



---

Dr. Luis Emilio Orgaz Baqué

## Curriculum Vitae

Departamento de Física y Química Teórica  
Facultad de Química, U.N.A.M.  
Emilio.Orgaz@unam.mx  
Emilio.Orgaz@gmail.com  
Tel: (55) 5622 3803

|  |           |
|--|-----------|
| <b>Resumen</b> .....                               | <b>2</b>  |
| <b>Formación Académica</b> .....                   | <b>2</b>  |
| <b>Experiencia Profesional</b> .....               | <b>2</b>  |
| <b>Nombramientos y Comisiones</b> .....            | <b>3</b>  |
| <b>Área de Investigación y Productividad</b> ..... | <b>5</b>  |
| <b>Anexos</b> .....                                | <b>7</b>  |
| <b>Proyectos Financiados</b> .....                 | <b>7</b>  |
| <b>Formación de Recursos Humanos</b> .....         | <b>7</b>  |
| <b>Seminarios y pláticas</b> .....                 | <b>11</b> |
| <b>Organización de Eventos Científicos</b> .....   | <b>13</b> |
| <b>Publicaciones Científicas</b> .....             | <b>15</b> |
| <b>Congresos y Reuniones</b> .....                 | <b>22</b> |
| <b>Docencia</b> .....                              | <b>31</b> |
| <b>Servicio Social</b> .....                       | <b>32</b> |
| <b>Participación en Posgrado</b> .....             | <b>33</b> |
| <b>Universidad de Paris XI (1991-1998)</b> .....   | <b>33</b> |



---

## Resumen

### Formación Académica

- Diploma Nacional de Habilitación para Dirigir Investigación en Ciencias  
Université de Paris-Sud, Centro de Orsay, Francia, 27 de octubre de 1994
- Doctorado en Ciencias Químicas  
Institut de Sciences des Matériaux, Unidad Asociada 446-CNRS, Université de Paris-Sud, Centro de Orsay, Francia, 1984-88.
- Maestría en Ciencias Químicas - Físicoquímica  
Facultad de Química UNAM, 1981-84.
- Licenciado en Química  
Facultad de Química UNAM, 1977-81

### Experiencia Profesional

- Profesor Titular B, definitivo, Departamento de Física y Química Teórica  
Facultad de Química UNAM, desde el 1 de enero de 1999.
- Estancia Sabática en el grupo de Química Teórica, Departamento de Química  
CINVESTAV, México DF, de febrero de 2008 a enero de 2009.
- Profesor-Investigador Titular. Université de Paris XI  
Centre Scientifique d'Orsay (Francia), octubre 1991 a diciembre 1998.
- Investigador Titular A. Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM  
del 16 de julio de 1990 al 15 de octubre de 1991.
- Coordinador de Formación de Recursos Humanos  
Instituto de Investigaciones en Materiales – UNAM.  
del 16 de abril al 30 de septiembre de 1991.
- Investigador de tiempo completo. Centro de Investigación y Desarrollo CONDUMEX  
Carretera a San Luis Potosí, Z.I. Benito Juárez, Querétaro, Qro. de julio de 1988 a mayo de 1990.
- Profesor Asociado A de tiempo completo.



---

Sección de Físicoquímica, FES-Cuautitlán, UNAM. de marzo de 1982 a junio de 1984.

- Ayudante de Profesor.  
Facultad de Química, UNAM, de noviembre de 1981 a marzo de 1984.

## Nombramientos y Comisiones

### Activas

- Coordinador del Programa de Maestría y Doctorado en Ciencias Químicas, UNAM. desde agosto 2017.
- Investigador Nacional: Sistema Nacional de Investigadores CVU: 8392, (CONACYT, México)
  - Nivel II: desde 1999. (última renovación 2021-2025)
  - Nivel I: desde julio de 1989 hasta junio de 1992.

### Terminadas

- Miembro del Comité Académico del Programa de Maestría y Doctorado en Ciencias Químicas, UNAM. desde noviembre de 2016 hasta julio 2018.
- Miembro ordinario de la Comisión Evaluadora del PRIDE y PAIPA de la Facultad de Estudios Superiores- Cuautitlán, (desde diciembre 2011 a 2014)
- Miembro de la Comisión de Supercómputo de DGTIC-UNAM 2003-2007
- Miembro de la Comisión Revisora del PRIDE y PAIPA de la Facultad de Ciencias, (mayo 2010-abril 2011)
- Miembro de la Comisión Dictaminadora de Química de la Facultad de Estudios Superiores- Cuautitlán (2007-2011)
- Miembro ordinario de la Comisión Evaluadora del PRIDE y PAIPA de la DGSCA (DGTIC), (2002-2009)
- Jefe del Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química, UNAM. desde el 15 de junio de 2001 hasta el 31 de marzo de 2006.



- 
- Miembro del Consejo Interno Asesor de Estudios de Posgrado, FQ-UNAM desde el 20 de junio de 2001 hasta junio 2005
  - Presidente del SAO de fisicoquímica, Posgrado en Química, UNAM. desde el 28 de agosto de 2000. nombramiento por dos años.
  - Miembro del Comité Académico del Posgrado en Química, UNAM. desde el 28 de agosto de 2000. nombramiento por elección por dos años.
  - Miembro del SPIED del Posgrado en Química, UNAM. desde el 12 de noviembre de 2001. nombramiento por elección por dos años.



---

## Área de Investigación y Productividad

### Temas

- Estructura Electrónica y Magnéticas de Nanopartículas mediante métodos de la Mecánica Cuántica
- Hidrógeno en metales, compuestos intermetálicos

En los últimos años hemos estudiado las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de cúmulos pequeños en los que se presentan propiedades magnéticas de posible interés tecnológico. Uno de los aspectos que han retenido nuestra atención es establecer una metodología confiable basada en estudios teóricos de la estructura electrónica mediante técnicas de la teoría de funcionales de la densidad, como de métodos fundados en la metodología Hartree-Fock y sus derivados. Paralelamente, con el objeto de acceder eficientemente a sistemas con número de átomos mayores (>50), hemos investigado la confiabilidad de estudios de dinámica molecular ab initio.

Estas investigaciones en cúmulos pequeños de metales de transición han mostrado que estructuras pertenecientes a diferentes superficies de energía potencial caracterizadas por una multiplicidad de espín, pueden compartir la misma ventana de energía. Esto significa que una estructura particular puede modificar su estado de espín, siempre que el mecanismo que conecte dos superficies sea operativo. En la síntesis en fase gaseosa, la nucleación ocurre rápidamente a temperatura finita. Así, un número considerable de estructuras, distintas únicamente por pequeñas diferencias en energías de cohesión pueden coexistir y eventualmente modificar sus propiedades magnéticas.

Con todas estas metodologías hemos podido estudiar con gran confianza uno de los problemas que estimamos hoy día claves para la correcta simulación de sistemas magnéticos. Es ya conocido, y es una de las complejidades del estudio de nanopartículas, la presencia de isómeros y homotopos en gran cantidad dentro de una ventana de energía muy estrecha. Esto hace que las geometrías estables a temperatura finita sean en realidad una mezcla termodinámica, toda vez que las transiciones entre las diferentes geometrías estén permitidas. Más aún, el estado magnético de las nanopartículas estudiadas puede ser una mezcla de diferentes estados de espín como ya hemos demostrado. Es necesario mencionar los posibles mecanismos que conectan dos superficies de energía potencial pertenecientes a distintas multiplicidades de espín. En los procesos fotofísicos estándar, dos posibles mecanismos para transiciones no radiativas son comúnmente considerados: conversión interna que involucra un mecanismo de acoplamiento vibracional y un cruzamiento intersistema (IC) que permite un cambio en la multiplicidad de espín a través de un mecanismo de acoplamiento espín-órbita (SO). La probabilidad de una transición IC es proporcional a los elementos de matriz de SO que conectan las funciones de onda de  $n$ -electrones del estado inicial y el estado final que pertenecen cada una a distintas multiplicidades de espín. Este cálculo requiere una aproximación particular del hamiltoniano relativista. Esto es justamente lo que hemos estudiado exitosamente para cúmulos pequeños.



