántica I. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 08-2
48. Estructura de la Materia. Titular. Facultad de Química. Licenciatura 08-2
49. Química Cuántica I. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 08-1
50. Equilibrio y Cinética. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 07-1
51. Temas Selectos de Matemáticas I. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 07-1
52. Física I. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 07-1
53. Unión Química y Fundamentos de Espectroscopía. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 05-2
54. Temas Selectos de Matemáticas I. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 05-2
55. Mecánica Cuántica. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 05-1
56. Temas Selectos de Matemáticas I. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 05-1
57. Temas Selectos de Matemáticas II. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 04-2
58. Unión Química y Fundamentos de Espectroscopía. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 04-2
59. Cálculo de una variable. Curso extracurricular intersemestral (20 horas). Facultad de Química, enero 2004.
60. Temas Selectos de Matemáticas I. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 04-1

61. Trabajo de Investigación. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 04-1
62. Cálculo de una variable. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 04-1
63. Cálculo de varias variables. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 03-2
64. Unión Química y Fundamentos de Espectroscopía. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 03-1
65. Cálculo de una variable. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 03-1
66. Cinemática y Dinámica. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 02-2
67. Cálculo de una variable. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 02-1
68. Temas Selectos de Matemáticas II. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 02-1
69. Cálculo de una variable. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 01-2
70. Temas Selectos de Matemáticas I. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 01-2
71. Mecánica Cuántica. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 01-1
72. Unión Química y Fundamentos de Espectroscopía. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 01-1
73. Estructura de la Materia. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 01-1
74. Cinemática y Dinámica. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 01-1
75. Cálculo de una variable. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 01-1
76. Laboratorio de Cinemática y Dinámica. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 00-2
77. Termodinámica. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 00-2
78. Cinemática y Dinámica. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 00-2
79. Electromagnetismo. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 00-1
80. Unión Química y Fundamentos de Espectroscopía. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 00-1
81. Cinemática y Dinámica. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 00-1
82. Estructura de la Materia. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 99-2
83. Unión Química y Fundamentos de Espectroscopía. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 99-1
84. Cinemática y Dinámica. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 99-1
85. Temas Selectos de Matemáticas I. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 99-1
86. Temas Selectos de Matemáticas II. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 98-2
87. Electromagnetismo. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 98-2
88. Temas Selectos de Química Inorgánica. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 98-1
89. Estructura de la Materia. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 98-1
90. Cinemática y Dinámica. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 98-1
91. Métodos Numéricos. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 97-2
92. Requisitos de Matemáticas. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 97-2
93. Electromagnetismo. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 97-2
94. Electromagnetismo. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 97-1
95. Temas Selectos de Matemáticas I. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 97-1
96. Temas Selectos de Matemáticas II. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 96-2
97. Diseño por Computación: Simulación. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 96-2
98. Electromagnetismo. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 96-2
99. Electromagnetismo. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 96-1
100. Temas Selectos de Matemáticas I. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 96-1
101. Fisicoquímica Avanzada II. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 95-2
102. Electromagnetismo. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 95-2
103. Seminario del Método Científico. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 94-1
104. Cinemática y Dinámica. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 94-1
105. Temas Selectos de Matemáticas I. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 94-1
106. Teoría del Estado Sólido. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 93-2
107. Cinemática y Dinámica. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 93-2
108. Temas Selectos de Matemáticas I. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 93-1
109. Electromagnetismo. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 93-1
110. Equilibrio Fisicoquímico. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 93-1
111. Requisitos de Fisicoquímica. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 90-1
112. Electromagnetismo. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 89-2
113. Estructura de la Materia. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 89-2

114. Cinemática y Dinámica. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 89-1
115. Química Inorgánica Avanzada I. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 89-1
116. Estructura de la Materia. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 88-2
117. Física IV. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 88-2
118. Temas Selectos de Matemáticas I. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 88-1
119. Química Inorgánica Avanzada I. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 88-1
120. Estructura de la Materia. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 87-2
121. Física IV. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 87-2
122. Química Inorgánica Avanzada I. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 87-1
123. Físicoquímica I. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 87-1
124. Físicoquímica III. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 86-2
125. Físicoquímica I. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 86-2
126. Química Inorgánica Avanzada I. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 86-1
127. Físicoquímica I. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 86-1
128. Física I. Titular. Facultad de Química. Licenciatura. 85-2
129. Requisitos de Físicoquímica. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 85-2
130. Requisitos de Físicoquímica. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 85-1
131. Requisitos de Físicoquímica. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 84-2
132. Físicoquímica III. Titular. Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán. Licenciatura. 84-2
133. Físicoquímica II. Titular. Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán. Licenciatura. 84-2
134. Físicoquímica VII. Titular. Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán. Licenciatura. 84-2
135. Requisitos de Físicoquímica. Titular. Facultad de Química. Posgrado. 84-1
136. Físicoquímica VII. Titular. Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán. Licenciatura. 84-1
137. Físicoquímica VII. Ayudante de Profesor. Facultad de Química. Licenciatura. 84-1
138. Físicoquímica I. Ayudante de Profesor. Facultad de Química. Licenciatura. 84-1
139. Físicoquímica VII. Ayudante de Profesor. Facultad de Química. Licenciatura. 83-2
140. Físicoquímica I. Ayudante de Profesor. Facultad de Química. Licenciatura. 83-2
141. Físicoquímica VII. Ayudante de Profesor. Facultad de Química. Licenciatura. 83-2
142. Físicoquímica I. Ayudante de Profesor. Facultad de Química. Licenciatura. 83-1
143. Físicoquímica I. Ayudante de Profesor. Facultad de Química. Licenciatura. 82-2

Tesis

1. Andrés Felipe Marmolejo Valencia. Doctorado en Ciencias Químicas, UNAM. Estudio estructural, morfológico y dinámico del ensamblaje molecular de la heterojunta donador/aceptor de electrones para el diseño de fotovoltaicos orgánicos. 21 de marzo de 2023. Aprobado.
2. Nancy Cihuapilli Barrueta Flores. Maestría en Ciencias Químicas. UNAM. *Predicción de las estructuras supramoleculares en la interfase de OPVs: moléculas orgánicas pequeñas con PCBM*. 16 de octubre de 2019. Aprobada con mención honorífica.
3. Gerardo Álvarez Álvarez. Maestría en Ciencias Químicas. UNAM. *Geometría de estados excitados en confórmeros OPV*. 11 de mayo de 2018. Aprobado.
4. Martha Magdalena Flores Leonar. Doctorado en Ciencias Químicas, UNAM. *Estudio Teórico-Experimental del Fenómeno de Entrecruzamiento de Espin en Compuestos de Fe(III) con el Ligante BZTPEN*. 1 de febrero de 2018. Aprobada con mención honorífica.
5. Nancy Cihuapilli Barrueta Flores. Química, Facultad de Química, UNAM. *Evaluación de funcionales de la densidad en el estudio de estructuras supramoleculares*. 23 de septiembre de 2016. Aprobada con mención honorífica.
6. Luis Ángel Martínez Martínez. Maestría en Ciencias Químicas, UNAM. *Algoritmo Optimizado para Unidades de Procesamiento Gráfico en la Evaluación de Energía SOS-MP2*. 3 de agosto de 2015. Aprobado con mención honorífica.

