

UNIVERSIDAD SANTO TOMÁS
VICERRECTORÍA ACADÉMICA GENERAL
UNIDAD DE INVESTIGACIÓN

7ª Convocatoria interna de Proyectos de Investigación 2012-2013
“Sede Principal y Vicerrectoría Universidad Abierta y a Distancia”

I. LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Los proyectos de investigación deberán inscribirse como parte de una de las líneas de investigación establecidas por la Universidad.

Denominación de la línea Medular(máximo 5 renglones)	Alberto Magno: Ciencia, tecnología y medio ambiente.
Denominación de la línea(s) Activa(s) (máximo 10 renglones)	Fisicoquímica teórica
Pertinencia del proyecto dentro de la línea(s) Activa(s) (máximo 10 renglones)	Fortalecerá la producción de conocimiento. Propiciará el desarrollo de las competencias de los investigadores. Potenciará la capacidad del grupo de investigación para actuar en otras convocatorias. Incentivará la visibilidad de los productos de nuevo conocimiento del grupo.
Programa académico o unidad académica que sustenta la línea: Ingeniería Ambiental y Ciencia Básica	

1. INFORMACIÓN GENERAL DEL PROYECTO

Título del proyecto: Estudio mecanocuántico y quimiotopológico de oxos, peroxos y superoxos de metales de transición del cuarto periodo.			
Investigador Principal: Emilbus Azelleb Uribe Guerrero Correo electrónico: emilbusuribe@usantotomas.edu.co Teléfono: 587 87 97 Ext. 1301 Dirección de correspondencia: Carrera 9 No. 51-11. Departamento de Ciencias Básicas			
Nombre del Grupo de Investigación: Ciencia e Ingeniería de Materiales		Total de Investigadores: (número): 4	
Investigadores que componen el grupo	Dirección electrónica	Calidad	
1. José Miguel Cabarcas	josecabarcas@usantotomas.edu.co	Investigador	
2. Estudiante 1 de pregrado -USTA.		Joven investigador	
3. Estudiante 2 de pregrado -USTA		Joven investigador	
Facultad y Programa Académico en el que presta servicios el investigador principal: Departamento de Ciencias Básicas Línea de Investigación: Fisicoquímica teórica			
Lugar de Ejecución del Proyecto: Ciudad: Bogotá Departamento: Cundinamarca			
Duración del Proyecto (en meses): 10			
Tipo de Proyecto: (marque con x) Investigación Aplicada() Desarrollo Tecnológico () Investigación Básica (X) Desarrollo productivo o empresarial ()			
Tipo de Financiación solicitada: Financiamiento Total: 45.999 (miles de pesos) Valor solicitado a la Universidad (FODEIN): 19.999 (miles de pesos) Valor Contrapartida/Unidad Académica: 26.000 (miles de pesos) Valor Contrapartida/Convenio entidad externa: 0 Valor total del Proyecto: 45.999 (miles de pesos)			
Descriptores / Palabras claves: Quimiotopología, AIM, DFT, óxidos de metales de transición del cuarto periodo.			

2. RESUMEN DEL PROYECTO

La capacidad de predicción ha sido considerada uno de los puntos positivos de toda ciencia¹. Hacia el año de 1860 Mendeléiev logró una predicción tan importante, como la del retorno del cometa de Halley cada 75 o 76 años². Mendeléiev predijo la existencia de elementos químicos que nadie había observado y describió sus propiedades. En años posteriores se descubrieron estos elementos y se confirmaron las predicciones hechas por el químico ruso. Desde entonces se ha predicho la posibilidad de fabricar cientos de sustancias con propiedades específicas. El diseño de fármacos en los últimos 30 años ha alcanzado éxitos enormes, prediciendo de antemano las propiedades químicas y fisiológicas de sustancias inexistentes y sintetizándolas después.

El logro más importante del trabajo hecho por Mendeléiev fue el enfoque que utilizó para su predicción; estudiar todo el conjunto de los elementos químicos y no uno por uno³. Para esto el químico ruso utilizó la intuición y la paciencia, pero ahora es posible estudiar los fundamentos matemáticos de la teoría del conjunto de los elementos químicos o de cualquier conjunto de compuestos utilizando la topología de ese conjunto⁴.

Nosotros proponemos hacer un estudio topológico del conjunto formado por compuestos TMO_n , donde TM (de sus siglas en inglés Transition Metal) es un metal de transición del cuarto periodo entre Sc y Zn, y n es un número entre 1 y 2, tomando como fundamento los resultados obtenidos del análisis de agrupamientos de estos compuestos. Seleccionaremos 11 propiedades físicoquímicas para definir cada compuesto TMO_n . Para el cálculo de las propiedades usaremos el nivel de teoría BPW91/6-31+G(2d,p). Haremos uso de 3 funciones de similitud y 4 metodologías de agrupamiento, y finalmente obtendremos 12 dendrogramas con los cuales construiremos árboles consensuales. De los agrupamientos obtenidos, definiremos una base topológica para el conjunto de los compuestos TMO_n . Posteriormente, estudiaremos propiedades topológicas⁴ como clausura, conjunto derivado y frontera de subconjuntos de compuestos TMO_n . Como resultado encontraremos las relaciones de similitud que existen entre los compuestos TMO_n las cuales nos permitirán predecir las propiedades químicas, físicas, catalíticas y bioquímicas de los TMO_n inexistentes o de

los cuales no se conozca, aun, evidencia experimental y que podrían ser sintetizados después. Adicionalmente, describiremos en detalle los diferentes compuestos del conjunto TMO_n . Hablaremos acerca de sus propiedades geométricas, energéticas y de la naturaleza del enlace químico TM-O utilizando la Teoría de Átomos en Moléculas (AIM: de sus siglas en inglés Atoms in Molecules). Con esta propuesta iniciaremos la formación de estudiantes de pregrado en investigación. También, fortaleceremos la cooperación científica que la investigadora principal tiene con otros grupos a nivel nacional e internacional y la producción de conocimiento del grupo Ciencia e Ingeniería de Materiales del Departamento de Ciencias Básicas de la Universidad Santo Tomás.