---

Productividad

Publicaciones científicas = 64

Proyectos financiados = 9

Tesis dirigidas

Licenciatura = 18

Maestría = 8

Doctorado = 1

Presentaciones en congresos 56



---

## Anexos

### Proyectos Financiados

- PAPIIT-DGAPA: 2018-2020: IN-103218
- PAPIIME-DGAPA: 2015-2017: PE-108015
- PAPIIT-DGAPA: 2016-2017: IN-113116
- PAPIIT-DGAPA: 2013-2015: IN-112413
- PAPIIT-DGAPA: 2009-2011: IN-100809
- ICYTDF: 2006-2009
  - Dr. Andreas M. Köster (CINVESTAV)
  - Dr. Patrizia Calaminici (CINVESTAV)
  - Dr. Emilio Orgaz (FQ-UNAM)
- PAPIIT-DGAPA: 2006-2008: IN-101106
- PAPIIT-DGAPA: 2003-2005: IN-102202
- CONACYT: 2000-2002: No. 34326-E

### Formación de Recursos Humanos

#### Estancias Postdoctorales

- Dra. Marisol Bermúdez Montaña  
de agosto 2018 a julio 2019  
DGAPA-UNAM
- Dr. Eliel Carvajal Quiroz,  
de febrero 2007 a enero 2008  
PROFIP-UNAM

#### Doctorado

- Omar López Estrada.  
Doctorado en Ciencias e Ingeniería de Materiales  
Estudio de la estructura electrónica y magnética de agregados Ni y Al.



---

examen de grado: 20 de junio de 2016

### Maestría

- Julio César Hernández Camacho  
Maestría en Ciencias Químicas  
Estudio Teórico-Experimental de la Hidrodefluoración Catalítica de compuestos Fluoro aromáticos con Trietilfosfina electroquímicamente Regenerada  
Examen de Grado: 23 de noviembre de 2021
  
- José María Castillo Robles  
Maestría en Ciencias Químicas  
Propiedades Magnéticas de Cúmulos de Pt13 analizadas por medio del espectro teórico de Dicroísmo Circular Magnético de Absorción de Rayos X  
Examen de Grado: 17 de septiembre de 2020.
  
- Isaac Leonardo Huidobro Meezs  
Maestría en Ciencias Químicas  
Estudio teórico de transiciones de espín en el cúmulo de Pt13  
Examen de Grado: 12 de junio de 2019.
  
- Itzel Pérez Trejo  
Maestría en Ciencias Químicas  
Estudio de la Estabilidad de Agregados Bimetálicos de Ni-Mg  
Examen de Grado: 10 de diciembre de 2018
  
- Mario Ernesto Vázquez Villavicencio.  
Maestría en Ciencias Químicas  
Estudio Teórico de Cúmulos Metálicos mediante el uso de Potenciales Semiclásicos y Métodos de Optimización Global.  
examen de grado: 25 de junio de 2013.
  
  
- Otto Hahn Herrera  
Maestría en Ciencias e Ingeniería de Materiales  
Investigación de la ocupación de hidrógeno en los compuestos intermetálicos  $RNi_4Mg$  ( $R=Y, La, Ce, y Nd$ ) y sus hidruros.  
examen de grado: 25 de noviembre de 2010
  
- Rodrigo Castañeda Rivera  
Maestría en Ciencias Químicas  
Estructura electrónica y propiedades magnéticas de hidruros con enlace direccional metal-hidrógeno





---

examen de grado: 27 de junio de 2008

- Q. José Luis Carreón Macedo  
Maestría en Química, fisicoquímica  
Estudio de la Interacción de 4,6 Dimetildibenzotiofeno con  $\text{CH}_3\text{Hg}^+$  mediante métodos de química cuántica  
examen de grado: 25 de abril de 2002.

### Licenciatura

Sebastián Mauricio Fuentes Ordóñez

Licenciatura en Química

Facultad de Química, UNAM.

Elaboración de potenciales modelo para el estudio de nanoestructuras.

27 de marzo se 2023.

- Gabriela Fundora Galano  
Licenciatura en Química  
Facultad de Química, UNAM.  
Estudio Computacional sobre las Propiedades Estructurales Magnéticas y Termodinámicas de Cúmulos Bimetálicos  
27 de noviembre se 2017.
- José María Castillo Robles  
Licenciatura en Química  
Facultad de Química, UNAM.  
Propiedades Ópticas de Nanopartículas de Níquel soportadas en la superficie de  $\text{TiO}_2$  Rutilo (110)  
14 de noviembre de 2017.
- Isaac Leonardo Huidobro Meezs  
Licenciatura en Química  
Facultad de Química, UNAM.  
Estudio teórico del acoplamiento espín-órbita en cúmulos metálicos  
7 de junio de 2017.
- Aldo Alan Facundo Ávila  
Licenciatura en Química  
Facultad de Química, UNAM.  
Estudio Teórico del Mecanismo de la Reacción de Hidrodefluoración de Perfluoroarenos con Trietilfosfina.  
6 de junio de 2017.
- Luis Itzá Vázquez Salazar



- 
- Licenciatura en Química  
Facultad de Química, UNAM.  
Descripción del efecto túnel en cinética química utilizando modelos analíticos.  
10 de enero de 2017
- Itzel Pérez Trejo  
Licenciatura en Química  
Facultad de Química, UNAM.  
Estudio del Efecto de Sustituyente en  $\text{Ru}[5,5'\text{Ru-salen}2\text{en}](\text{PPH}_3)^+$  y su Actividad Catalítica.  
10 de junio de 2016
  - Luis Ortiz Mena Montes de Oca  
Licenciatura en Química  
Facultad de Química, UNAM.  
Validación del algoritmo de Kabsch para el estudio de nanopartículas.  
7 de diciembre de 2015
  - Emilio Pradal Velázquez.  
Licenciatura en Química  
Facultad de Química, UNAM.  
Validación de nuevos funcionales de la densidad electrónica en sólidos cristalinos.  
21 de febrero de 2014
  - Martha Vianey Salas Aguilar.  
Licenciatura en Química  
Facultad de Química, UNAM.  
Estudio de la Irregularidad del Criterio de Westlake y de la Interacción H---H, en Hidruros Intermetálicos del tipo  $\text{LaNiInH}_{4/3}$   
29 de julio de 2013
  - Mario Ernesto Vázquez Villavicencio.  
Licenciatura en Química  
Facultad de Química, UNAM.  
Hidruros Ligeros Nanoestructurados: las etapas iniciales del proceso de nucleación.  
9 de junio de 2011
  - Víctor Gonzalo Ruiz López  
Licenciatura en Ingeniería Química  
Facultad de Química, UNAM.  
Quimisorción disociativa de hidrógeno en una superficie de níquel.  
26 de junio de 2008
  - Otto Hahn Herrera  
Licenciatura en Química



---

Facultad de Química, UNAM.