7. Gerardo Álvarez Álvarez. Químico. Facultad de Química, UNAM. *Estudio teórico del mecanismo de enantioselectividad en la reacción de alquilación alílica asimétrica catalizada por complejos de Pd-difosfitofuranosido*. 22 de mayo de 2014. Aprobado.
8. Luz María del Refugio López Gómez. Maestría en Docencia para la Educación Media Superior (MADEMS), Facultad de Química, UNAM. *Evaluación del uso de literatura primaria para la comprensión de los problemas ambientales*. 6 de diciembre de 2013. Aprobada.
9. Rodrigo Alejandro Vargas Hernández. Químico. Facultad de Química, UNAM. *Estabilidad relativa de los estados excitados y el estado basal del dímero de hierro por Monte Carlo cuántico*. 16 de noviembre de 2012. Aprobado.
10. Carlos Octavio Olvera Bermúdez. Maestría en Ciencias Químicas. UNAM. *Estudio Teórico del Compuesto MOF-5*. Noviembre de 2007. Aprobado.
11. Edmundo Segundo Carrera Martínez. Químico. Facultad de Química, UNAM. *Química Computacional. Un análisis crítico*. 29 de julio de 2004. Aprobado.
12. Laura Domínguez Dueñas. Química. Facultad de Química, UNAM. *Tráfico*. 22 de abril de 2004. Aprobada.
13. Carlos Octavio Olvera Bermúdez. Químico. Facultad de Química, UNAM. *Efecto túnel en reacciones de transferencia de electrones en sistemas biológicos*. 14 de noviembre de 2003. Aprobado.
14. Romelia Salomón Ferrer. Química. Facultad de Química, UNAM. *Cálculo del agujero de intercambio en diferentes sistemas de interés teórico y químico*. 25 de abril de 2002. Aprobada con mención honorífica.
15. Andrea Carlos Hernández. Doctorado en Ciencias Químicas (Fisicoquímica). *Simulación de películas delgadas de polímeros por métodos de Monte Carlo*. 2 de octubre de 2001. Aprobada. (Codirección de tesis con Kristen Ann Fichtorn, Pennsylvania State University)
16. Rodolfo Gómez Balderas. Doctorado en Ciencias Químicas (Fisicoquímica). *Actividad catalítica y efecto promotor de algunos sulfuros de los metales de transición 3d, un estudio teórico*. 7 de septiembre de 2001. Aprobado.
17. Sergio Antonio Gómez Liévano. Maestría en Educación Química, Instituto de Posgrados en Educación de Chiapas (07ESU0002Y). *Estudio exploratorio de la efectividad del empleo de prototipos didácticos experimentales aplicables a la termodinámica*. 15 de enero de 2001. Aprobado.
18. Juan José Solís Zavala. Maestría en Educación Química, Instituto de Posgrados en Educación de Chiapas (07ESU0002Y). *Estudio exploratorio de la efectividad del empleo de prototipos didácticos experimentales aplicables a la termodinámica*. 15 de enero de 2001. Aprobado.
19. Alan Aspuru Guzik. Químico. Facultad de Química, UNAM. *Monte Carlo Cuántico: Desarrollo de un programa de software educativo y de investigación*. 11 de junio de 1999. Aprobado con mención honorífica.
20. Raúl Alejandro Perusquía Flores. Químico. Facultad de Química, UNAM. *Monte Carlo Cuántico: Desarrollo de un programa de software educativo y de investigación*. 11 de junio de 1999. Aprobado.
21. Rodolfo Gómez Balderas. Maestría en Ciencias Químicas (Fisicoquímica). Facultad de Química, UNAM. *Aplicación de la corrección de autointeracción en funcionales de la densidad*. 12 de junio de 1997. Aprobado.
22. Angélica Estrella Ramos Peña. Química. Facultad de Química, UNAM. *Cálculo de diagramas de fases de aleaciones a partir de primeros principios*. Septiembre de 1994. Aprobada.
23. Carlos Fix Fierro. Químico. Facultad de Química, UNAM. *Filosofía de la ciencia, ¿una nueva visión?* 17 de junio 1994. Aprobado.
24. Eugenio Treviño Alemán. Ingeniero Químico. Facultad de Química, UNAM. *Filosofía de la ciencia, ¿una nueva visión?* 17 de junio 1994. Aprobado.

25. Erika Sibel Carranza Casas. Ingeniero Químico. Facultad de Química, UNAM. *Síntesis del 1-isopropilamino-3-(4-(2-metoxietil)-fenoxi)-2-propanol y transferencia del proceso a planta industrial*. 19 de septiembre 1991. Aprobada.
26. Miguel Angel Martínez Carrillo. Químico. Facultad de Química, UNAM. *Estudio del enlace químico y estructura electrónica de la aleación Ni-Pt*. 2 de abril 1990. Aprobado.
27. Gerardo Soto Campos. Químico. Facultad de Química, UNAM. *Cálculo de propiedades ópticas de sólidos: aplicación al hierro*. 26 de agosto 1985. Aprobado con Mención Honorífica.

Estancias Posdoctorales

1. Fernando Sánchez Rueda. Doctor en Ciencia e Ingeniería de Materiales. Agosto de 2018 a julio de 2020.
2. Humberto Laguna Galindo. Doctor en Ciencias Químicas. Facultad de Química, UNAM. *Celdas fotovoltaicas orgánicas: modelo teórico de transporte excitónico para la predicción de su eficiencia de conversión de potencia eléctrica*. Enero de 2017 a diciembre de 2017
3. Omar López Estrada. Doctor en Ciencia e Ingeniería de Materiales. Facultad de Química, UNAM. *Estudios mecánico cuánticos de transferencia de carga en complejos donador-aceptor mediante la teoría de DFT restringida (CDFT) y estudios de predicción de propiedades moleculares con técnicas de "machine-learning"*. Diciembre de 2016 a septiembre de 2017
4. Mariano Sánchez Castellanos. Doctor en Ciencias Químicas. Facultad de Química, UNAM. *Estudios mecánico cuánticos y mecánico clásicos de la morfología de compuestos orgánicos con aplicaciones a celdas fotovoltaicas*. Enero de 2017 a septiembre de 2017

Investigación

1. Benzidine derivatives as electroactive materials for aqueous organic redox flow batteries
Martha M Flores-Leonar, Gloria Acosta, Humberto G Laguna, Carlos Amador-Bedolla, Mariano Sánchez-Castellanos, Víctor M Ugalde-Saldívar
(Submitted for publication to ACS Applied Energy Materials 01.03.23)
2. Reversible redox chemistry in a phenoxazine-based organic compound: a two electron storage negolyte for alkaline flow batteries
Eduardo Martínez-González, Carlos Amador-Bedolla, Víctor M. Ugalde-Saldívar
ACS Appl. Energy Mater. **2022**, *5*, 12, 14748–14759
<https://doi.org/10.1021/acsaem.2c02114> (IF 6.959)
3. Electronic transport in organic photovoltaic materials subjected to dark and light irradiation conditions: a first principles study
Cornelio Delesma, Carlos Amador-Bedolla, Miguel Robles, Jesús Muñiz
Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry **2022**, *433*, 114182
<https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2022.114182> (IF 5.141)
4. Impact of thickness of spin-coated P3HT thin films, over their optical and electronic properties
Fernando Landgrave-Barbosa, Andrés F. Marmolejo-Valencia, Alejandro Baray-Calderón, Hailin Hu, Julio César Aguilar-Cordero, Carlos Amador-Bedolla, Víctor M. Ugalde-Saldívar
J Solid State Electrochem, **2022**, *26*, 649-661
<https://doi.org/10.1007/s10008-021-05078-7> (IF 2.649)
5. Charge transfer electronic states in organic solar cells: A TDDFT study
Andres F. Marmolejo-Valencia, Zaahel Mata-Pinzón, Carlos Amador-Bedolla
Physical Chemistry Chemical Physics, **2021**, *23*, 16806 - 16815
<https://doi.org/10.1039/d1cp00723h> (IF 3.567)
6. Concentration Effects on the First Reduction Process of Methyl 2 Viologens and Diquat Redox Flow Battery Electrolytes