3. DESCRIPCIÓN DE LOS ELEMENTOS BÁSICOS DE LA PROPUESTA DE INVESTIGACIÓN, QUE COMPRENDE:

3.1 - 3.2 - 3.3 Tema y planteamiento de la pregunta o problema de investigación, marco teórico, estado del arte y justificación.

Existen varios sistemas químicos caracterizados por las relaciones entre sus elementos, por ejemplo, los elementos químicos, ácidos, bases y las familias de compuestos orgánicos e inorgánicos, entre otros. Estas relaciones se interpretan como relaciones de similitud. Esto significa que dos elementos de un conjunto de interés químico están estrechamente relacionados, si son muy similares. Una forma de cuantificar la similitud es definiendo los objetos químicos en términos matemáticos; cada objeto puede ser definido por un vector de sus atributos o propiedades. Basados en tales consideraciones, proponemos hacer un estudio quimi-topológico del conjunto formado por compuestos TMO_n (TM=Sc-Zn y $n=1-2$). Esto con el objeto de poder predecir las propiedades y posibles aplicaciones industriales que puedan tener compuestos TMO_n sintetizados, o no, en la actualidad.

Dentro del conjunto de los compuestos TMO_n se encuentran los óxidos de TM (O-TM-O) y los compuestos TM-dioxígeno ($\text{TM}\cdots(\text{O}-\text{O})$). En general, se conocen numerosos estudios^{5,6} teóricos y experimentales relacionados con la estructura, propiedades fisicoquímicas y reactividad de algunos de los compuestos TMO_n , pero se desconocen aspectos relacionados con las características del enlace químico entre un TM del cuarto periodo y el O_2 . La razón es histórica. Las aplicaciones industriales de los óxidos y la

importancia que tienen los compuestos TM-dioxígeno en los procesos catalíticos y biológicos hacen que la síntesis de nuevos compuestos y sus respectivas aplicaciones, sean más estudiadas que los análisis relacionados con el tipo de enlace TM-oxígeno y efectos que producen. Lo cual es excelente desde el punto de vista de las miles de aplicaciones que han cambiado nuestras vidas, pero riesgoso desde el punto de vista de las bases conceptuales sobre las que se han hecho estos desarrollos.

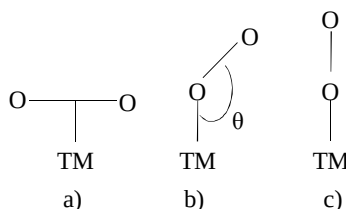


Figura 1: Tipos de interacciones metal de transición-oxígeno (TM-O) propuestas por Basolo, Hoffman e Ibers⁹: a) Tipo I, b) Tipo II y c) Tipo III.

Actualmente se conocen por lo menos tres clasificaciones de las interacciones TM-oxígeno. Basolo, Hoffman e Ibers⁷ en el año de 1975 propusieron que estas interacciones podían ser del Tipo I, Tipo II y Tipo III (ver Figura 1). En las interacciones Tipo I el ligando O_2 se coordina de forma paralela al TM (ver Figura 1a), y en las interacciones Tipo II y Tipo III la coordinación del O_2 es perpendicular (ver Figura 1b y 1c). En las interacciones Tipo II el ángulo (θ) TM-O-O es de 120° , mientras que en las interacciones Tipo III es de 180° . En 1986, Kasay y Jones⁸ proponen que entre un TM y el O_2 solo hay dos tipos de interacciones, que corresponden a las Tipo I y Tipo II de Basolo, Hoffman e Ibers⁷ mostradas en la Figura 1. Gutsev, Rao y Jena⁹ en el año 2000 proponen, nuevamente, que las interacciones TM-dioxígeno son de tres tipos: oxo (O-TM-O), peroxo (TM- O_2) y superoxo (TM-OO) como se muestra en la Figura 2. En la oxo se produce la ruptura del ligando O_2 y se forman dos interacciones TM-O (Figura 2a). En la peroxo el ligando O_2 se coordina paralelamente al TM, pero a diferencia de la interacción Tipo I propuesta por Basolo, Hoffman e Ibers⁷ (Figura 1a) existe un enlace entre cada uno de los oxígenos del O_2 y el TM (Figura 2b). En la superoxo, el ligando O_2 se coordina perpendicularmente al TM formando un ángulo TM-O-O diferente de 180° (Figura 2c). En resumen, es evidente que no hay un acuerdo en cuanto a los tipos de interacciones TM-O, pero hay evidencias de las características teóricas

interesantísimas que estos presentan y que van desde la ruptura del enlace O_2 para formar dos enlaces TM-O hasta la coordinación del O_2 al TM.

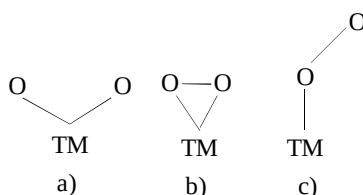


Figura 2: Tipos de interacciones metal de transición-oxígeno (TM-O) propuestas por Gutsev, Rao y Jena¹¹: a) oxo, b) peroxo y c) superoxo.