Reinvestigando la reducción de nitros aromáticos con sulfuros:  
propuesta de un mecanismo de reacción para la reducción de Zinin  
30 de junio de 2008

- Abigail Membrillo  
Licenciatura en Química  
Estudio de las Propiedades Físicoquímicas de los Hidruros Metálicos MBX<sub>4</sub>  
(M=Li,K, Rb, Cs; X=H,D) por Métodos Computacionales  
20 de junio de 2006
- Rodrigo Castañeda Rivera  
Licenciatura en Ingeniería Química  
Facultad de Química, UNAM.  
Estudio Mecánico Cuántico de Hidruros Ternarios de Interés Tecnológico  
7 de noviembre de 2005
- César Augusto Cardoza Gutiérrez  
Licenciatura en Química. Mención honorífica  
Facultad de Química, UNAM.  
Tesis. Estudio Mecánico-cuántico del mecanismo de reacción para la síntesis de cumeno a partir de benceno y alcohol isopropílico.  
17 de agosto de 2005
- Enrique Ruiz Trejo  
Licenciatura en Química  
Facultad de Química, UNAM.  
Tesis. Estudio de las propiedades estructurales y de transporte de las soluciones sólidas Ln<sub>1-x</sub>Pr<sub>x</sub>Ba<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub> (Ln= Y, Ho y Er).  
octubre de 1991
- Jaime Moreno Navarrete.  
Licenciatura en Química  
Facultad de Química, UNAM  
Trabajo Monográfico de Actualización.  
Manufactura de Vidrio Óptico para la Tecnología de la Instrumentación  
marzo de 1990.

## Seminarios y pláticas

(Desde 1 de enero de 1999)

- Seminario del Departamento de Química Inorgánica y Nuclear,



---

Posible coordinación múltiple  $\text{Eta}^2\text{-H}_2$  en  $\text{Nd}_5\text{Fe}_2\text{B}_6\text{H}_5$

11 de agosto de 2017, USAI, FQ-UNAM, UNAM

- Seminario del Departamento de Física y Química Teórica  
Estudio de las propiedades de cúmulos de Níquel-Aluminio: hacia el diseño de nanomateriales con propiedades orientadas  
31 de mayo de 2016, USAI, FQ-UNAM, UNAM
- “L'hydrogène: un combustible de synthèse pour l'avenir”  
Fête de Sciences, Lycée Franco-Mexicain, 10 de febrero de 2011.
- Almacenamiento eficiente de Hidrógeno: presente y perspectivas.  
Auditorio A de la Facultad de Química de la UNAM  
29 de octubre de 2010,
- Hydrogen bridging characterization in the polynuclear  $\text{La}_2\text{MgNi}_2\text{H}_8$  hydride:  
differentiation of the hydrogen sites by evaluating the defect formation energy  
Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán  
23 de abril de 2008
- Brillouin zone integration schemes and CCM vs. a full-periodic formulation of a LCAO wave-  
function construction, seminario de trabajo, Química Teórica, Departamento de Química,  
CINVESTAV, 1 de abril de 2008.
- Estudio sistemático de la estructura electrónica de hidruros ternarios basados en rutenio,  
Seminario Departamental, Departamento de Química, CINVESTAV, 17 de abril de 2008.
- Conferencia “Química Teórica” impartida en la Universidad La Salle, 4 de abril de 2006
- Materiales para Almacenamiento Eficiente de Hidrógeno. Seminario del grupo de Simulación  
Molecular del Instituto Mexicano del Petróleo, 15 octubre 2004.
- Propiedades Generales de Materiales para Almacenamiento Eficiente de Hidrógeno.,  
Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química, UNAM.  
11 de junio de 2004
- Hidrogeno, combustible limpio: La Ciencia fuera del Aula, Facultad de Química, UNAM  
24 de octubre de 2002.
- Mesa redonda: Seminario de Cómputo Científico  
DGSCA-Facultad de Química  
11 de julio de 2002.



- 
- Seminario UAM-I. Martes 27 de noviembre de 2001.
  - Entrevista en La Jornada aparecida en Septiembre 2002: “Las nuevas tecnologías de la llamada corriente verde”
  - Entrevista en GACETA–UNAM del 17 de Septiembre de 2002- Numero: 3,573
  - Seminario Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán,: Físicoquímica de Hidruros Metálicos 24 de agosto de 2001
  - Mesa redonda: Semana de la Química: Desarrollo de la Química, cuatro áreas-cuatro enfoques 19 de junio de 2001
  - Plática: Polímeros conductores: IIN-(departamento de polímeros) 2 de marzo de 2001
  - Plática radiofónica: Entrevista Radio-UNAM: Hidrógeno: energías alternativas 19 de diciembre de 2000.
  - Plática: Polímeros conductores: La Ciencia fuera del Aula Facultad de Química, UNAM 16 de noviembre 2000
  - Seminario Centro de Investigación en Materiales Avanzados CIMAV-Chihuahua 25 octubre 2000

## Organización de Eventos Científicos

- Miembro del Comité Nacional de la Decimoséptima Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. Toluca, Estado de México, noviembre de 2019.
- Miembro del Comité Nacional de la Decimoséptima Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. Monterrey, Nuevo León, noviembre de 2018.
- Miembro del Comité Nacional de la Decimosexta Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. Puebla, Puebla, noviembre de 2017.
- Miembro del Comité Local de la Decimosegunda Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. Juriquilla, Querétaro, noviembre de 2013.



- 
- Miembro del Comité Organizador de Química Teórica para el Siglo XXI dentro de la Serie: Coloquios de Química
  - Fundamental. Año Internacional de la Química 2011. 19 al 21 de septiembre de 2011. Facultad de Química, UNAM
  - Miembro del Comité Organizador de la Sexta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. San Miguel Regla, Hidalgo, noviembre de 2007.
  - Miembro del Comité Organizador de la Cuarta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. CIMAV, Chihuahua, 17-19 de noviembre de 2005.
  - Miembro del Comité Organizador de la Primera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. UAEM, Cuernavaca, 5-7 de diciembre de 2002.



---

## Publicaciones Científicas

1. Laura Esmeralda Mendoza, José Manuel Hernández, José Gonzalo González, Emilio Orgaz, Octavio Lozada and Ignacio Alejandro Figueroa  
Crystallization Kinetics of Hypo, Hyper and Eutectic Ni–Nb Glassy Alloys  
*Metals* **12**, 808. (2022)  
doi:10.3390/met12050808
2. M. Rodríguez-Arcos, M. Bermúdez-Montaña, J.M. Arias, J. Gómez-Camacho, E. Orgaz and R. Lemus  
Algebraic discrete variable representation approaches: application to interatomic effective potentials *Molecular Physics*, **119**, e1876264, (2021)  
doi:10.1080/00268976.2021.1876264
3. Marisol Bermúdez-Montaña, Marisol Rodríguez-Arcos, Renato Lemus, José M. Arias, Joaquín Gómez-Camacho and Emilio Orgaz  
Algebraic DVR Approaches Applied to Describe the Stark Effect  
*Symmetry* **12**, 1719 (2020)  
doi:10.3390/sym12101719
4. Omar López-Estrada, Emilio Orgaz and Francesca Baletto  
Interdependence of Shape and Magnetic Properties in Al nanoparticles doped with Ni and Pt  
*Journal of Material Chemistry C* **8**, 2533-2541 (2020)  
DOI: 10.1039/C9TC04013G
5. Isaac L. Huidobro-Meezs, José María Castillo-Robles, and Emilio Orgaz  
Effect of tunneling assisted intersystem crossing on the magnetic behavior of the Pt<sub>13</sub> cluster  
*J. Phys. Chem. C* **123**, 19887–19893(2019)  
DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b02294
6. Aldo Facundo, Alma Arévalo, Gabriela Fundora-Galano, Marcos Flores-Alamo, Emilio Orgaz and Juventino García  
Hydrodefluorination of Functionalized Fluoroaromatics with Triethylphosphine: A Theoretical and Experimental Study.  
*New Journal of Chemistry*, 43, 6897--6908(2019)  
doi: 10.1039/C9NJ00721K
7. Gabriela Fundora-Galano and Emilio Orgaz  
Structural stability of binary Pd<sub>34</sub>-nMn (M = Cu, Ag, Au) clusters  
*Theoretical Chemistry Accounts* 137 87 (2018).  
doi.org/10.1007/s00214-018-2268-2



