

Dr. Roberto Flores Moreno

Grados académicos y Estancias:

Licenciatura: Licenciado en Química. Universidad de Guadalajara. México. 2001

Doctorado: Doctorado en Ciencias, especialidad en Ciencias Químicas, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, México, 2006.

Estancias académicas cortas en: Universidad Veracruzana, Universidad Nacional Autónoma de México, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional y Virginia Commonwealth University.

Cargo(s) actual(es):

Profesor Investigador tiempo completo Titular A

Antigüedad en la Universidad de Guadalajara: 9 años

Miembro del Sistema Nacional de Investigadores desde 2008

Nivel actual en el SNI: Nivel II

Otros cargos:

Co-delegado por Jalisco de la Olimpiada Mexicana de Química

Miembro de la comisión evaluadora de Ciencia Básica del CONACYT

Miembro del comité de acreditación del CONAECQ

Artículos JCR recientes (2015-2019)*:

1.- Juan Felipe Huan Lew-Yee, **Roberto Flores-Moreno**, José Luis Morales, Jorge M. del Campo. **Asymmetric Density Fitting with Modified Cholesky Decomposition Applied to Second-Order Electron Propagator.** Journal of Chemical Theory and Computation. (2020). Doi: 10.1021/acs.jctc.9b01215. Impact Factor: **5.313**.

2.- Bernardo Zúñiga-Gutiérrez, Víctor Medel-Juarez, Andrés Varona, **Henry Nicole González Ramírez**, **Roberto Flores-Moreno**. **Calculation of the EPR g-tensor from auxiliary density functional theory.** The Journal of Chemical Physics, 152 (1), 13 pp. (2020). Doi: 10.1063/1.5130174. Impact Factor: **2.997**.

3.- **Henry Nicole González-Ramírez**, **Roberto Flores-Moreno**. **A generalized any-particle propagator theory: Calculations of nucleon's binding energies.** International Journal of Quantum Chemistry, 14 pp. (2019). Doi: 10.1002/qua.26140. Impact Factor: **2.263**.

4.- Juan P. Mojica-Sanchez, **Roberto Flores-Moreno**, Kayim Pineda-Urbina, Zeferino Gómez-Sandoval. **Exploring the structure, energetic and magnetic properties of neutral small lithium clusters doped with yttrium: Supermagnetic atom research.** ACS Omega. 3(9), 11252-11261 (2018). Doi: 10.1021/acsomega.8b01463. Impact Factor: **2.584**.

5.- José de Jesús Villalobos-Castro, Jose A. Guerrero-Cruz, Bernardo Zúñiga-Gutiérrez, **Roberto Flores-Moreno**. **Local density fitting applied to second order propagator equations for core electron binding energies.** Computational and Theoretical Chemistry. 1136, 29-33 (2018). Doi: 10.1016/j.comptc.2018.05.014. Impact Factor: **1.344**.

6.- Kayim Pineda-Urbina, Zeferino Gómez-Sandoval, **Roberto Flores-Moreno**. **h-function: A protonic take on the numerical Fukui function as a graphical descriptor for deprotonation.** International Journal of Quantum Chemistry. 118(10), e25532 (2018). Doi: 10.1002/qua.25532. Impact Factor: **2.263**.

7.- Francisco J. Contreras, **Roberto Flores Moreno**, José Alberto Guerrero-Cruz, **Eduardo Mendizábal**, **Luis Javier González-Ortiz**. **Parametrización del modelo de estado isomérico rotacional utilizando primeros principios y la teoría funcional de densidad auxiliar.** Revista Iberoamericana de Polímeros y Materiales, 19(5), 182-198, (2018).