- Eduardo Martínez-González, Martha M. Flores-Leonar, Carlos Amador-Bedolla, Victor M. Ugalde-Saldivar
ACS Appl. Energy Mater. **2021**, *4*, 7, 6624–6634
<https://doi.org/10.1021/acsaem.1c00685> (IF 6.024)
7. Theoretical study of the open circuit voltage decay on Organic Photovoltaic (OPV) solar cells based on space radiation ionizing damage
I Piña-López, K M García-Ruiz, C Barrueta-Flores and C Amador-Bedolla
J. Phys. Conf. Ser. **2021**, *1723*, 012017
<https://doi.org/10.1088/1742-6596/1723/1/012017> (IF 0.54)
 8. Structural parameters data at ground and excited state of organic photovoltaic materials opto-electronic properties of organic photovoltaic materials
Cornelio Delesma, Carlos Amador-Bedolla, Miguel Robles, Jesús Muñiz
Mendeley Data, V1, **2021**, <https://doi.org/10.17632/k9fts9zjd6.1>
Data in Brief (2021), <https://doi.org/10.1016/j.dib.2021.106952>
 9. Isomerization reactions with [Ru(Bpy)₃]²⁺ photocatalyst. A DFT study of the factors influencing the energy transfer mechanism supported by experimental data.
Martha M. Flores-Leonar, Carlos R. Azpilcueta, Carlos Amador-Bedolla, Sergio S. Rozenel.
Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry **2021**, *414*, 113224
<https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2021.113224> (IF 3.306)
 10. Saliva is a reliable and accessible source for the detection of SARS-CoV-2
Luis A. Herrera, Alfredo Hidalgo-Miranda, Nancy Reynoso-Noverón, Abelardo A. Meneses-García, Alfredo Mendoza-Vargas, Juan P. Reyes-Grajeda, Felipe Vadillo-Ortega, Alberto Cedro-Tanda, Fernando Peñaloza, Emmanuel Frías-Jimenez, Cristian Arriaga-Canon, Rosaura Ruiz, Ofelia Angulo, Imelda López-Villaseñor, Carlos Amador-Bedolla, Diana Vilar-Compte, Patricia Cornejo, Mireya Cisneros-Villanueva, Eduardo Hurtado-Cordova, Mariana Cendejas-Orozco, Jose S. Hernandez-Morales, Bernardo Moreno, Irwin A. Hernández-Cruz, César A. Herrera, Francisco García, Miguel A. González-Woge, Paulina Munguía-Garza, Fernando Luna-Maldonado, Antonia Sanchez-Vizcarra, Vincent G. Osnaya, Nelly Medina-Molotla, Yair Alfaro-Mora, Rodrigo E. Caceres-Gutiérrez, Laura Tolentino-Garcia, Patricia Rosas-Escobar, Sergio A. Román-González, Marco A. Escobar-Arrazola, Julio C. Canseco-Mendez, Diana R. Ortiz-Soriano, Julieta Dominguez-Ortiz, Ana D. Gonzalez-Barrera, Diana I. Aparicio-Bautista, Armando Cruz-Rangel, Ana Paula Alarcón-Zendejas, Laura Contreras-Espinosa, Rodrigo González, Lissania Guerra-Calderas, Marco A. Meraz-Rodríguez, Michel Montalvo-Casimiro, Rogelio Montiel-Manríquez, Karla Torres-Arciga, Daniela Venegas, Vasti Juárez-González, Xiadani Guajardo-Barreto, V. Monroy-Martínez, D. Guillén, J. Fernández, J. Herrera, R. León-Rodríguez, Israel Canela-Pérez, Blanca H. Ruiz-Ordaz, Rafael Valdez-Vazquez, Jennifer Bertin-Montoya, María Niembro-Ortega, Liudmila Villegas-Acosta, Daniela López-Castillo, Andrea Soriano-Ríos, Michael Gastelum-Ramos, Tonatiuh Zamora-Barandas, Jorge Morales-Baez, María García-Rodríguez, Mariano García-Martínez, Erik Nieto-Patlán, Maricarmen Quirasco-Baruch, Irma López-Martínez, Ernesto Ramírez-Gonzalez, Hiram Olivera-Díaz, Noe Escobar-Escamilla
International Journal of Infectious Diseases **2021**, *105*, 83–90
<https://doi.org/10.1016/j.ijid.2021.02.009> (IF 3.202)
 11. Exciton dissociation in correlated molecular photocells
Fernando Sánchez, Carlos Amador-Bedolla, Vicenta Sánchez and Chumin Wang
Journal of Physics and Chemistry of Solids **2021**, *152*, 109966
<https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2021.109966> (IF 3.442)
 12. The role of photoisomerization in the opto-electronic properties of organic photovoltaic materials: A DFT study
Cornelio Delesma, Carlos Amador-Bedolla, Miguel Robles, Jesús Muñiz
Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry **2021**, *409*, 113155
<https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2021.113155> (IF 3.306)