- 
8. Jose M. Castillo-Robles and Emilio Orgaz  
Structural and Optical Properties of Ni atoms and Ni<sub>55</sub> cluster Adsorbed on a Rutile TiO<sub>2</sub> (110) Surface  
Theoretical Chemistry Accounts 137 31 (2018).  
[doi.org/10.1007/s00214-018-2211-6](https://doi.org/10.1007/s00214-018-2211-6)
  9. Isaac L. Huidobro-Meezs and Emilio Orgaz  
Theoretical study of the spin competition in small sized Aluminum clusters  
J. Phys. Chem. C, 121, 11872-11879 (2017)
  10. Omar López-Estrada, Sarai López-Olay, Andrea Aburto and Emilio Orgaz  
Unexpected High Spin Polarization in Cr<sub>4</sub> Cluster  
J. Phys. Chem. C, 120, 23892-23897 (2016)
  11. Omar López-Estrada and Emilio Orgaz  
Theoretical Study of the Spin Competition in Small-Sized Al Clusters  
J. Phys. Chem A 119, 11941 (2015)
  12. Omar López-Estrada and Emilio Orgaz  
Transition states, structural and magnetic properties of small-sized nickel clusters  
Phys. Rev. B 91 075428 (2015)
  13. Andrea Aburto, Emilio Orgaz  
Hydrogen site occupation and electronic structure in the La<sub>2</sub>Ni<sub>2</sub>In intermetallic and hydrides  
Int. Journal of Quantum Chemistry, 112, 3606–3611(2012)
  14. Emilio Orgaz, Andrea Aburto  
Hydrogen-hydrogen interaction in the LaNiInH<sub>4/3</sub> hydride  
Int. Journal of Quantum Chemistry, 112, 3490–3497 (2012)
  15. Mario Vázquez-Villavicencio, Andrea Aburto, Emilio Orgaz  
The first steps of the Li-B-H cluster formation.  
Int. Journal of Quantum Chemistry 112, 1507–1513 (2012)
  16. Andreas Koster, Patrizia Calaminici, Emilio Orgaz, Debesh Roy, J. Ulises Reveles, Shiv Khanna  
On the ground state of Pd<sub>13</sub>.  
Journal of the American Chemical Society, 133 12192–12196 (2011).
  17. Eliel Carvajal, Otto Hahn-Herrera, Emilio Orgaz  
Density functional investigation of silver, palladium and silver-palladium small sized clusters  
Rev. Mex. Fis. 55, 418 (2009)
  18. Otto Hahn-Herrera, Andrea Aburto, Emilio Orgaz  
Hydrogen occupancy in the RNi<sub>4</sub>Mg (R=Y, La, Ce, and Nd) intermetallic compounds and hydrides  
Phys. Rev. B 80, 165118 (2009)





19. Emilio Orgaz, Andrea Aburto  
Electronic Structure of Ternary Ruthenium-Based Hydrides  
J. Phys. Chem. C 112, 15586 (2008)
20. Andrea Aburto, Emilio Orgaz  
Ab initio electronic structure of the eclipsed and staggered conformations of the k-(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu[N(CN)<sub>2</sub>]Br organic superconductor  
Phys. Rev. B 78, 113104 (2008)
21. Annia Galano, Emilio Orgaz  
Stability and electronic structure of Si, Ge, and Ti substituted single walled carbon nanotubes  
Phys. Rev. B 77, 045111 (2008)
22. Emilio Orgaz  
Electronic structure of the complex alkali-transition metals ternary hydrides A<sub>2</sub>TH<sub>4</sub> (A=Na,K, T=Pt,Pd).  
Phys. Rev. B 76 153105 (2007)
23. Emilio Orgaz  
Hydrogen bridging characterization in the polynuclear La<sub>2</sub>MgNi<sub>2</sub>H<sub>8</sub> hydride.  
J. Phys. Chem C 111, 12391 (2007)
24. Andrea Aburto, Emilio Orgaz  
Ab initio structural and electronic investigation of magnetic RNiSn (R=La,Ce,Pr,Nd) intermetallics and their hydrides  
Phys Rev B 75, 045130 (2007)
25. Emilio Orgaz, Andrea Aburto  
Hydrogen Bonding in the LaNi<sub>3</sub>BH<sub>3</sub> hydride  
J. Chem. Phys. 125, 144708 (2006)
26. E. Orgaz, A. Membrillo, R. Castañeda, A. Aburto  
Electronic Structure of Ternary Hydrides based on Light Elements  
J. Alloys and Compounds, 404, 176 (2005)
27. E. Orgaz, A. Aburto  
Bonding properties of the new Zintl-phase hydrides  
Int. Journal of Quantum Chemistry, 101, 783-792 (2005)
28. E. Orgaz, J. Hernández-Trujillo  
Chemical Bonding in Ternary Magnesium Hydrides  
Int. Journal of Quantum Chemistry 94, 150 (2003)
29. E. Orgaz



- 
- The Electronic Structure of the Europium-Palladium Hydrides.  
J. Alloys and Compounds, 356, 191 (2003)
30. E. Hernández-Lemus, E. Orgaz  
Hysteresis in nonequilibrium steady states: the role of dissipative couplings  
Rev. Mex. Fís. 48 S2 38-45 (2002)
31. E. Orgaz, M. Gupta  
Electronic structure of the new manganese ternary hydride Mg<sub>3</sub>MnH<sub>7</sub>.  
J. Alloys and Compounds, 330, 323 (2002).
32. E. Orgaz  
The electronic structure of the Laves phase intermetallics LnM<sub>2</sub> (Ln=Y, La-Lu, M=Mg,Al) and the LaMg<sub>2</sub>H<sub>7</sub> and CeMg<sub>2</sub>H<sub>7</sub> hydrides.  
J. Alloys and Compounds, 322, 45 (2001).
33. E. Orgaz, M. Gupta  
Chemical Bonding Features of the Ternary Alkali-metal Platinum and Palladium Hydrides  
Int. Journal of Quantum Chemistry, 80, 141 (2000).
34. E. Orgaz  
Electronic Structure of Magnetic Ternary Alkali Metal-Manganese Hydrides  
Physical Review B 61, 7989 (2000).
35. E. Orgaz, M. Gupta  
Electronic Structure of the BaReH<sub>9</sub> Hydride.  
J. Alloys and Compounds 293, 217 (1999).
36. P. Jonnard, F. Vergand, C. Bonnelle, E. Orgaz, M. Gupta  
Electron distribution in MgO probed by X-ray emission.  
Physical Review B 57, 12111 (1998).
37. E. Orgaz, V. Mazel, M. Gupta  
Internal Pressure Effect in the Series of Perovskite Structure Hydrides: APdH<sub>3</sub> (A=Sr, Eu, Yb).  
J. Alloys and Compounds 253, 330 (1997).
38. E. Orgaz, M. Gupta  
Electronic Structure Investigation of the A<sub>2</sub>PtH<sub>4</sub> Hydrides (A=Na, K) containing [PtH<sub>4</sub>] complexes.  
J. Alloys and Compounds 253, 326 (1997).
39. E. Orgaz, V. Mazel, M. Gupta  
Electronic Structure and Electron-Phonon Coupling in the Stoichiometric and defective MPdH<sub>3</sub> (M=Ca, Sr, Eu, Yb) Hydrides.  
Physical Review B 54, 16124 (1996).



- 
40. E. Orgaz, M. Gupta  
Investigation of the electronic structure of the new quaternary hydride PdSr<sub>2</sub>LiH<sub>5</sub>.  
J. Alloys and Compounds 240, 107 (1996).
  