Por otra parte, así como no hay acuerdos en cuanto a la clasificación de las interacciones TM-O, tampoco se conoce cuales son las relaciones de similitud entre los compuestos TM-O ni mucho menos características (tipo y la naturaleza) de las interacciones entre un TM del cuarto periodo y el O_2 . Con miras a continuar contribuyendo en este campo científico nosotros planteamos este proyecto y las siguientes preguntas de investigación:

1. ¿Cuál es el tipo de interacciones entre un TM del cuarto periodo y uno, dos y tres ligandos O_2 en compuestos del tipo TMO_n ?, ¿Serán del tipo oxo, peroxo o superoxo?,
2. ¿Será posible otro tipo de interacción diferente a las planteadas por Basolo, Hoffman e Ibers⁷ o por Gutsev, Rao y Jena⁹?,
3. ¿Existirá alguna tendencia en cuanto al tipo de interacciones TM-O a medida que aumenta el número de oxígenos coordinados al centro metálico y el número atómico del metal de transición del cuarto periodo?. ¿Serán todas del tipo oxo o peroxo o superoxo?,
4. ¿Qué características tiene el enlace TM-O que hace que sus compuestos tengan diversas aplicaciones industriales, catalíticas y biológicas?,
5. ¿En los compuestos TMO_n existen relaciones de similitud o semejanza?, ¿Qué importancia química, biológica e industrial tienen estas relaciones de similitud?.

3.4 Objetivos

3.4.1 General

Hacer un análisis quimi-topológico de los compuestos TMO_n ($\text{TM}=\text{Sc-Zn}$ y $n=1-2$) y avanzar en la comprensión de las interacciones, tipo de compuestos y enlaces, entre un metal de transición del cuarto periodo (TM) y el oxígeno presentes en cada uno de ellos.

3.4.2 Específicos

1. Localizar puntos estacionarios sobre las superficies de energía potencial (PESs: de sus siglas en inglés Potential Energy Surfaces) de los compuestos TMO_n ($\text{TM}=\text{Sc-Zn}$ y $n=1-2$). Caracterizar sus geometrías y hacer el análisis armónico correspondiente.
 - Determinar la multiplicidad de espín (M) del estado fundamental de cada uno de los compuestos TMO_n .
 - Obtener propiedades fisicoquímicas de cada uno de los compuestos TMO_n en el estado fundamental.
2. Clasificar los compuestos TMO_n de acuerdo con las geometrías en oxo, peroxo o superoxo.
3. Caracterizar y clasificar las interacciones metal de transición del cuarto periodo-oxígeno presentes en los compuestos TMO_n .
4. Hacer un análisis quimi-topológico de los compuestos TMO_n estudiados.

3.5 Metodología propuesta

1. Localización de puntos estacionarios sobre las PESs de los compuestos TMO_n ($\text{TM}=\text{Sc-Zn}$ y $n=1-2$).

La localización de un punto estacionario sobre una PES se realiza mediante una optimización de geometría. Una optimización de geometría es un procedimiento empleado para localizar una conformación estable de una molécula. Las optimizaciones de geometría convergen a una configuración nuclear en la que las fuerzas sobre el sistema son esencialmente cero. Esta estructura puede corresponder a un mínimo o a un punto de silla (estado de transición). Un punto de silla es un mínimo en algunas direcciones sobre la superficie y un máximo en una o más direcciones distintas. Un estado de transición (TS) de primer orden tiene un máximo en una única dirección y es un mínimo en las otras direcciones ortogonales a esta.

Para la localización de mínimos y estados de transición de primer orden en las PESs de los compuestos TMO_n utilizaremos el funcional BPW91^{10,11} y la base 6-31+G(2d,p) implementados en el programa Gaussian03.

1.1 Determinación de la multiplicidad de espín (M) del estado fundamental de los compuestos TMO_n .

La multiplicidad de espín (M) es el número de orientaciones de espín permitidas en el espacio¹² y se puede calcular a partir del número cuántico de momento angular de espín (S) como: $M=2S+1$. Para un electrón, el número cuántico de espín es $\frac{1}{2}$ y la multiplicidad de espín es 2 ($M=[2(\frac{1}{2})+1]=2$). Para dos electrones, hay dos posibilidades: $M=1$ si los espines son opuestos ($M=[2(0)+1]=1$) y $M=3$ si los espines tienen la misma orientación ($M=[2(1)+1]=3$). Para tres electrones, hay dos posibilidades: $M=4$ si todos los espines tienen la misma orientación y $M=2$ si dos de los tres espines son opuestos.

Los metales de transición del cuarto periodo pueden tener configuración electrónica $4s^23d^N$, $4s^13d^{N+1}$, $4s^14p^13d^N$ y $3d^{N+2}$ (donde N es el número de electrones 3d del metal)¹³. El Sc es un metal de transición con un electrón 3d. Si la configuración del Sc fuese $4s^23d^1$ el valor de M sería 2, pero si fuese $4s^13d^2$ el valor de M podría ser 2 (dos de los tres espines son opuestos), o 4 (todos los espines tendrían la misma orientación). En general, para determinar la multiplicidad de espín de un compuesto metálico del cuarto periodo, como por ejemplo de los compuestos TMO_n , tendremos en cuenta las cuatro configuraciones electrónicas que estos poseen¹⁴.

Para determinar cuál de los valores de M es el del estado fundamental, calcularemos la energía total de cada uno de los compuestos TMO_n con los diferentes valores de M . Y, seleccionaremos la multiplicidad de espín del compuesto en el estado fundamental como aquella que conlleva al valor de menor energía.