13. Assessing electronic properties of desymmetrized heterocyclic tetrads: towards tuning small molecules for photovoltaic applications
Oscar González-Antonio, Rebeca Yépez, María Magdalena Vázquez-Alvarado, Blas Flores-Pérez, Norberto Farfán, Carlos Amador-Bedolla, Margarita Romero-Ávila, and Rosa Santillan
MRS Advances **2020**, *5*, 3171-3184.
<https://doi.org/10.1557/adv.2020.434> (IF 0.720)
14. Kinetic properties of aqueous organic redox flow batteries anolytes using Marcus-Hush theory
Eduardo Martínez-González, Humberto G. Laguna, Mariano Sánchez-Castellanos, Sergio S. Rozenel, Víctor M. Ugalde-Saldivar, Carlos Amador-Bedolla
ACS Applied Energy Materials **2020**, *3*, 9, 8833-8841
<https://doi.org/10.1021/acsuem.0c01336> (IF 4.473)
15. Materials Acceleration Platforms: on the way to autonomous experimentation
Martha M. Flores-Leonar, L. M. Mejía-Mendoza, Andrés Aguilar-Granda, Benjamin Sanchez-Lengeling, Hermann Tribukait, Carlos Amador-Bedolla, Alan Aspuru-Guzik
Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry (**2020**)
<https://doi.org/10.1016/j.cogsc.2020.100370> (IF 5.165)
16. Experimental and theoretical exploration of aryl substituent effects on the electronic properties of asymmetric 4,7-di(thiophene-2-yl)-benzo[c][2,1,5]thiadiazole
Luis Daniel Sifuentes-Vázquez, Eduardo Martínez-González, Rubén A. Toscano, Rubén Gaviño, Jorge Cárdenas, Carlos Antonio Rius-Alonso, Carlos Amador Bedolla, Gustavo Alberto García de la Mora and Víctor Manuel Ugalde Saldivar
Polycyclic Aromatic Compounds **42** [3] 711-726 (**2022**)
<https://doi.org/10.1080/10406638.2020.1749858> (IF 1.237)
17. On the role of driving force in molecular photocells
Fernando Sanchez, Carlos Amador-Bedolla, Vicenta Sanchez, Chumin Wang
Physica B: Physics of Condensed Matter **583** (**2020**) 412052
<https://doi.org/10.1016/j.physb.2020.412052> (IF 1.874)
18. Atomistic simulations of bulk heterojunctions to evaluate the structural and packing properties of new predicted donors in OPVs
A. F. Marmolejo Valencia, Z. Mata-Pinzón, L. Dominguez and C. Amador-Bedolla
Phys. Chem. Chem. Phys., (**2019**) **21**, 20315-20326
<https://doi.org/10.1039/c9cp04041b>. (IF 3.567)
19. Theoretical exploration of 2,2-bipyridines as electro-active compounds in flow batteries
Mariano Sánchez-Castellanos, Martha Flores-Leonar, Zaahel Mata-Pinzón, Humberto Laguna, Karl García-Ruiz, Sergio Rozenel, Víctor M. Ugalde-Saldivar, R. Moreno-Esparza, Joep J.H. Pijpers, Carlos Amador-Bedolla
Phys. Chem. Chem. Phys. (**2019**) **21**, 15823
<https://doi.org/10.1039/c9cp03176f> (IF 3.567)
20. Quasiperiodic Branches in the Thermoelectricity of Nanowires
Fernando Sánchez, Carlos Amador-Bedolla, Vicenta Sánchez and Chumin Wang
Journal of Electronic Materials (**2019**) **48**: 5099-5110
<https://doi.org/10.1007/s11664-019-07298-0> (IF 1.579)
21. Density (de)localization and statistical correlation in the Van der Waals interactions and the chemical bond between two hydrogens
H.G. Laguna and C. Amador-Bedolla
Physica A (**2019**) **527**: 121324
<https://doi.org/10.1016/j.physa.2019.121324> (IF 2.132)

22. Parameterization of prototype organic small molecules suitable for OPVs and molecular dynamics simulations: the BTT and BPT cases
Karl M. García-Ruiz, Andrés Felipe Marmolejo-Valencia, Augusto González-Navejas, Laura Dominguez, Carlos Amador-Bedolla
Journal of Molecular Modeling (2019) 25: 110
<https://doi.org/10.1007/s00894-019-3984-9> (IF 1.507)
23. A synergetic experimental and computational approach towards a better comprehension of redox reactions of N₃ dye in solution
P. Zerón, J. Carmona-Espíndola, M. M. Flores-Leonar, J. L. Gázquez, I. González, C. Amador-Bedolla, and V. M. Ugalde-Saldívar
ChemistrySelect 2018, 3, 7541.
<https://doi.org/10.1002/slct.201800716> (IF 1.505)
24. Electronic structure and non-linear optical properties of organic photovoltaic systems with potential applications on solar cell devices: A DFT approach
Alfredo Guillén-López, Cornelio Delesma, Carlos Amador-Bedolla, Miguel Robles and Jesús Muñoz
Theoretical Chemistry Accounts (2018) 137 (6):85.
<https://doi.org/10.1007/s00214-018-2267-3> (IF 2.233)
25. Accelerating Discovery of New Materials for Clean Energy in the Era of Smart Automation
Daniel P. Tabor, Loïc M. Roch, Semion K. Saikin, Christoph Kreisbeck, Dennis Sheberla, Joseph H. Montoya, Shyam Dwaraknath, Muratahan Aykol, Carlos Ortiz, Hermann Tribukait, Carlos Amador-Bedolla, Christoph J. Brabec, Benji Maruyama, Kristin A. Persson, and Alán Aspuru-Guzik
Nature Reviews Materials 3: 5-20 (2018)
<https://doi.org/10.1038/s41578-018-0005-z> (IF 51.941)
26. Reassessment of the Four-Point Approach to the Electron-Transfer Marcus-Hush Theory
Omar López-Estrada, Humberto G. Laguna, Cihuapilli Barraeta-Flores, and Carlos Amador-Bedolla
ACS Omega 2018, 3(2) 2130–2140
<https://doi.org/10.1021/acsomega.7b01425> (IF 2.584)
27. Materials Acceleration Platform: Accelerating Advanced Energy Materials Discovery by Integrating High-Throughput Methods with Artificial Intelligence
Aspuru-Guzik A., Persson K., Alexander-Katz A., Amador-Bedolla, C., Solís-Ibarra D., Antes M., Mosby A., Aykol M., Chan E., Dwaraknath S., Montoya J., Rotenberg E., Gregoire J., Hattrick-Simpers J., Huang D. M., Hein J., Hutchison G., Isayev O., Jung Y., Kiviahio J., Kreisbeck C., Roch L., Saikin S., Tabor D., Lambert J., Odom S., Pijpers J., Ross M., Schrier J., Segalman R., Sfeir M., Tribukait H., Vegge T.
Mission Innovation (2018)
<http://mission-innovation.net/wp-content/uploads/2018/01/Mission-Innovation-IC6-Report-Materials-Acceleration-Platform-Jan-2018.pdf>
28. Correlating properties in iron(III) complexes: A DFT description of structure, redox potential and spin crossover phenomena
Martha M. Flores-Leonar, Rafael Moreno-Esparza, Víctor M. Ugalde-Saldívar and Carlos Amador-Bedolla
ChemistrySelect 2017, 2, 4717-4724
<https://doi.org/10.1002/slct.201700547> (IF 1.505)
29. Ruthenium tris bipyridine derivatives and their photocatalytic activity in [4 + 2] cycloadditions. An experimental and DFT study
Sergio S. Rozenel, Carlos R. Azpilcueta, Martha M. Flores-Leonar, Juan P. F. Rebolledo-Chávez, Luis Ortiz-Frade, Carlos Amador-Bedolla, Erika Martin
Catalysis Today 2018, 310, 2-10
<https://doi.org/10.1016/j.cattod.2017.05.021> (IF 4.636)
30. GPU Algorithm for the Scaled Opposite-Spin (SOS) MP₂ Energy Evaluation
Luis Ángel Martínez-Martínez and Carlos Amador-Bedolla