  41. R. Balawender, M. Gupta, E. Orgaz, L. Komorowski.  
Electronic structure of KMgH<sub>3</sub>, KMgH<sub>2</sub>F, KMgF<sub>3</sub> with the perovskite structure.  
Acta Physica Polonica A 88, 1133 (1995).
  
  42. E. Orgaz, M. Gupta  
Electronic Structure of Perovskite-Derived Hydrides.  
J. Alloys and Compounds 231, 147 (1995).
  
  43. E. Orgaz, M. Gupta  
Electronic Structure of Lithium-based Anti-perovskite Hydrides.  
J. Alloys and Compounds 209, 159 (1994).
  
  44. E. Orgaz, M. Gupta  
The Electronic Properties of Intermetallic Hydrides with the K<sub>2</sub>PtCl<sub>6</sub> Structure.  
J. Phys.: Condensed Matter 5, 6697 (1993).
  
  45. E. Orgaz  
A correlation between the critical Pr concentration and structural parameters in  
Ln<sub>1-x</sub>Pr<sub>x</sub>Ba<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub>.  
Proc. of the III ECERS (European Ceramic Society)  
Volume 2, p. 679 Properties of Ceramics  
ed. P. Durán, J.F. Fernández. (Faenza Editrice Ibérica, España, 1993).
  
  46. E. Orgaz, M. Gupta  
Trends in the electronic structure of intermetallic hydrides: M<sub>2</sub>M'H<sub>6</sub> (M=Mg, Ca, Sr, M'= Fe, Ru,  
Os).  
Zeitschrift für Physikalische Chemie Neue Folge 181, 535 (1993).
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  47. Huanosta, E. Orgaz  
Analysis of the Dielectric Parameters and Ion Hopping Rates in the  $\beta$ -LnNb<sub>3</sub>O<sub>9</sub> Phases  
(Ln=La, Ce, Pr and Nd).  
Solid State Ionics 62, 69 (1993).
  
  
  48. E. Orgaz, E. Ruiz-Trejo  
On the superconductivity suppression in Ln<sub>1-x</sub>Pr<sub>x</sub>Ba<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub>.  
Physica C 194, 76 (1992).
  
  
  49. G. Tavizón, E. Orgaz, R. Escudero.



- 
- Structural and Electronic Properties of  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_4$  .  
Physica-C, 185-189, 571 (1991).
50. E. Orgaz, A. Huanosta.  
Electric Transport Properties of the beta- $\text{LnNb}_3\text{O}_9$  phases (Ln=La, Ce, Pr and Nd).  
J. Solid State. Chem. 97, 65 (1992).
51. E. Orgaz, J. A. Cogordan.  
Electronic Structure Calculation of the Pr- $(\text{Cu}_4\text{O}_4)_2$  and Y- $(\text{Cu}_4\text{O}_4)_2$  clusters.  
Mat. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 206, 201 (1991)
52. M. A. Ocampo, E. Orgaz, T. Akachi.  
Ag- $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  Superconducting Wires.  
Proc. of XI Winter Meeting in Low Temperature Physics.  
J.A.Cogordan, E.Sansores, T.Akachi, A.A.Valladares ed., (World Scientific, Singapore, 1991).
53. E. Orgaz, M. A. Ocampo, T. Akachi.  
High-Tc Superconducting Filaments Clad with Low Melting Point Alloys.  
Proc. of XI Winter Meeting in Low Temperature Physics.  
J.A.Cogordan, E.Sansores, T.Akachi, A.A.Valladares ed., (World Scientific, Singapore, 1991)
54. M. A. Ocampo, E. Orgaz, T. Akachi.  
Effect of Processing Parameters and Postprocessing Thermal Cycling on the  
Superconducting Properties of Ag/ $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  Wires.  
Mat. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 169 (1990).
55. P. Dantzer, E. Orgaz  
Hydriding Kinetics and the Problem of Thermal Transfer.  
Zeitschrift für Physikalische Chemie Neue Folge 164, 1267 (1989).
56. P. Dantzer, E. Orgaz, V.K. Sinha.  
Influence of Hysteresis on the Thermodynamic Properties of the  $\text{LaNi}_5\text{-H}_2$  System.  
Zeitschrift für Physikalische Chemie Neue Folge 163, 141 (1989).
57. P. Dantzer, E. Orgaz.  
Hydriding kinetics: The role of thermal transfer.  
J. Less-Common Met. 147, 27 (1989).
58. E. Orgaz, M. Gupta.  
Theoretical Study of the X-rays Absorption Spectra of  $\text{Mg}_2\text{FeH}_6$ .  
J. Less-Common Met. 130, 293 (1987).
59. P. Dantzer, E. Orgaz, A. Guillot.
-



---

Approche Fondamentale des Machines Chimiques à Hydrures.  
in Proceedings of the Int. Symposium on High Efficiency Chemical Heat Pumps.  
B. Spinner, editor., Vol. 2, p 255, (1988).

60. E. Orgaz, P. Dantzer.  
Thermodynamics of the Hydride Chemical Heat Pump (III): Conditions for Multistage Operation.  
J. Less-Common Met. 131, 385 (1987).
61. P. Dantzer, E. Orgaz.  
Thermodynamics of the Hydride Chemical Heat Pump (II): How to select a pair of alloys.  
Int. J. of Hydrogen Energy 11, 797 (1986).
62. P. Dantzer, E. Orgaz  
Thermodynamics of the Hydride Chemical Heat Pump: Model.  
Journal of Chemical Physics. 85, 2961 (1986).
63. J. Keller, M. Castro, C. Amador, E. Orgaz  
Theoretical Analysis of the Positive Muon Knight Shift in Cd and Zn.  
Hyperfine Interactions 8, 483 (1981).
64. Pisanty, E. Orgaz, C. de Teresa, J. Keller.  
The Electronic Structure of Magnetic UTe<sub>2</sub>.  
Physica B 102, 78 (1980).

#### Divulgación

- Emilio Orgaz, Los Nobel de Química y Física 2007, Educación Química, 19[1], 114, 2008



---

## Congresos y Reuniones

### Nacionales

1. XVII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica  
22-24 e noviembre de 2018, Monterrey, Nuevo León, México
  - José María Castillo-Robles, Isaac Huidobro-Meez, Emilio Orgaz  
cartel. Estudio teórico de las propiedades magnéticas de cúmulos de Pt<sub>13</sub>.
  - Gabriela Fundora-Galano, Emilio Orgaz  
cartel. Estabilidad Estructural de Cúmulos Binarios de Pd<sub>34</sub>-nMn (M = Cu, Ag, Au)
  - Isaac L. Huidobro-Meez, José M. Castillo-Robles, Emilio Orgaz  
cartel. Competencia de espín en Pt<sub>13</sub>. Mecanismo de transición y efectos en el comportamiento magnético.
  