1.2 Obtención de propiedades fisicoquímicas para de cada una de los compuestos TMO_n en el estado fundamental.

Haremos un análisis termoquímico de los compuestos TMO_n en el estado fundamental. Extraeremos algunas propiedades fisicoquímicas como: frecuencias, momentos cuadrupolares (Q_{xx} , Q_{yy} e Q_{zz}), momento dipolar, energía térmica y energías de los orbitales más alto ocupado (HOMO) y más bajo desocupado (LUMO).

Con base en los valores de la frecuencia clasificaremos los puntos estacionarios como mínimos o estados de transición de primer orden. Las frecuencias están relacionadas con los valores propios de la matriz de segundas derivadas (matriz Hessiana). Si los valores propios son todos positivos, entonces las frecuencias son todas reales y el punto estacionario es un mínimo. Si un valor propio es negativo (una frecuencia imaginaria), el punto estacionario es un estado de transición de primer orden.

En total calcularemos 11 las propiedades fisicoquímicas^a utilizando el funcional BPW91 y la base 6-31+G(2d,p) para los compuestos TMO_n en el estado fundamental. Seleccionamos el funcional BPW91 teniendo en cuenta estudios previos realizados por Zhang, Cao y Duan¹⁵, Gutsev, Andrews y Bauschlicher^{16,17,18}, Citra y Andrews¹⁹, Leegle, Nyberg y Peel²⁰, Wang y Andrews²¹, Estrada-Salas y Valladares²², Marlo y Milman²³, Tsuzuki y Luthi²⁴, Filatov y Cremer²⁵, Song, Guan, Yao, Su, Wu, Feng e Yang²⁶, Buda, Flores y Cundari²⁷, y McCullough, Apra y Nichols²⁸, donde es sugerido como el funcional adecuado para estudiar compuestos metálicos de Ti, V, Cr, Fe, Co, Ni, Cu, Mo, Ru y Rh. Además, porque el funcional BPW91 incluye en la parte de la correlación el funcional no empírico PW91 de Perdew y Wang de 1991.

2. Clasificación de los compuestos TMO_n , $\text{TM}=\text{Sc-Zn}$ y $n=1-2$.

Para clasificar a los compuestos TMO_n (mínimos y estados de transición de primer orden localizados sobre las PESs TMO_n) tendremos en cuenta la geometría y las longitudes de enlace oxígeno-oxígeno ($R_e(\text{O-O})$). Cuando la $R_e(\text{O-O})$ tiene un valor inferior a 1.5 Å y superior a 1.4 Å clasificaremos los compuestos TMO_n como peroxo y cuando la $R_e(\text{O-O})$ es aproximadamente 1.3 Å los clasificaremos como superoxo de acuerdo con los criterios de Vallet, Faus, García-España y Moratal²⁹.

3. Caracterización de las interacciones metal de transición-oxígeno presentes en los compuestos TMO_n , $\text{TM}=\text{Sc-Zn}$ y $n=1-2$.

Obtendremos las superficies de densidad electrónica, $\rho(r)$, para los compuestos TMO_n (mínimos localizados sobre las PESs TMO_n) con la función de onda BPW91/6-

^a Las 11 propiedades fisicoquímicas son: multiplicidad del compuesto TMO_n en el estado fundamental, peso molecular, energía total, energía del orbital más alto ocupado (HOMO: de sus siglas en inglés Hight Occupied Molecular Orbital), energía del orbital más bajo desocupado (LUMO: de sus siglas en inglés Low Unoccupied Molecular Orbital), energía térmica, momento dipolar, momentos cuadrupolares Q_{xx} , Q_{yy} y Q_{zz} y frecuencia de vibración.

31+G(2d,p) y el programa AIM2000. Verificaremos que las superficies tengan una topología correcta; es decir que cumplan con la relación de Poincaré-Hopf³⁰: $n-b+r-c=1$ (donde n es el número de atractores nucleares (3,-3) y b , r y c son el número de puntos críticos de enlace (3,-1), anillo (3,+1) y caja (3,+3), respectivamente). Luego, haremos un análisis topológico de $\rho(r)$ de cada uno de los compuestos TMO_n , usando la Teoría de Átomos en Moléculas. Extraeremos propiedades topológicas de $\rho(r)$ en los puntos críticos de enlace (3,-1) como: Densidad electrónica $\rho(r)$, Laplaciano de la densidad electrónica ($\nabla^2\rho(r)$), densidad de energía cinética ($G(r)$) y densidad de energía potencial ($V(r)$).

Con base en el signo del $\nabla^2\rho(r)$ clasificaremos las interacciones metal de transición-oxígeno presentes en los compuestos TMO_n como de capa compartida o de capa cerrada³¹. Cuando el $\nabla^2\rho(r)<0$ la interacción es de capa compartida y cuando el $\nabla^2\rho(r)>0$ la interacción es de capa cerrada. Teniendo en cuenta que las interacciones interatómicas pueden tener diferente grado de carácter compartido o cerrado, estas se pueden subdividir en interacciones de capa compartida pura, capa cerrada intermedia y capa cerrada pura. Esta subdivisión se hace con base en la densidad de energía total $H(r)$ ($H(r)=G(r)+V(r)$) en el punto crítico de enlace (3,-1) y la magnitud $|V(r)|/G(r)$. Las interacciones interatómicas con valores de $H(r)<0$ y de $|V(r)|/G(r)>2$ en el punto crítico de enlace se clasifican como interacciones de capa compartida pura, aquellas con valores de valores de $H(r)<0$ y $1<|V(r)|/G(r)<2$ como interacciones de capa cerrada intermedia, y las que tienen valores de $H(r)>0$ y $0<|V(r)|/G(r)<1$ como interacciones de capa cerrada pura³¹.