- J. Mex. Chem. Soc. **2017**, 61(1), 60-66
<https://doi.org/10.29356/jmcs.v6i1.129> (IF 0.778)
31. Further insights in DFT calculations of redox potential for iron complexes: the ferrocenium/ferrocene system
Martha M. Flores-Leonar, Rafael Moreno-Esparza, Víctor M. Ugalde-Saldívar and Carlos Amador-Bedolla
Computational and Theoretical Chemistry 1099C (2017) pp. 167-173
<http://dx.doi.org/10.1016/j.comptc.2016.11.023> (IF 1.549)
 32. Sistemas de Energía
Carlos Amador Bedolla y Ramón Muñoz Ledo
Reporte Mexicano de Cambio Climático: Grupo III Emisiones y mitigación de gases de efecto invernadero
UNAM Programa de Investigación en Cambio Climático (2015)
ISBN 978-607-027523-4
 33. Sustentabilidad
Carlos Amador Bedolla
Revista Digital Universitaria 14, 9, 1 de septiembre de 2013
(<http://www.revista.unam.mx/vol.14/num9/art35/index.html>) ISSN 1607 - 6079
 34. Ciencias y Tecnologías de la Sustentabilidad (Editorial)
Carlos Amador Bedolla
Revista Digital Universitaria 14, 9, 1 de septiembre de 2013
(<http://www.revista.unam.mx/vol.14/num9/editorial>) ISSN 1607 - 6079
 35. Chapter 17 - Organic Photovoltaics
Carlos Amador-Bedolla, Roberto Olivares-Amaya, Johannes Hachmann and Alán Aspuru-Guzik, In
Informatics for Materials Science and Engineering, edited by Krishna Rajan, Butterworth-Heinemann,
Oxford, 2013, Pages 423-442, ISBN 9780123943996, <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-394399-6.00017-5>.
(<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780123943996000175>)
 36. Sustentabilidad y educación química (Editorial)
Carlos Amador Bedolla
Educación Química **24** (2) 182-183, 2013
<http://www.educacionquimica.info/numero.php?numero=122>
 37. Durabilidad humana y la educación química
Carlos Amador Bedolla
Educación Química **24** (2) 193-198, 2013
<http://www.educacionquimica.info/numero.php?numero=122>
 38. Factors determining tautomeric equilibria in Schiff bases
Martha Flores-Leonar, Nuria Esturau-Escofet, José M. Méndez-Stivalet, Armando Marín-Becerra, Carlos
Amador-Bedolla
Journal of Molecular Structure **1006**, 600-605 (2011) <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2011.10.011>
 39. Accelerated computational discovery of high-performance materials for organic photovoltaics by means of
cheminformatics
Roberto Olivares-Amaya, Carlos Amador-Bedolla, Johannes Hachmann, Sule Atahan-Evrenk, Roel S.
Sánchez-Carrera, Leslie Vogt and Alán Aspuru-Guzik
Energy & Environmental Science **4**, 4849-4861 (2011) doi: 10.1039/C1EE02056K
 40. The Harvard Clean Energy Project: Large-Scale Computational Screening and Design of Organic
Photovoltaics on the World Community Grid
J. Hachmann, R. Olivares-Amaya, S. Atahan-Evrenk, C. Amador-Bedolla, R.S. Sánchez-Carrera, A. Gold-
Parker, L. Vogt, A. M. Brockway, and A. Aspuru-Guzik
J. Phys. Chem. Lett. **2**, 2241-2251 (2011) doi: 10.1021/jz200866s

41. La ética del cambio climático
Carlos Amador Bedolla y Hortensia Moreno Esparza
Revista de Relaciones Internacionales de la UNAM **110** mayo-agosto 2011, pp. 121-137
42. La biología cuántica ¿un nuevo campo de la química?
Carlos Amador-Bedolla y Alán Aspuru-Guzik
Educación Química **22** (1) 8-11, 2011
43. Synthesis of Alkyl and Fluoroalkyl Chains Containing Thioether-Phosphines
Angela M. López-Vinasco, Marlene Bruce, Paola González-Aguirre, Alonso Rosas-Hernández, Carlos Amador-Bedolla, Erika Martin
SYNTHESIS 2010, No. 23, pp 4101-4106 Advanced online publication: 22.10.2010 DOI: 10.1055/s-0030-1258309; Art ID: Mo4310SS
44. Multimodality and ICT in the teaching of science. Fractals and oscillating chemical reactions as examples.
Glinda Irazoque Palazuelos, Iliana Zaldivar Coria, Carlos Amador Bedolla, Gisela Hernández Millán y Norma López Villa.
EDULEARN10 Proceedings pp. 1718-1724. CD. ISBN: 978-84-613-9386-2. IATED 1718-1724, 2010.
45. Modern Ethics
Carlos Amador Bedolla
Ecological Economics **70** 134-135 (2010) doi: 10.1016/j.ecolecon.2010.05.012
46. La química computacional en el salón de clases.
Carlos Amador Bedolla y Carlos Octavio Olvera Bermúdez
Educación Química, **20** (2) 182-186 (2009)
47. Creating of a GUI for Zori, a Quantum Monte Carlo Program
R. Olivares-Amaya, R. Salomon-Ferrer, W. A. Lester Jr., and C. Amador-Bedolla
Computing in Science & Engineering, **11** (1), art. no. 4720222, pp. 41-47 (2009)
48. Cuántica por cuántica: química cuántica con computadoras cuánticas
Carlos Amador-Bedolla y Alán Aspuru-Guzik
Educación Química **19** (3) pp. 182-187 (2008)
49. Accelerating Resolution-of-the-Identity Second Order Møller-Plesset Calculations with Graphical Processing Units
L. Vogt, Roberto Olivares-Amaya, S. Kermes, Y. Shao, C. Amador-Bedolla, and A. Aspuru-Guzik
Journal of Physical Chemistry A, 2008, **112** (10), pp 2049-2057 DOI: 10.1021/jp0776762
50. Las computadoras cuánticas y la química cuántica
Alán Aspuru-Guzik y Carlos Amador-Bedolla
Anuario Latinoamericano de Educación Química, **XXII**, pp. 242-251 (2007)
51. Reagents for electrophilic amination: a quantum Monte-Carlo study
C. Amador-Bedolla, R. Salomón-Ferrer, W. A. Lester Jr., J. A. Vázquez-Martínez and A. Aspuru-Guzik
Journal of Chemical Physics **126**, 204308 (2007)
52. A comparative DFT study of the catalytic activity of the 3d transition metal sulphides surface
R. Gómez-Balderas, R. Oviedo-Roa, J. M. Martínez-Magadán, C. Amador, D. A. Dixon
Surface Science **518**, 163-173 (2002)
53. Site occupancy of ternary additions to B₂ alloys
G. Bozzolo, R. D. Noebe and C. Amador
Intermetallics **10**, 149-159 (2002)
54. Promotional effect of a Co or Ni impurity in the catalytic activity of MoS₂: an electronic structure study
R. Gómez-Balderas, J. M. Martínez-Magadán, R. Santamaría, and C. Amador
International Journal of Quantum Chemistry **80**, 406 (2000)