2. XVI Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica  
16-18 de noviembre de 2017, Puebla, Puebla, México
  - Sophie Tencé, Olivier Isnard, Andrea Aburto, Emilio Orgaz  
cartel. Posible Coordinación Múltiple  $\eta^2$ -H<sub>2</sub> en Nd<sub>5</sub>Fe<sub>2</sub>B<sub>6</sub>H<sub>5</sub>,
  - Aldo Alán Facundo Ávila, Gabriela Fundora Galano, Juventino García, Emilio Orgaz  
cartel. Mecanismo de la Reacción de Hidrodefluoración de Perfluoroarenos: Reacción Libre de Metales de Transición,
  - Isaac L. Huidobro-Meez, Emilio Orgaz  
cartel. Competencia de espín en cúmulos de Al<sub>6</sub> mediada por un mecanismo espín-órbita
  - Itzel Pérez, Emilio Orgaz  
cartel. Estudio de la Estabilidad de Cúmulos Bimetálicos de NiMnAg.
  - Gabriela Fundora Galano, Emilio Orgaz, Omar Estrada López  
cartel. Estudio Computacional sobre las Propiedades Estructurales, Magnéticas y Termodinámicas de Cúmulos Bimetálicos.,
  - José María Castillo Robles, Emilio Orgaz  
cartel. Propiedades Magnéticas y Ópticas de Pt<sub>13</sub> y Pd<sub>13</sub>.,
  
3. Decimoquinta Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica.  
Merida, Yucatan, 17 al 19 de noviembre 2016.
  - Emilio Orgaz, Sarai López-Olay, Omar López-Estrada  
cartel. Propiedades magnéticas de agregados binarios Ag-Ni



- 
- Omar López–Estrada, Emilio Orgaz, Francesca Baletto  
cartel. Transformaciones estructurales en cúmulos metálicos
  - Gabriela Fundora-Galano, Omar López Estrada, Emilio Orgaz  
cartel. Estudio termodinámico y estructural mediante dinámica molecular Born-  
Oppenheimer del cúmulo Al<sub>37</sub>+
  - Isaac Huidobro Meezs, Omar López-Estrada, Emilio Orgaz  
"Estudio de transiciones de fase en cúmulos de Ga"
  - José María Castillo Robles, Omar López–Estrada, Emilio Orgaz  
"Propiedades ópticas de nanopartículas metálicas soportadas en superficies de TiO<sub>2</sub>"
4. Decimocuarta Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica.  
Tonalá, Jalisco, 19 al 21 de noviembre 2015.
- Omar López-Estrada y Emilio Orgaz  
Oral. Estructura Electrónica y Propiedades Magnéticas de Cúmulos Pequeños de Aluminio
5. Trigésima Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica.  
Morelia, Michoacán, 5 al 8 de noviembre 2014.
- Luis Ortiz-Mena, Andrea Aburto, Emilio Orgaz  
Oral. Validación del algoritmo de Kabsch para la discriminación de homotopos obtenidos por  
muestreo estadístico
6. Duodécima Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica.  
Juriquilla, Queretaro, 13 al 16 de noviembre 2013.
- Emilio Pradal, Jorge Martin del Campo, José Luis  
Gázquez, Alberto Vela, Sam B. Trickey, Emilio Orgaz  
Validación de nuevos funcionales de la densidad electrónica en sólidos cristalinos
7. Undécima Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica.  
Toluca, E. de México, 8-10 de noviembre de 2012.
- Otto Hahn Herrera, Emilio Orgaz, Andreas Köster y Bernardo Zúñiga Altamirano.  
Implementación del Hamiltoniano espin-órbita monoelectrónico en  
deMon2k
  - Mario Ernesto Vázquez Villavicencio y Emilio Orgaz.  
Optimización global de nanocúmulos metálicos
8. Décima Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica.  
Pachuca, Hidalgo, 10-12 de noviembre de 2011.



- 
- Emilio Orgaz y Andrea Aburto,  
Evidencia de una interacción atractiva hidrógeno-hidrógeno en hidruros intermetálicos

9. Novena Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica.  
Pachuca, Hidalgo, 11-13 de noviembre de 2010.

- Mario Vázquez-Villavicencio, Alejandra Fonseca y Emilio Orgaz,  
Hidruros ligeros nanoestructurados: las etapas iniciales del proceso de nucleación
- Hahn-Herrera, Jaime Arturo Pérez-Reséndiz, Emilio Orgaz,  
Ocupación de hidrógeno en los compuestos intermetálicos  $RMgNi_4$  ( $R=Y, La, Ce, Nd$ ) y sus hidruros

10. Séptima Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica.  
Xalapa, Veracruz, 13-15 de noviembre de 2008.

- Oral: Andrea Aburto y Emilio Orgaz.  
Estudio ab initio de la estructura electrónica de los confórmeros del superconductor orgánico  $k-(BEDT-TTF)_2Cu[N(CN)_2]Br$
- cartel: Otto Hahn y Emilio Orgaz.  
Reinvestigando la reducción de nitros aromáticos con sulfuros: propuesta de un mecanismo de reacción para la reducción de Zinin.

11. Conacyt-DFG Workshop. Free, Coordinated and Theory: Bridging Experiment and Theory, 1 a 3 de septiembre de 2008, Cinvestav, Méxio DF

12. Sexta Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica.  
San Miguel Regla, Hgo, 15-17 de noviembre de 2007.

- cartel: Andrea Aburto, Victor Ruiz López, Emilio Orgaz.  
Ab initio structural and electronic investigation of magnetic  $RNiSn$  ( $R=La, Ce, Pr, Nd$ ) intermetallics and their hydrides.
- cartel: Otto Hahn, Martin Iglesias Emilio Orgaz  
Estudio teórico de la apertura regioselectiva del anillo E del 17-metil-17-hidroxiesteroide
- cartel: Rodrigo Castañeda Rivera, Emilio Orgaz  
Estudio mecánico-cuántico de compuestos intermetálicos y sus hidruros,

13. Quinta Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica.  
UASLP, San Luis Potosí, 16-18 de noviembre de 2006.

- Ponencia: Otto Hahn, Martin Iglesias, Emilio Orgaz  
Hydrogen Bonding in the  $LaNi_3BH_3$  Hydride. con Andrea Aburto





- 
- cartel: Estudio teórico de la apertura regioselectiva del anillo E del 17alfa-metil-17beta-hidroxiesteroide,
  - cartel: Rodrigo Castañeda Rivera, Emilio Orgaz  
Estudio mecánico-cuántico de compuestos intermetálicos y sus hidruros

14. Cuarta Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica.  
CIMAV, Chihuahua, 17-19 de noviembre de 2005.

- Ponencia:, Emilio Orgaz  
Anclaje de moléculas orgánicas en superficies de grafito
- cartel: Emilio Orgaz  
Estudio ab-initio de la estructura electrónica del superconductor orgánico  $k\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{Cu[N(CN)}_2\text{]Br}$

15. Tercera Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica.  
BUAP, Puebla, 18-20 de noviembre de 2004.

- cartel:, Emilio Orgaz  
Electronic Structure of Ternary Hydrides based on Light Elements

16. Primera Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica.  
UAEM, Cuernavaca, 5-7 de diciembre de 2002.

- Ponencia:, Emilio Orgaz  
Extended Irreversible Thermodynamic Treatment of the Solid-Gas Absorption Hysteresis
- cartel:, Emilio Orgaz  
The Electronic Structure of the Europium-Palladium Hydrides.

17. IV Simposio Nacional de Estado Sólido.  
del 8 al 11 de julio de 1991, Tequisquiapan, Querétaro.

- cartel, Estudio preliminar de las propiedades estructurales y de transporte de las soluciones sólidas  $\text{Ln}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  ( $\text{Ln} = \text{Y, Ho y Er}$ ).'

18. I Taller Universitario de Superconductores de Alta Temperatura de Transición. del 15 al 16 de noviembre de 1990, Unidad de Seminarios 'Ignacio Chávez', UNAM.

- ponencia, "Técnicas de preparación de Muestras Superconductoras"

19. XXXIII Congreso de la Sociedad Mexicana de Física.



---

del 22 al 26 de octubre de 1990, Ensenada, Baja California,

- ponencia, "Energías de Red y Distribución de Carga en Cerámicas Metálicas y Superconductoras"

20. Reunión de Verano de Potencia 1990 del IEEE-México.

27 de julio de 1990, Acapulco, Gro.

- Conf. Plenaria: "Superconductores - posibles aplicaciones -"

21. Undécima Reunión de Física de Bajas Temperaturas.

del 13 al 15 de enero de 1989. Cocoyoc, Morelos.

- cartel, "High-Tc Superconducting Filaments Clad with Low Melting Point Alloys"
- cartel, "Ag-YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub> Superconducting Wires".