4. Análisis quimi-topológico de los compuestos TMO_n , $M=\text{Sc-Zn}$ y $n=1-2$.

Con los valores de las 11 propiedades fisicoquímicas de compuestos TMO_n construiremos una matriz de datos. Posteriormente, normalizaremos esta matriz con el objeto de llevar cada propiedad al mismo intervalo número. Esto lo haremos teniendo en cuenta que el análisis de agrupamientos es una técnica numérica no supervisada.

Con la matriz de datos normalizada, haremos 12 análisis de agrupamientos utilizando 3 funciones de similitud (2 funciones de distancia (métricas) y un coeficiente de similitud (no métrico)), 4 metodologías de agrupamiento (unión sencilla, unión completa, unión

promedio no ponderada y unión promedio ponderada) y el programa STATISTICA (StatSoft, Tulsa, OK). También, obtendremos árboles consensuales (regla de la mayoría y de Adams) utilizando el programa COMPONENT³² para buscar las características comunes en los 12 dendrogramas.

Para extraer los agrupamientos de los 14 árboles (12 dendrogramas y 2 árboles consensuales) seleccionaremos un número entre 1 y el número total de compuestos TMO_n estudiados. Para cada valor de n, calcularemos el número de agrupamientos C y su población $\prod_i |C_i|$. Con la multiplicación de C y $\prod_i |C_i|$ calcularemos el número de selección S. Seleccionaremos el valor de n para el cual S es máximo y con dicho valor, construimos la base topológica B_n para cada uno de los 14 árboles. (Para mayor información sobre la extracción de los agrupamientos y la determinación de la base topológica favor ver las referencias ³³ y ³⁴).

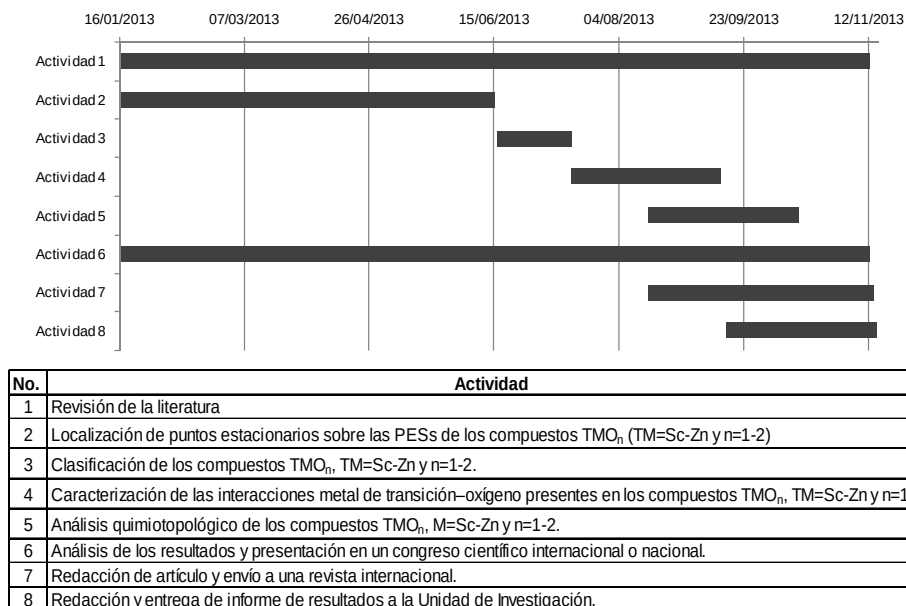
Una vez determinada la base topológica B_n para cada árbol estudiaremos si las relaciones de vecindad o similitud que existen en los compuestos TMO_n. Para esto, seleccionaremos 10 subconjuntos teniendo en cuenta que son 10 los elementos entre Sc y Zn y calcularemos las propiedades topológicas clausura, frontera, interior y conjunto derivado. Cada uno de los 10 subconjuntos estará integrado por mínimo 4 elementos:

1) A={ScO,ScO₂,ScO₃,ScO₄}, 2) B={TiO,TiO₂,TiO₃,TiO₄}, 3) C={VO,VO₂,VO₃,VO₄}, 4) D={CrO,CrO₂,CrO₃,CrO₄}, 5) E={MnO,MnO₂,MnO₃,MnO₄,MnO₄}, 6) F={FeO,FeO₂,FeO₃,FeO₄}, 7) G={CoO,CoO₂,CoO₃,CoO₄}, 8) H={NiO,NiO₂,NiO₃,NiO₄}, 9) I={CuO,CuO₂,CuO₃,CuO₄} y 10) J={ZnO,ZnO₂,ZnO₃,ZnO₄}.

3.6 Bibliografía. Citada al final del texto (Favor ver páginas 14 y 15).

4. DESCRIPCIÓN DE LOS ELEMENTOS BÁSICOS DE LA ORGANIZACIÓN DE LA INVESTIGACIÓN

4.1 Cronograma general



4.2 Presupuesto

Tabla 4.2.1 Presupuesto global de la propuesta por fuentes de financiación (en miles de \$).

RUBROS FINANCIABLES	FUENTES		TOTAL
	FODEIN	Contrapartida	
PERSONAL	5.804	26.000	31.804
EQUIPOS	5.195		5.195
SOFTWARE	4.000		4.000
MATERIALES			
SALIDAS DE CAMPO			
MATERIAL BIBLIOGRÁFICO			
PUBLICACIONES Y PATENTES			
SERVICIOS TÉCNICOS			
VIAJES	5.000		5.000
TOTAL	19.999	26.000	45.999

Tabla 4.2.2 Descripción de los gastos de personal (en miles de \$).