55. An introduction to the BFS method and its use to model binary NiAl alloys
G. Bozzolo, R. D. Noebe, J. Ferrante, and C. Amador
Journal of Computer-Aided Mater. Design 6, 1 (1999)
56. BFS simulation and experimental analysis of the effect of Ti additions on the structure of NiAl
G. Bozzolo, R. D. Noebe, J. Ferrante, A. Garg, F. Honey, and C. Amador
Journal of Computer-Aided Mater. Design, 6, 33 (1999)
57. Atomistic Simulations of Ti Additions to NiAl
G. Bozzolo, R. D. Noebe, A. Garg, J. Ferrante, and C. Amador
Mat. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 460, 443 (1997) DOI: <https://doi.org/10.1557/PROC-460-443>
58. Zero temperature analysis of the defect structure of B2 FeAl alloys
G. Bozzolo, J. Ferrante, R. D. Noebe, and C. Amador.
Scripta Metallurgica et Materialia 36, 813 (1997). DOI: [10.1016/S1359-6462\(96\)00447-2](https://doi.org/10.1016/S1359-6462(96)00447-2)
59. Defect Structure of b-NiAl using the BFS method for alloys.
G. Bozzolo, C. Amador, J. Ferrante, and R. D. Noebe.
Mat. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 408, 375 (1996). DOI: <https://doi.org/10.1557/PROC-408-375>
60. Modelling of the defect structure of b-NiAl.
G. Bozzolo, C. Amador, J. Ferrante, and R. D. Noebe.
Scripta Metallurgica et Materialia 33, 1907 (1995). [https://doi.org/10.1016/0956-716X\(95\)00474-A](https://doi.org/10.1016/0956-716X(95)00474-A)
61. Theoretical and experimental study of relaxation in Al₃Ti and Al₃Zr ordered phases.
C. Amador, J. J. Hoyt, B. C. Chakoumakos, and D. de Fontaine.
Phys. Rev. Lett. 74, 4955 (1995).
62. Cálculo de Diagramas de Fases de Aleaciones Binarias a partir de Primeros Principios.
C. Amador y E. Ramos.
Rev. Mex. de Fís. 40, 427 (1994).
63. Formation Energy of Disordered Alloys from Energetics of Ordered Compounds.
C. Amador and G. Bozzolo.
Phys. Rev. B 49, 956 (1994)
64. Phase Diagrams from First-Principles Calculations: the One Magnetic Component Ni-Pt alloy.
C. Amador.
In: *New Trends in Magnetism, Magnetic Materials, and their Applications*. J. L. Morán-López and J. M. Sánchez (editors), Plenum Press (New York, 1994) p.251.
65. Internal strain effects on the phase diagram of Ni-Pt alloys.
C. Amador, W. R. L. Lambrecht, M. van Schilfgaarde, and B. Segall.
Phys. Rev. B 47, 15276 (1993).
66. "Wrong" Bond Interactions at Inversion Domain Boundaries in Ga-As.
W. R. L. Lambrecht, C. Amador, and B. Segall.
Phys. Rev. Lett. 68, 1363 (1992).
67. Application of Generalized Gradient Corrected Density Functionals to Iron.
C. Amador, W. R. L. Lambrecht, and B. Segall.
Phys. Rev. B 46, 1870 (1992).
68. Can Polar Interface Energies Be Calculated by Means of Supercells?
W. R. L. Lambrecht, C. Amador, and B. Segall.
Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 253, 381 (1992). DOI: <https://doi.org/10.1557/PROC-253-381>
69. Comparison of Ni-Pt and Co-Pt Alloys Aided by Multiple-Scattering Calculations of Local Electronic Structure.

- A. Pisanty, M. A. Martínez-Carrillo, and C. Amador.
Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 253, 291 (1992). DOI: <https://doi.org/10.1557/PROC-253-291>
70. Phase Diagram of Ni-Pt from Linear Muffin-Tin Orbitals Total Energy Calculations.
C. Amador, W. R. L. Lambrecht, and B. Segall.
Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 253, 297 (1992). DOI: <https://doi.org/10.1557/PROC-253-297>
71. Wrong Bonds at Compound Semiconductor Grain Boundaries.
W. R. L. Lambrecht, C. H. Lee, M. Methfessel, M. van Schilfgaarde, C. Amador, and B. Segall.
Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 209, 667 (1991) DOI: <https://doi.org/10.1557/PROC-209-667>
72. "Poor-man's self-consistency."
Pisanty A., Amador C., and Martínez-Carrillo M.
en: "Density Functional Approaches to Chemistry."
Labanowsky J. K. and Andzelm J. W. (eds.)
Springer-Verlag, New York 1991, p. 401.
73. Sumas de Madelung.
Amador C. y Pisanty A.
Rev. Mex. de Fis. 37, 331 (1990)
74. Band Structures of Ni₃Pt and NiPt₃.
Pisanty A., Amador C., Ruiz Y., and De la Vega M.
Z. Phys. B: Condensed Matter 80, 237 (1990).
75. The Formulation of Density Functional Theory.
Keller J. and Amador C.
Condensed Matter Theories 3, Arponen J. (ed.), Plenum, 201 (1988).
76. Local Order Effects in the Electronic Properties of Amorphous and Disordered Materials.
Keller J., de Teresa C., and Amador C.
Kinam 8 Serie C, 19 (1987).
77. Real Space Studies of the Electronic and Magnetic Structure of Metals.
Keller J., Amador C., and de Teresa C.
Future Trends in Materials Sciences, Keller J. (ed.)
World Scientific Advanced Series Surface Science 3, 161 (1987).
78. Strongly Correlated f Electrons.
Keller J., de Teresa C., and Amador C.
Proceedings of the VIII Winter Meeting on Low Temperature Physics, IIM-UNAM, México (1987)
79. Symmetry Constrains in the Ionization Potentials and on the Formulation of the Hohenberg-Kohn-Sham Theory.
Keller J., Amador C., de Teresa C., and Flores J. A.
Condensed Matter Theories 2, Vashishta P. (ed.), Plenum (1987).
80. Chemical Bonding and Magnetic Properties in Condensed Matter.
Amador C. and Keller J.
Proceedings of the VII Winter Meeting on Low Temperature Physics, IIM-UNAM, México (1986).
81. Local Approximations in the Applications of Density Functional Theory.
Keller J., Amador C., and de Teresa C.
Condensed Matter Theories 1, Malik B. (ed.), Plenum, 195 (1986).
82. Chemical Bonding and Structure Relaxation in Amorphous Zr_xCu_(1-x).
de Teresa C., Amador C., and Keller J.
Journal of Non-Crystalline Solids 75, 385 (1985).

83. Densidad Local de Susceptibilidad de Espín.
C. Amador y J. Keller.
Cuadernos de Posgrado, Facultad de Química, UNAM.
Keller J. (ed.) 15, 127 (1985).
84. Moment Formation in Magnetic Rare Earth Metal Alloys.
Keller J., Amador C., and de Teresa C.
Physica B+C **130**, 37-40 (1985).
85. Unión Química y Magnetismo en Materia Condensada.
Keller J., Amador C., and de Teresa C.
Revista Mexicana de Física 30, 447 (1984).
86. Density Functional Obtained from Models of the Electron First and Second Order Matrices.
Keller J. and Amador C.
Lecture Notes in Physics 187, 269 (1983).
87. Cluster in Condensed Matter Studies of Ferromagnetic Iron.
Amador C., de Teresa C., Keller J., and Pisanty A.
Inst. Phys. Int. Conf. Ser. 55, 225 (1981).
88. Density Functionals from Models of the Electronic Charge Density.
Keller J., Keller C., and Amador C.
Lecture Notes in Physics 142, 364 (1981).
89. Theoretical Analysis of the μ^+ Knight Shift in Cd and Zn.
Keller J., Castro M., Amador C., and Orgaz E.
Hyperfine Interactions 8, 483 (1981).
90. Rare Earths Presenting Strong f-d Hybridization.
Keller J., Castro M., and Amador C.
Physica B+C **102**, 129 (1980).