22. XXXII Congreso de la Sociedad Mexicana de Física.

del 23 al 27 de octubre de 1990, León, Guanajuato.

- cartel, "Elaboración de alambre superconductor a partir de filamentos cerámicos".
- cartel, "Producción de alambre superconductor mediante el estirado
- de preformas tubo de plata-relleno de polvo superconductor".

23. III Simposio Nacional de Estado Sólido.

del 9 al 13 de julio de 1989, Tequisquiapan, Querétaro.

- cartel, "Elaboración de alambre superconductor a partir de filamentos cerámicos".
- cartel, "Producción de alambre superconductor mediante el estirado de
- preformas tubo de plata-relleno de polvo superconductor".

24. XVI Congreso de la Sociedad Química de México.

Noviembre de 1981, Morelia, Michoacán.

- ponencia, "Enlace Químico y Superconductividad: Niobio".

25. XV Congreso de la Sociedad Química de México.

Octubre de 1980, Acapulco, Guerrero.

- ponencia: "Estructura Electrónica de Muones ( $\mu^+$ ) en Materia Condensada".
- Coautor en, "La Estructura Electrónica de UTe", "Electrones d en
- Calcio?", "Convergencia del formalismo de Dispersión Múltiple en Algebra Real medida por CDM's".



---

## Internacionales

1. XXVI International Materials Research Congress  
Omar López-Estrada, Emilio Orgaz, Francesca Baletto  
cartel: Magnetic Properties of AlNi and AlPt Nanoclusters  
Cancún, México, 20-25 de Agosto del 2017
2. XXVI International Materials Research Congress  
Itzel Pérez Trejo, Emilio Orgaz  
cartel: Structural Stability of NiMg bimetallic nanoalloys  
Cancún, México, 20-25 de Agosto del 2017
3. The 13th Femtochemistry Conference.  
Isaac L. Huidobro Meezs, Emilio Orgaz.  
cartel: Investigation of the Spin Competition in the Al<sub>6</sub> Cluster.  
Cancún, Q. Roo, México. 12-17 de Agosto de 2017
4. XXIV Int. Materials Research Congress, Symposium: 1A. Clusters and Cluster Assembled Materials, 16-20 de agosto 2015, Cancún, Q.R., México.
  - Conferencia invitada: Omar López-Estrada and Emilio Orgaz  
Electronic Structure and Magnetic Properties of Small Al Clusters.
  - cartel: Omar López-Estrada and Emilio Orgaz  
Transition states and Electronic Structure in Small-sized Nickel Clusters
5. 8th Photodynamics and Related Aspect Meeting, 21-31 octubre 2014, Oaxaca, Mexico
  - Omar López Estrada y Emilio Orgaz  
Structural, thermal and magnetic properties of small nickel clusters
6. Workshop: Frontiers of Renewable Energy Sciences and Technologies  
Boston MA, 30 de septiembre al 1 de octubre de 2010
7. XVII Int. Materials Research Congress  
17 al 21 de agosto de 2008. Cancún, Q.Roo, México
  - Conferencia invitada: Hydrogen-host interaction in metal hydrides
8. 11th Int. Congress on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics, 11 al 15 de septiembre de 2005, Ginebra, Suiza.



- cartel: Ab-initio electronic structure of  $k$ -(BEDT-TTF) $_2$ Cu[N(CN) $_2$ ]Br superconductor
  - cartel: Grafting process of organic molecules into carbon surfaces
9. Int. Symposium on Metal-Hydrogen Systems (2004).  
5-10 de septiembre 2004, Cracovia, Polonia.
- cartel, Electronic Structure of Ternary Hydrides based on Light Elements
10. 10th Int. Congress on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics, 7 al 12 de septiembre de 2003, Bruselas, Bélgica.
- cartel: Bonding properties of the new Zintl-phase hydrides
11. March Meeting of the American Physical Society 2003, March 3-7, Austin, Texas.
- cartel; [R1.237] Session R1 - cartel Session III. Chemical Bonding and Total Energy Conformational Analysis of the Organic Superconductor  $k$ -(BEDT-TTF) $_2$ Cu[N(CN) $_2$ ]Br.
12. Int. Symposium on Metal-Hydrogen Systems (2002).  
Annecy, Francia, 2-6 de septiembre 2002.
- cartel, The Electronic Structure of the Europium-Palladium Hydrides.
  - cartel, Extended Irreversible Thermodynamic Treatment of Solid-Gas Absorption Hysteresis
13. Simposio MATERIA-2001, del 22 al 26 octubre 2001, Cd. de México.
- ponencia: Chemical bonding of the alkali metal -magnesium hydrides
14. March Meeting of the American Physical Society 2001, March 12-16, Seattle, Washington.
- cartel, Electronic structure of magnetic ternary alkali metal manganese hydrides
15. Int. Symposium on Metal-Hydrogen Systems  
Noosa, Queensland, Australia, 1-6 de octubre 2000.
- cartel, Electronic structure of the new manganese ternary hydride Mg $_3$ MnH $_7$ .
16. Int. Materials Research Congress, Cancún, México, Agosto 27-31, 2000
- oral, Conformational Effects of the Ethylene Groups on the Superconducting Parameters of  $k$ -(BEDT-TTF) $_2$ Cu[N(CN) $_2$ ]Br: An ab-initio Study
  - oral, Recent Results on the Electronic Structure of Ternary Hydrides.
17. III-CISTPC, Mexico City, November 8-13, 1999
- oral, Chemical Bonding Features of the Ternary Alkali-metal Platinum and Palladium Hydrides
18. Int. Symposium on Metal-Hydrogen Systems (1998).



---

Hangzhou, China, 4-9 de octubre 1998.

- cartel, Electronic Structure of the BaReH<sub>9</sub> Hydride.

19. Journées de la Division Chimie du Solide. Société Française de Chime.

Paris, 4-6 de septiembre de 1996.

- cartel, "Structure électronique des hydrures contenant des unités PtH<sub>4</sub>"
- cartel, "Effet de la pression interne d'origine chimique dans la serie d'hydrures de structure perovskite
- APdH<sub>3</sub> (A=Sr, Eu, Yb)."

20. Int. Symposium on Metal-Hydrogen Systems (1996).

Les Diablerets, Suiza, 25-30 de agosto de 1996.

- cartel, "Electronic Structure Investigation of the A<sub>2</sub>PtH<sub>4</sub> Hydrides (A=Na, K) containing [PtH<sub>4</sub>] complexes."
- cartel, Internal Pressure Effect in the Series of Perovskite Structure Hydrides: APdH<sub>3</sub> (A=Sr, Eu, Yb)."

21. Gordon Conference on Metal-Hydrogen Systems.

Henniker, N.H., USA, 16-21 de julio de 1995.

-conferencia por invitación-

- cartel, "Prediction of a Metallic state in the PdSr<sub>2</sub>LiH<sub>5</sub> complex hydride"

22. Interstitial alloys for reduced energy consumption and pollution- NATO-ASI.

Il Ciocco, Italie, 12-24 de junio de 1994.

- cartel, "Electronic Structure of Perovskite Derived Hydrides"

23. Int. Symposium on Metal-Hydrogen Systems (1994).

Fuji-Yoshida, Yamanashi, Japón, 6-11 de noviembre de 1994.

- cartel, "Electronic Structure of Perovskite-Derived Hydrides"

24. Third Conference of the European Ceramic Society (1993).

Madrid, España, 13-17 de septiembre de 1993.

- cartel, A correlation between the critical Pr concentration and structural parameters in Ln<sub>1-x</sub>Pr<sub>x</sub>Ba<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub>."

25. Gordon Conference on Metal Hydrogen Systems.

Tilton, USA, 19-23 de julio de 1993.