Investigador	Formación Académica	Función Dentro Del Proyecto	Dedicación Horas / Semana	Recursos		Total
				FODEIN	Contrapartida	
Emilbus Uribe A.	Doctora en Química.	Investigador Principal	10	No Financiable	13.000	13.000
José M. Cabarcas	Doctor en Física.	Coinvestigador	10	No Financiable	13.000	13.000
Estudiante 1*	Estudiante universitario.	Estudiante de pregrado - USTA.	8	2.902		2.902
Estudiante 2*	Estudiante universitario.	Estudiante de pregrado - USTA.	8	2.902		2.902
TOTAL				5.804	26.000	31.804

*Beca para estudiantes de pregrado de la USTA.

Tabla 4.2.3 Descripción de los equipos que se planea adquirir (en miles de \$).

Equipo	Justificación	Recursos		Total
		FODEIN	Contrapartida	
Portátiles Vostro (cantidad 2)	Indispensables para la realización de la parte teórica y matemática del proyecto	4.446		4.446
Impresora Láser monocromática (cantidad 1)	Indispensable para la impresión de artículos e informes de resultados, etc.	749		749
TOTAL		5.195		5.195

Tabla 4.2.4 Descripción del software que se planea adquirir (en miles de \$).

SOFTWARE	JUSTIFICACIÓN	RECURSOS		TOTAL
		FODEIN	Contrapartida	
STATISTICA licencia	Indispensable para el análisis quimi-topológico.	4.000		4.000
TOTAL		4.000		4.000

Tabla 4.2.5 Descripción y justificación de los viajes (en miles de \$)

Lugar /No. De viajes	Justificación**	Pasajes (\$)	Estadía (\$)	Total días	Recursos		TOTAL
					FODEIN	Contrapartida	
México	*	2.000		40	2.000		2.000
Por definir	**	2.000	1.000	25	3.000		3.000
TOTAL		4.000	1.000	65	5.000		5.000

*Pasantía para discusión de resultados, elaboración de artículos, actualización bibliográfica y para realizar cálculos de átomos en moléculas.

**Presentación de resultados en congresos nacionales o internacionales

***Transporte y alojamiento del investigador, coinvestigador o estudiantes de pregrado que irán a discutir resultados.

4.3 Hojas de vida (CvLAC) y GrupLAC. Favor ver páginas (16 a 25)

4.4 Resultados y productos esperados con sus potenciales beneficiarios:

Tabla 4.4.1 Generación de nuevo conocimiento

Resultado/Producto esperado	Beneficiario
Una mejor comprensión de las interacciones entre un metal de transición del cuarto y el oxígeno presentes en los compuestos TMO_n	Estudiantes, investigadores, universidad, el país.
Predicción de propiedades físicas y químicas de nuevos compuestos TMO_n con posibles aplicaciones industriales, catalíticas y biológicas.	Estudiantes, investigadores, universidad, el país.
Sometimiento a publicación de por lo menos un artículo en revistas indexadas u homologadas por COLCIENCIAS	Estudiantes, investigadores, universidad, el país.
Presentación de los resultados en por lo menos un congreso científico internacional o nacional.	Estudiantes, investigadores, universidad, el país.

Tabla 4.4.2 Fortalecimiento de la comunidad científica

Resultado/Producto esperado	Beneficiario
Formación de recurso humano para la investigación.	Estudiantes, investigadores, universidad, el país.
Fortalecimiento de la capacidad de cooperación científica con grupos nacionales e internacionales.	Estudiantes, investigadores, universidad, el país.
Implementación de nuevas metodologías para la caracterización de las interacciones interatómicas en general.	Estudiantes, investigadores, universidad, el país.

Tabla 4.4.3 Apropiación social del conocimiento

Resultado/Producto esperado	Beneficiario
Dos conferencias divulgativas dirigidas a la comunidad universitaria en general sobre: 1) Interacciones metal de transición-oxígeno: caracterización y clasificación. 2) Quimi-topología: Nueva herramienta con un enorme poder predictivo.	Estudiantes, investigadores, universidad, el país.

Impactos esperados a partir del uso de los resultados:

Tabla 4.4.4 Impactos esperados:

Impacto esperado	Plazo después de finalizado el proyecto: corto, mediano, largo	Supuestos
Formación de recurso humano para la investigación y gestión tecnológica nacional.	Corto	El proyecto es aprobado.
Fortalecimiento de la cooperación con grupos de investigación nacionales e internacionales	Corto	El proyecto es aprobado.
Divulgación entre el público interesado sobre herramientas con poder predictivo como la quimiotopología y el enlace químico en general.	Corto y mediano	El proyecto es aprobado.