Difusión

Libros publicados

1. El mundo finito. Desarrollo sustentable en el siglo de oro de la humanidad
Carlos Amador Bedolla
Fondo de Cultura Económica (2010) Reimpresión (2014)
2. La huelga del fin del mundo: voces para un diálogo aplazado
Hortensia Moreno y Carlos Amador
Editorial Planeta (1999)

Artículos de difusión

1. El origen de COVID-19: lo que se sabe, lo que se supone y (muy poquito) sobre las teorías de complot
Laura Dominguez y Carlos Amador-Bedolla
Educación Química. Vol 31(2), 3-10 (2020). DOI: 10.22201/fq.18708404e.2020.2.75461 (IF 0.270)
2. Silicio, un digno príncipe
Carlos Amador-Bedolla
C2, Ciencia y Cultura, febrero 2019 (<https://www.revistac2.com/silicio/>)
3. El premio Nobel de Química 2017: microscopía crio-electrónica
Carlos Amador-Bedolla
Educación Química **29** (1): 3-8 (2018) DOI: 10.22201/fq.18708404e.2018.1.63678

4. Energía Limpia
Carlos Amador Bedolla
Revista ¿Cómo ves? Noviembre 2015.
5. La Química Teórica/Computacional
Carlos Amador Bedolla
Capítulo del libro *50 años de Investigación y Posgrado en la Facultad de Química, Memorias*. Andoni Gárritz Ruiz y José Luis Mateos Gómez (editores). Facultad de Química, UNAM, 2015.
6. El Premio Nobel de Química 2013 para Químicos Computacionales
Laura Domínguez y Carlos Amador Bedolla
Educación Química **25** (1) 82-85 (2014)
7. Radio Ethiopia
Carlos Amador Bedolla
Debate Feminista **47**: 319-323 (2013)
8. La fotosíntesis artificial: la propuesta química que puede salvar al mundo
Carlos Amador Bedolla
Anuario Latinoamericano De Educación Química **XXVII** 195-201 (2012)
9. Cuasicristales
Carlos Amador Bedolla
Educación Química **23** (1) 69-70 (2012)
10. **30**Otorgan el Premio Nobel de Química 2011 por el descubrimiento de los cuasicristales
Carlos Amador Bedolla
Gaceta Facultad de Química, UNAM, noviembre 2011, p. 19
11. Los matrimonios de la química
Carlos Amador Bedolla y Miguel Costas
Revista Digital Universitaria **12** (9) 2011. ISSN: 1067-6079
12. El largo viaje del *homo sapiens*
Carlos Amador Bedolla
Debate Feminista (en prensa, 2011)
13. Jaime Keller Torres (1936-2011)
Carlos Amador Bedolla
Educación Química **22** (2) 3ª forros (2011)
14. El maíz viene del Balsas
Carlos Amador Bedolla
Revista Digital Universitaria **12** (1) 3-6 (2011) ISSN:1067-6079
15. Cincuenta (por diez a la siete) años más
Carlos Amador Bedolla
Educación Química **21** (1), 85-87 (2010)
16. Cincuenta años más
Carlos Amador Bedolla
Educación Química **20** (4), 471-474 (2009)
17. Recurrencia periódica
Carlos Amador Bedolla
Educación Química, **19** (3) pp. 242-244 (2008)
18. Problemático y febril
Carlos Amador
Educación Química **18** (4), 337-340 (2007)

19. Ni computadoras ni sociedades de convivencia
Carlos Amador
Debate Feminista, año 18, vol. 35, abril de 2007, pp. 316-326
20. La domesticación de la ciencia
Carlos Amador
Educación Química 17, pp. 483-487 (2006)
21. La humanidad es una vieja plaga
Carlos Amador
Materiales Avanzados IIMUNAM (2006)
22. Incompletitud
Carlos Amador
Educación Química 17, 180 (2006)
23. Mientras más grandes, más fuertes y más creativas
Carlos Amador
Debate Feminista, año 16, vol. 32, octubre de 2005, pp. 316-321.
24. La suerte, la probabilidad y la conciencia
Carlos Amador
Revista **Recompensas** de American Express, septiembre 2003.
25. La química cuántica en México: mecánica cuántica en química
Carlos Amador
Capítulo del libro *La mecánica cuántica en México. Una visión interdisciplinaria a cien años de su nacimiento*
Siglo XXI editores, Centro de Investigaciones Interdisciplinarias en Ciencias y Humanidades, 2003
26. ¿Quién escribe la historia?
Hortensia Moreno y Carlos Amador
Hoja por Hoja 44, 7-8 (2001)
27. Las tonterías de moda: los intelectuales posmodernos y su abuso de la ciencia.
Carlos Amador
Debate Feminista 21, 313-318 (2000)
28. ¿Cuál es el límite para la población de la Tierra?
Carlos Amador
Debate Feminista 17, 333 (1998)
29. Lo mismo y no lo mismo
Carlos Amador
Educación Química 9, 174 (1998)
30. La actividad industrial a finales del siglo XX
Carlos Amador
Boletín de la Sección Estudiantil del IMIQ 1, 5 (1998)
31. La ciencia en el posgrado
Carlos Amador
Ciencias 47, 62 (1997)
32. El concepto de vectorización
Carlos Amador
Ciencias 23, 15-18 (1991)
Julio 1991

33. La actividad científica según un recién graduado
Carlos Amador
Educación Química 1 [4] 160-177 (1990)
34. Un día sin estadísticas (en tiempos de anumerismo)
Carlos Amador
El Financiero (página científica)
Abril 1990
35. El principio de exclusión de Pauli
Carlos Amador
El Financiero (página científica)
Noviembre 1989
36. Científicos contra humanistas
Carlos Amador
El Financiero (página científica)
Julio 1989
37. La acción a distancia
Carlos Amador
El Financiero (página científica)
Agosto 1989
38. Publicar o no publicar
Carlos Amador
El Financiero (página científica)
Julio 1989
39. Propiedades Magnéticas de Sólidos
Carlos Amador
Cuadernos de Posgrado 26, Química Inorgánica V.
Facultad de Química, UNAM, 1986

Citas de trabajos publicados

El total de citas a mis trabajos es de 1554. Mi índice H=15. (ResearcherID: E-7448-2010)

El total de citas a mis trabajos es de 1690. Mi índice H=16. (Scopus ID: 6603777460)

El total de citas a mis trabajos es de 2495. Mi índice H=20. (GoogleScholar)

Cargos académico administrativos

1. Director de la Facultad de Química (4 junio 2019 a 3 de junio de 2023)
2. Consejero Universitario (Representante de los profesores de la Facultad de Química, 2011-2016)
3. Secretario Académico de Investigación y Posgrado de la Facultad de Química (de mayo a septiembre de 2005)
4. Secretario Académico de Docencia de la Facultad de Química (de junio de 2001 a abril de 2005)
5. Jefe del Departamento de Física y Química Teórica de la Facultad de Química (junio de 1997 a junio de 2001)
6. Coordinador del Programa de Cómputo de la Facultad de Química (de febrero de 1995 a abril de 2001)
7. Miembro del Consejo Asesor de Cómputo de la UNAM (1997-2005)
8. Responsable del Laboratorio de Cómputo de Fundación UNAM-Facultad de Química (junio de 1996 a junio de 1998)