-conferencia por invitación-

- cartel, "Trends on the energy gaps and band widths of the cubic fluorite M<sub>2</sub>M'H<sub>6</sub> hydrides: (M=Mg, Ca, Sr, M'= Fe, Ru, Os)."



- 
- cartel, "Electronic Structure of the DLiH3 anti-perovskite hydrides: (D = Eu, Sr and Ba)."

26. Int. Symposium on Metal-Hydrogen Systems. Fundamentals and Applications (1992)

Uppsala, Suecia, del 8 al 12 de junio de 1992.

- cartel, "Trends in the electronic structure of intermetallic hydrides:  $M_2M'H_6$  ( $M=Mg, Ca, Sr, M'=Fe, Ru, Os$ )."

27. M2S-HTSC III

Kanazawa, Japón, del 22 al 26 de julio de 1991.

- cartel, "Structural and Electronic Properties of  $La_{2-x}Sr_xNiO_4$ "

28. Materials Research Society Fall Meeting 1990

Boston, MA., del 26 al 30 de noviembre de 1990.

- cartel, "Electronic Structure Calculation of the  $Pr-(Cu_4O_4)_2$  and  $Y-(Cu_4O_4)_2$  clusters"

29. Materials Research Society Fall Meeting 1989,

Boston, MA. del 27 de noviembre al 2 de diciembre de 1989.

- ponencia, "YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub> Filament Superplastic Alloy Composites".
- cartel, "Effect of processing parameters and Postprocessing Thermal Cycling of the superconducting properties of Ag/YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub> Wires".

30. Int. Symposium on Metal-Hydrogen Systems, Fundamentals and Applications.

Stuttgart, FRG del 4 al 9 de septiembre de 1988.

- ponencia, 'Influence of Hysteresis on the Thermodynamic Properties of the LaNi<sub>5</sub>-H<sub>2</sub> System'.
- ponencia, 'Hydriding Kinetics and the Problem of Thermal Transfer'.

31. Int. Symposium on the Properties and Applications of Metal Hydrides V

del 25 al 30 de mayo de 1986, Maubuisson, Francia.

- cartel, 'Theoretical Study of the X-rays Absorption Spectra of Mg<sub>2</sub>FeH<sub>6</sub>'.
- cartel, 'Thermodynamics of the Hydride Chemical Heat Pump: Conditions for Multistage Operation'.

32. The Physics of Actinides and Related 4f Materials.

del 9 al 11 de abril de 1980, Zürich, Suiza.

- cartel, 'The Electronic Structure of Magnetic UTe'.



---

## Docencia

(Cursos Impartidos)

### Licenciatura

- 1103-1113 Cinemática y Dinámica -- Física I  
2000-I 2001-I 2002-II 2003-I 2004-I 2004-II 2005-I 2010-I 2014-I 2015-I 2018-I
- 1103 Cinemática y Dinámica (asesorías)  
2001-I
- 1203-1209 Electromagnetismo -- Física II  
2003-II 2005-I 2006-II
- 1204-1206 Estructura de la Materia  
2000-I 2000-II 2001-I 2004-II 2007-II 2009-II 2010-I 2010-II 2011-II 2012-I 2012-II 2018-II 2019-II
- 1207 Termodinámica  
2001-I
- 1432-1309 Ondas y Óptica -- Fundamentos de Espectroscopia  
2000-II 2002-I 2006-I 2007-I 2014-I 2014-II 2015-I 2016-II
- 1633 Unión Química y Fundamentos de Espectroscopia  
2003-II 2004-I
- 1404 Química Cuántica I  
2009-II 2012-I 2012-II 2017-I 2017-II
- 
- 0038 Química Cuántica II  
2013-I 2013-II 2019-I
- 1935 Trabajo de Investigación  
2003-II 2004-II 2010-I 2014-I 2014-II
- 1913 Ingeniería de Proyectos  
2004-II
- 0088 Química Computacional  
2011-II
- 0087 Propiedades Físicas de los Sólidos  
2016-I 2016-II 2017-I 2017-II 2018-I 2018-II 2019-I 2019-II



---

### Posgrado en Ciencias Químicas

- Química Cuántica I  
2014-II 2016-I
- Simetría Molecular  
1999-I 2000-II 2001-I 2001-II 2003-I
- Requisitos de Maestría  
2000-I 2000-II
- Temas Selectos. Estado Sólido  
2000-I 2003-I 2005-I 2006-I 2007-I
- Fundamentos Físicos de la Espectroscopia  
2001-II
- Espectroscopia Molecular  
2001-II
- Temas Selectos. Electromagnetismo  
2007-II

### Posgrado en Ciencias e Ingeniería de Materiales

- 61370 Propiedades Electrónicas de los Materiales  
2007-II

### Posgrado MADEMS

- Química General III  
2007-II

## Servicio Social

Dirección de estancias de Servicio Social en la Facultad de Química.  
Programa de Física y Química Teórica.





## Participación en Posgrado

Participación en diferentes comités y jurados de los Posgrados en Ciencias Química y Ciencia e Ingeniería de Materiales, UNAM

- Jurados de tesis doctoral
- Jurados de tesis de maestría
- Jurados examen de candidatura al doctorado
- Comités tutorales Ampliados
- Comités tutorales
- Jurados de Examen de Grado: Licenciatura
- Jurados de tesis de licenciatura, FQ-UNAM

## Universidad de Paris XI (1991-1998)

(Actividades docentes y de Tutoría)

### Cursos impartidos

Formación universitaria en ciencias en cinco años. DEUG= primer y segundo año de estudios, Licenciatura= tercer año, Maestría= cuarto año y DEA (o DEES)= quinto año. Eventualmente tesis doctoral a partir del sexto año.

- DEUG - Termodinámica.
- DEUG - Química General.
- DEUG - Enlace Químico.
- Licenciatura en Química - Cinética Química.
- Licenciatura en Química - Simetría Molecular.
- Licenciatura en Física- Enlace Químico.
- Maestría en Ciencias Físicas - Cinética Química.
- Maestría en Ciencias Químicas - Química Teórica (Estado Sólido).

### Dirección de estancias de investigación.

- Xavier Ripoche  
DEUG A, (segundo año).  
Université de Paris-Sud (Francia).  
Estancia de 6 meses  
Iniciación a la computación científica.  
Julio de 1998



- 
- Aurelie Roux  
DEUG A, (segundo año).  
Université de Paris-Sud (Francia).  
Estancia de 3 meses  
Iniciación a la computación científica.  
Julio de 1997
  - Sandra Guy  
DEUG A, (segundo año).  
Université de Paris-Sud (Francia).  
Estancia de 1 año.  
Iniciación a la computación científica  
Julio de 1996
  - Daniele Hericher  
DEUG A, (segundo año).  
Université de Paris-Sud (Francia).  
Estancia de 3 meses.  
Iniciación a la computación científica.  
Julio de 1997
  - Vincent Mazel  
DEA de Chimie Informatique et Théorique, (quinto año).  
Université de Paris-Sud (Francia).  
Estructura electrónica de YbPdH<sub>3</sub>  
presentado: julio 1995
  - Marie Colin.  
DEA de Chimie Informatique et Théorique, (quinto año).  
Université de Paris-Sud (Francia).  
Estancia de 1 año  
Cálculo de la superficie de Fermi del compuesto intermetálico RuAl  
presentado: julio de 1994.
  - Robert Balawender.  
DEA de Chimie Informatique et Théorique, (quinto año).  
Université de Paris-Sud (Francia).  
Estancia de 1 año  
Estudio de la estructura electrónica de KMgFH<sub>2</sub>, KMgH<sub>3</sub> y KMgF<sub>3</sub> mediante el método ab initio  
APW  
presentado el 1 de julio de 1994.