Bibliografía

- ¹ Villaveces, J. L. Revista Colombiana de Filosofía de la Ciencia, 1 (2000) 9.
- ² Asimov, I.; Walz-Chojnacki, G.; Reddy, F. Discovering Comets & Meteors (Isaac Asimov's New Library of the Universe), United states, Gareth Stevens Pub. (2001) p. 31.
- ³ Villaveces, J. L. Química y complejidad, Universidad Externado de Colombia, Bogotá, 2005. En: <http://www.scribd.com/doc/3811093/Quimica-y-Complejidad-AMD>
- ⁴ Restrepo, G.; Mesa, H.; Llanos, E.; Villaveces, J. L. J. Chem. Inf. Comput. Sci. 44 (2004) 68.
- ⁵ (a) Kieber-Emmons, M. T.; Riordan, C. G. Acc. Chem. Res. 40 (2007) 618. (b) Cramer, C. J.; Tolman, W. B. Acc. Chem. Res. 40 (2007) 601. (c) Chufán, E. E.; Puiu, S. C.; Karlin, K. D. Acc. Chem. Res. 40 (2007) 563. (d) Korendovych, I. V.; Kryatov, S. V.; Rybak-Akimova, E. V. Acc. Chem. Res. 40 (2007) 510. e) Cox, P. A. Transition Metal Oxides: An Introduction to their Electronic Structure and Properties; Clarendon: Oxford, U.K., (1992). f) Bytheway, I.; Hall, M. B. Chem. Rev. 94 (1994) 639. g) Gong, Y.; Zhou, M.; Andrews, L. Chem. Rev. 109 (2009) 6765.
- ⁶ Mirica, L. M.; Ottenwaelde, X.; Stack, T. D. P. Chem. Rev. 104 (2004) 1013. (b) Costas, M.; Mehn, M. P.; Jensen, M. P.; Que, L., Jr. Chem. Rev. 104 (2004) 939. (c) Crans, D. C.; Smee, J. J.; Gaidamauskas, E.; Yang, L. Q. Chem. Rev. 104 (2004) 849. (d) Lewis, E. A.; Tolman, W. B. Chem. Rev. 104 (2004) 1047.
- ⁷ Basolo, F.; Hoffman, B. M.; Ibers, J. A. Acc. Chem. Res. 8 (1975) 384.
- ⁸ Kasai, P. H.; Jones, P. M. J. Phys. Chem. 90 (1986) 4239.
- ⁹ Gutsev, G. L.; Rao, B. K.; Jena, P. J. Phys. Chem. A 104 (2000) 11961.
- ¹⁰ Becke, A. D. Phys. Rev. A 38 (1988) 3098.

-
- ¹¹ Perdew, J. P.; Wang, Y. Phys. Rev. B 45 (1992) 13244.
- ¹² Turro, N. J.; Ramamurthy, V.; Scaiano, J. C. Principles of Molecular Photochemistry An Introduction, University Science Book, United States of America (2009) p. 88.
- ¹³ Harrison J. F. Chem. Rev. 100 (2000) 679.
- ¹⁴ Uribe, E. A. Tesis doctoral: Quimiotopología de las interacciones entre elementos del cuarto periodo y el hidrógeno. estructura y enlace químico. Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia, 2011.
- ¹⁵ Zhang, Z. X.; Cao, B. B.; Duan, H. M. J. Mol. Struct. (THEOCHEM) 863 (2008) 22.
- ¹⁶ Gutsev, G. L.; Andrews, L.; Bauschlicher, C. W. Chem. Phys. 290 (2003) 47.
- ¹⁷ Gutsev, G. L.; Andrews, L.; Bauschlicher, C. W. Theor. Chem. Acc. 109 (2003) 298.
- ¹⁸ Bauschlicher, C. W.; Gutsev, G. L. Theor. Chem. Acc. 108 (2002) 27.
- ¹⁹ Citra, A.; Andrews, L. J. Phys. Chem. A 104 (2000) 8689.
- ²⁰ Leege, F. S.; Nyberg, G. L.; Peel, B. J. Phys. Chem. A 105 (2001) 7905.
- ²¹ Wang, X.; Andrews, L. J. Phys. Chem. A 107 (2003) 4081.
- ²² Estrada-Salas, R. E.; Valladares, A. A. J. Mol. Struct. (THEOCHEM) 869 (2008) 1.
- ²³ Marlo, M.; Milman, W. Phys. Rev. B 62 (2000) 2899.
- ²⁴ Tsuzuki, S.; Luthi, H. P. J. Chem. Phys. 114 (2001) 3949.
- ²⁵ Filatov, M.; Cremer, D. J. Chem. Phys. 123 (2005) 124101.
- ²⁶ Song, P.; Guan, W.; Yao, C.; Su, Z. M.; Wu, Z. J.; Feng, J. D.; Yan, L. K. Theor. Chem. Acc. 117 (2007) 407.
- ²⁷ Buda, C.; Flores, A.; Cundari, T. R. J. Coord. Chem. 58 (2005) 575.
- ²⁸ McCullough, E. A.; Apra, E.; Nichols, J. J. Phys. Chem. A 101 (1997) 2502.
- ²⁹ Vallet, M.; Faus, J.; Garcia-España, E.; Moratal, J. Introducción a la química bioinorgánica. Editorial Síntesis, Madrid-España (2003) p. 53.
- ³⁰ Bader, R.F.W. Atoms in Molecules. A Quantum Theory. Clarendon Press, Oxford (1990).
- ³¹ Espinosa E.; Alkorta I.; Elguero J.; Mollins E. J. Chem. Phys. 117 (2002) 5529.
- ³² Page, R. D. M. COMPONENT 2.0: User's manual, Auckland: University of Auckland (1989) <http://taxonomy.zoology.gla.ac.uk/rod/cpw.html>
- ³³ Restrepo, G.; Villaveces, J. L. Croat. Chem. Acta. 78 (2005) 275.
- ³⁴ Restrepo, G.; Mesa, H.; Villaveces, J. L. J. Math. Chem. 39 (2006) 363.