Participación institucional

1. Miembro del Jurado del Premio Universidad Nacional y del Reconocimiento Distinción Universidad Nacional para Jóvenes Académicos, Área de Docencia en Ciencias Exactas (2018)
2. Miembro del Comité Directivo 2017-2020 del Consejo Nacional de Enseñanza y del Ejercicio Profesional de las Ciencias Químicas, A.C. (CONAECQ). Cuarto Vocal (24.11.17, 2017-2019).
3. Miembro de la Delegación Mexicana al Eight Clean Energy Ministerial / Second Mission Innovation Ministerial, Beijing 6-8 June, 2017. Por invitación de SENER.
4. Miembro de la Delegación Mexicana al NANOMXCN-2016: Mexico-China Workshop on NANO Materials/Science/Technology. Visita a Universidades Chinas en Shanghai, Beijing y Xi'an. 2-12 de diciembre, 2016.
5. Miembro de la Delegación Mexicana al Mission Innovation Workshop, London, 28-30 September 2016. Por invitación de SENER.
6. Coordinador de la materia "Química Cuántica I", FQUNAM (2016-2017)
7. Colíder del Grupo de Trabajo de Almacenamiento, Consejo Consultivo para la Transición Energética. SENER (2016-2018)
8. Editor Asociado. Revista Educación Química. Elsevier/UNAM (2016-)
9. Miembro de la Comisión Evaluadora del Centro de Investigaciones Interdisciplinarias en Ciencias y Humanidades para el Programa de Primas al Desempeño del Personal Académico de Tiempo Completo (PRIDE) (2014-2016)
10. Miembro de la Comisión de Trabajo Académico del Consejo Universitario (16 de febrero de 2012 a junio de 2016)
11. Miembro de la Comisión de Honor del Consejo Universitario (16 de febrero de 2012 a junio de 2016)
12. Miembro del Comité de Evaluación del Programa de Apoyo a los Proyectos de Innovación y Mejoramiento de la Enseñanza (PAPIME) Área II (2006-2012)
13. Miembro del Consejo Nacional de la Revista de Educación Química, ISSN 1870-8404 (2009-2016)
14. Miembro de la Comisión Evaluadora del Centro de Ciencias de la Atmósfera para el Programa de Primas al Desempeño del Personal Académico de Tiempo Completo (PRIDE) (2011-2015)
15. Asesor del Comisión Dictaminadora del Personal Académico en el Área de Ingeniería, UAM (2011)
16. Miembro del Comité Nacional de la Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica (2011, 2012, 2013)
17. Miembro del Consejo Asesor de Investigación de la Facultad de Química (2011-)
18. Miembro del Comité Especial del Centro de Supercómputo y Datos Miztli, DGCTIC (2011-)
19. Árbitro externo en la evaluación del Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) (2011, 2012, 2013)
20. Miembro del Comité Técnico de Evaluación del Programa de Apoyo a los Estudios de Posgrado (PAEP), Área de Ciencias Biológicas, Químicas y de la Salud (2011, 2012, 2013)
21. Miembro del Jurado del Premio Universidad Nacional y del Reconocimiento Distinción Universidad Nacional para Jóvenes Académicos, Área de Docencia en Ciencias Exactas (2012)
22. Integrante de la Comisión Evaluadora del Programa de Primas al Desempeño del Personal Académico, Centro de Investigaciones Interdisciplinarias en Ciencias y Humanidades (2012-2016)
23. Jurado en el Día de la Investigación en la FQ, FQ-UNAM (2012)
24. Miembro del Comité de Selección del Programa de Becas ExxonMobil para la Investigación, Institute of International Education (2012-2015)

25. Árbitro externo en la Comisión Dictaminadora del Área de las Ciencias Fisicomatemáticas y de las Ingenierías, Facultad de Química (2013)

Organización de eventos académicos

1. Organizador del Coloquio Química Teórica en el Siglo XXI dentro de los Coloquios de Química Fundamental del Año Internacional de la Química, Facultad de Química (2011)
2. Organizador de la Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica (2011)
3. Organizador del Ciclo de Conferencias Una Agenda para el Siglo XXI: Visiones y propuestas universitarias (Abril–Mayo 2012)
4. Organizador de la Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica (2012)
5. Coordinador de la sección “Áreas temáticas emergentes de la educación química [Química y Sostenibilidad]” para el número 2, volumen 24 de la revista Educación Química (abril 2013)
6. Organizador del 2º Ciclo de Conferencias Una Agenda para el Siglo XXI: Visiones y propuestas de mujeres universitarias (Abril–Mayo 2013)
7. Organizador de la Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica (2013)
8. Organizador Local del Taller “Energy Materials Innovation Workshop”. Mission Innovation (SENER México, Department of Energy USA, CIFAR). CDMX 11-14 de septiembre 2017.

Financiamiento

1. Responsable Técnico del proyecto: Predicción, síntesis, elaboración y calibración de celdas fotovoltaicas y baterías de flujo. (P-245754) Fondo Sectorial CONACYT-SENER-Sustentabilidad Energética. Financiamiento aprobado por 38,818,000 pesos en un año (septiembre 2016–julio 2018).
2. Responsable Técnico del Proyecto CONACYT-SENER-Sustentabilidad Energética CTAFFE 1-X-17-07 “Materiales para las Energías Limpias”. Financiamiento aprobado por 5,299,210 pesos (2017–2018).
3. Corresponsable del Proyecto PAPIME-UNAM “Manual de Prácticas para Simulación Molecular de Materiales y Biomoléculas”. Financiamiento aprobado por 145,000 pesos por un año (2017–2018).
4. Responsable Técnico para la Facultad de Química del Proyecto CONACYT-SENER-Sustentabilidad Energética “Desarrollo de Tecnologías de Almacenamiento de Energía de Bajo Costo: Baterías de Flujo y Celdas de Combustible Alcalinas”. CTAFFE-13-X-18-07. Financiamiento aprobado por 199,869,884.00 pesos en total.
5. Responsable Técnico para la Facultad de Química del Proyecto CONACYT-SENER-Hidrocarburos “Plataforma Automatizada para el Descubrimiento Acelerado de Materiales Avanzados para el Sector Energía. Nodo Internacional MAP- MEX”, Convocatoria 2018-05. Financiamiento aprobado por 143,447,730.80 pesos en total; 4,476,000.00 pesos para FQUNAM.

Pertenencia al SNI

1. Candidato a Investigador Nacional
Julio 1984 a junio 1987
2. Investigador Nacional Nivel I
Julio 1987 a junio de 1990
3. Investigador Nacional Nivel I
Julio 1990 a junio de 1993
4. Investigador Nacional Nivel I
Julio 1993 a junio de 1996
5. Investigador Nacional Nivel I
Julio 1996 a junio de 1999

6. Investigador Nacional Nivel I
Julio 1999 a junio de 2002
7. Investigador Nacional Nivel I
Julio 2002 a junio de 2005
8. Investigador Nacional Nivel I
Enero 2009 a diciembre de 2011
9. Investigador Nacional Nivel II
Enero 2012 a diciembre de 2015
10. Investigador Nacional Nivel II
Enero 2019 a diciembre de 2022
11. Investigador Nacional Nivel III
Enero 2023 a diciembre de 2027