



Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM



REPORTE DE USO 'MIZTLI' 2016

Durante el 2016 se publicaron 7 artículos de investigación en revistas internacionales arbitradas e indizadas con el agradecimiento correspondiente a la DGTIC por el acceso a la Supercomputadora 'Miztli'. Para su elaboración, se empleó de forma exclusiva el programa Gaussian09. En dicho periodo se titularon un alumno de Maestría y uno de licenciatura, en ambos casos las tesis derivadas llevan el agradecimiento correspondiente.

1. A Mixed DFT-MD Methodology for the In Silico Development of Drug Releasing Macrocycles. Calix and Thia-Calix[n]Arenes as Carriers for Bosutinib and Sorafenib *Journal of Computational Chemistry* **2016**, 37, 10, 940–946
2. In silico design of calixarene-based arsenic acid removal agents *J Incl Phenom Macrocycl Chem* (**2016**) 85:169–174
3. Aromatization of pyridinylidenes into pyridines is inhibited by exocyclic delocalization. A theoretical mechanistic assessment *Tetrahedron* 72 (**2016**) 4194-4200
4. Reactivity of electrophilic chlorine atoms due to σ -holes: a mechanistic assessment of the chemical reduction of a trichloromethyl group by sulfur nucleophiles *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2016**, 18, 27300-27307
5. Ab Initio Modeling Of Friction Reducing Agents Shows Quantum Mechanical Interactions Can Have Macroscopic Manifestation *J. Phys. Chem. A*, **2016**, 120 (46), pp 9244–9248
6. Crystal Structure and DFT Studies of 4-Methyl-N-(1-phenylethyl)-N'-(1-phenylethylidene)benzenesulfonohydrazide. Evidence of a carbene insertion in the formation of acetophenone azine from acetophenone p-toluensulfonyl hydrazone. *Canadian Journal of Chemistry* **2016** (doi: 10.1139/cjc-2016-0183)
7. Synthesis and Crystal Structures of Stable 4-Aryl-2-(trichloromethyl)-1,3-diaza-1,3-butadienes *Synthesis* **2016**, 48, 2205–2212

De las 750,000 horas aprobadas se ejercieron 624,785.39, restando 125,214.61 por ejercer.

Atentamente,

Dr. Joaquín Barroso Flores
Investigador Titular A
Instituto de Química UNAM

Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM - UNAM