- 8.- Gururaj Kudur Jayaprakash, Roberto Flores-Moreno. **Regioselectivity in hexagonal boron nitride co-doped graphene**. New Journal of Chemistry, 42(23), 18913-18918 (2018). Doi: 10.1039/c8nj03679a. Impact Factor: **3.069**.
- 9.- Gururaj Kudur Jayaprakash, B. E. Kumara Swamy, Henry N. Gonzalez-Ramirez, Musturappa. T. Ekanthappa, Roberto Flores-Moreno. **Quantum chemical and electrochemical studies of lysine modified carbon paste electrode surfaces for sensing dopamine**. New Journal of Chemistry. 42(6), 4501-4506 (2018). Doi: 10.1039/c7nj04998f. Impact Factor: **3.069**.
- 10.- Gururaj Kudur Jayaprakash, B. E. Kumara Swamy, Norberto Casillas Santana, Roberto Flores-Moreno. **Analytic Fukui and cyclic voltammetric studies of ferrocene modified carbon electrodes and effect of Triton X-100 by immobilization method**. Electrochimica Acta. 258, 1025-1034 (2017). Doi: 10.1016/j.electacta.2017.11.154. Impact Factor: **5.383**.
- 11.- Gururaj Kudur Jayaprakash, Roberto Flores-Moreno. **Quantum chemical study of Triton X-100 modified graphene surface**. Electrochimica Acta. 248, 225-231 (2017). Doi: 10.1016/j.electacta.2017.07.109. Impact Factor: **5.383**.
- 12.- Gururaj Kudur Jayaprakash, B. E. Kumara Swamy, B. N. Chandrashekar, Roberto Flores-Moreno. **Theoretical and cyclic voltammetric studies on electrocatalysis of benzethonium chloride at carbon paste electrode for detection of dopamine in presence of ascorbic acid**. Journal of Molecular Liquids. 240, 395-401 (2017). Doi: 10.1016/j.molliq.2017.05.093. Impact Factor: **4.561**.
- 13.- Felix Moncada, Roberto Flores-Moreno, Andrés Reyes. **Theoretical calculation of polarizability isotope effects**. Journal of Molecular Modeling. 23(3), 90 (2017). Doi: 10.1007/s00894-017-3236-9. Impact Factor: **1.335**.
- 14.- Erwin Garcia-Hernández, Roberto Flores-Moreno, Álvaro Vázquez-Mayagoitia, Rubicelia Vargas, Jorge Garza. **Initial stage of the degradation of three common neonicotinoids: theoretical prediction of charge transfer sites**. New Journal of Chemistry. 41(3), 965-974 (2017). Doi: 10.1039/c6nj02655a. Impact Factor: **3.069**.
- 15.- Rogelio Isaac Delgado-Venegas, Daniel Mejía-Rodríguez, Roberto Flores-Moreno, Patricia Calaminici, Andreas M. Köster. **Analytic second derivatives from auxiliary density perturbation theory**. Journal of Chemical Physics. 145, 224103 (2016). Doi: 10.1063/1.4971292. Impact Factor: **2.997**.
- 16.- Gururaj Kudur Jayaprakash, Norberto Casillas Santana, Pablo D. Astudillo-Sánchez, Roberto Flores-Moreno. **Role of defects on regioselectivity of nano pristine graphene**. The Journal of Physical Chemistry A. 120(45), 9101-9108 (2016). Doi: 10.1021/acs.jpca.6b08810. Impact Factor: **2.641**.
- 17.- Héctor O. Gonzalez-Ochoa, Roberto Flores-Moreno, Luz M. Reyes, Ricardo Femat. **Extended source model for diffusive coupling**. The European Physical Journal E. Soft Matter. 39(1), 4 (2016). Doi: 10.1140/epje/i2016-16004-y. Impact Factor: **1.686**.
- 18.- Roberto Flores-Moreno, Javier Carmona-Espindola, Andreas M Köster. **Calculation of hyperpolarizabilities with auxiliary density perturbation theory**. AIP Conference Proceedings, 1642(1), 60-68. (2015). Doi: 10.1063/1.4906631. Impact Factor: **0.40**.

**Se presentan subrayados y cursivos los nombres de profesores/alumnos del(a) Maestría/Doctorado en Cs. en Química. Los factores de impacto son para el 2018 y fueron obtenidos de la página web de la revista correspondiente.*

Proyectos de investigación con financiamiento externo (2015-2019):

Nombre del proyecto 1: Solución numérica de ecuaciones diferenciales en gravitación y fisicoquímica teórica. Repatriación del Dr. Juan Carlos Degollado Daza en la Universidad de Guadalajara (2014-2015)

Entidad financiadora: CONACyT

Duración del proyecto: 1 año
Monto total del proyecto: \$ 350,000.00
Participación: Responsable

Nombre del proyecto 2: *Implementación de un módulo para cálculos de las constantes de acoplamiento hiperfino con la teoría de funcionales de la densidad auxiliar.* Repatriación del Dr. Bernardo Antonio Zúñiga Gutiérrez en la Universidad de Guadalajara (2014-2015)
Entidad financiadora: CONACyT
Duración del proyecto: 1 año
Monto total del proyecto: \$ 350,000.00

Nombre del proyecto 3: *Modelo de fuente extendida para acoplamiento difusivo.* Repatriación del Dr. Hector Octavio González Ochoa en la Universidad de Guadalajara (2014-2015)
Entidad financiadora: CONACyT
Duración del proyecto: 1 año
Monto total del proyecto: \$ 350,000.00

Nombre del proyecto 4: *Evaluación de propiedades magnéticas de superátomos a través del cálculo de resonancia magnética electrónica dentro de la teoría de los funcionales de la densidad.* Estancia postdoctoral del Dr. Victor Manuel Medel Juárez, afiliado al Doctorado en Ciencias en Química de la Universidad de Guadalajara (2016-2018)
Entidad financiadora: CONACyT
Duración del proyecto: 2 años
Monto total del proyecto: \$ 500,000.00

Direcciones de tesis terminadas/en proceso (2015-2019):

Maestría en Ciencias en Química:

1.- I. Q. Jaime Valdez Ruvalcaba. Propagador de segundo orden para doble ionización electrónica H^+ . **Terminada el 13 de diciembre del 2018.**

2.- I. Q. José Alberto Guerrero Cruz. Interpretación de espectroscopia de absorción de rayos X: cálculo de parámetros del campo ligando y su implementación en simulaciones de multiplete. **En proceso.**

Doctorado en Ciencias en Química:

1.- M. en Ing. Henry Nicole González Ramírez. Energías de átomos tratados como un sistema fermiónico con interacción nuclear y coulombica. **En proceso.**

2.- M. en C. Jaime Valdez Ruvalcaba. Iniciando.

Ubicación:	Laboratorio de Química Teórica, Departamento de Química, CUCEI, Módulo Y, Laboratorio Módulo E primer piso
e-mail:	roberto.floresm@red.cucei.udg.mx
Teléfono oficina:	+52 (33) 13785900 Ext. 27577
Información adicional:	Jefe del Laboratorio de