Nombre	Emilbus Azelleb Uribe Guerrero
Nombre en citaciones	URIBE, EMILBUS A.
Nacionalidad	Colombiana

Formación Académica

- **Postdoctorado** Centro De Investigación Y De Estudios Avanzados Del Ipn
Química
Marzo de 2011 - Diciembre de 2011
- **Doctorado** Universidad Industrial de Santander - UIS
Doctorado En Química
Febrero de 2006 - Enero de 2011
Quimiotopología de las interacciones entre elementos del cuarto periodo y el hidrógeno. Estructura y enlace químico
- **Pregrado/Universitario** Universidad Industrial de Santander - UIS
QUIMICA
de 2000 - de 2005
ESTUDIO TEORICO DE LOS MONOHIDRUROS DEL CUARTO PERIODO

Formación Complementaria

- **Especialización** Universidad Industrial de Santander - UIS
Curso de Ingles Headway 1 7
de 2000 - de 2001
- **Especialización** Praxis English Academy
Cursos de Inglés
Octubre de 2007 - Octubre de 2008
- **Especialización** Universidad De Pamplona - Udp
Semejanza Cuantica
de 2005 - de 2005

Experiencia profesional

- **Universidad Santo Tomás**
Dedicación: 40 horas semanales Enero de 2012 de
- **Centro De Investigación Y De Estudios Avanzados Del Ipn**
Dedicación: 40 horas semanales Marzo de 2011 Diciembre de 2011
- **Universidad Industrial de Santander - UIS**
Dedicación: 40 horas semanales Febrero de 2006 Febrero de 2011

Actividades de administración
- Otra actividad técnico-científica relevante - *Cargo:* Otra actividad técnico-científica relevante Febrero de 2006 de
Actividades de investigación
- Investigación y Desarrollo - *Título:* Quimiotopología de las interacciones entre elementos del cuarto periodo y el hidrógeno. Estructura y enlace químico Febrero 2006 Enero 2011

Áreas de actuación

Datos generales Producción bibliográfica Producción Técnica Más información Buscar

- Ciencias Exactas y de la Tierra – Química – Físico-Química – Química Teórica
- Ciencias Exactas y de la Tierra – Química

Idiomas

	Habla	Escribe	Lee	Entiende
• Inglés	Aceptable	Aceptable	Aceptable	Aceptable
• Español	Bueno	Bueno	Bueno	Bueno

Líneas de investigación

- Química Teórica: Estudio de las interacciones metal de transición-hidrógeno., *Activa:* Si
- Fisicoquímica teórica, *Activa:* Si

Premios y reconocimientos

- QUIMICA, Universidad Industrial de Santander - UIS - de 2005
- ESTUDIANTE DISTINGUIDO SEGUNDO SEMESTRE DE 2004, Universidad Industrial de Santander - UIS - de 2004
- ESTUDIANTE DISTINGUIDO PRIMER SEMESTRE DE 2004, Universidad Industrial de Santander - UIS - de 2004

Artículos

• Producción bibliográfica - Artículos publicados en revistas científicas - Completo

EMILBUS AZELLEB URIBE GUERRERO, MARTHA CECILIA DAZA ESPINOSA, GUILLERMO RESTREPO, "CHEMOTOPOLOGICAL STUDY OF THE FOURTH PERIOD MONO-HYDRIDES" . En: Grecia Wseas Transactions On Information Science And Applications *ISSN:* 1790-0832 *ed:* v.8 *fasc.* p.1085 - 1090 ,2005

Palabras:

Density Functional Theory, Principal component Analysis, Chemotopology, Cluster Analysis,

• Producción bibliográfica - Artículos publicados en revistas científicas - Completo

EMILBUS AZELLEB URIBE GUERRERO, MARTHA CECILIA DAZA ESPINOSA, JOSE LUIS VILLAVECES, SILVIA ALEJANDRA DELGADO, "On the nature of Copper-Hydrogen bonding: AIM and NBO analysis of CuHn (1 International Journal Of Quantum Chemistry *ISSN:* 0020-7608 *ed:* John Wiley & Sons, Inc. v.110 *fasc.* 3 p.524 - 531 ,2010

Palabras:

Density Functional Theory, Quantum chemical, B3LYP, AIM,

• Producción bibliográfica - Artículos publicados en revistas científicas - Completo

EMILBUS AZELLEB URIBE GUERRERO, MARTHA CECILIA DAZA ESPINOSA, JOSE LUIS VILLAVECES CARDOSO, "CoHn (n = 1 to 3): Classical and non-classical cobalt polyhydride" . En: Holanda Chemical Physics Letters *ISSN:* 0009-2614 *ed:* North-Holland v.490 *fasc.* N/A p.143 - 147 ,2010

• Producción bibliográfica - Artículos publicados en revistas científicas - Completo

EMILBUS AZELLEB URIBE GUERRERO, MARTHA CECILIA DAZA ESPINOSA, GUILLERMO RESTREPO, JOSE LUIS VILLAVECES, "Quantum chemical and chemotopological study of fourth row monohydrides" . En: Holanda Chemical Physics Letters *ISSN:* 0009-2614 *ed:* North-Holland v.428 *fasc.* p.55 - 61 ,2006

Palabras:

chemotopological, Quantum chemical, monohydrides,

Sectores:

Otros sectores,

Trabajos en eventos (capítulos de memoria)

• Producción bibliográfica - Trabajos en eventos (Capítulos de memoria) - Completo

EMILBUS AZELLEB URIBE GUERRERO, MARTHA CECILIA DAZA ESPINOSA, GUILLERMO RESTREPO, "CHEMOTOPOLOGICAL STUDY OF THE FOURTH PERIOD MONO-HYDRIDES" En: Grecia. 2005. *Evento:* 9TH WSEAS INTERNATIONAL CONFERENCE ON COMPUTERS *Ponencia:* Libro: WSEAS TRANSACTION ON INFORMATION SCIENCE & APPLICATIONS, , p.1085 - 1090 , v.8 <, fasc.

Palabras:

Density Functional Theory, Chemotopology, Principal component Analysis,

Areas:

Ciencias Exactas y de la Tierra -- Química -- Físico-Química -- Química Teórica,

Sectores:

Otros sectores,

• Producción bibliográfica - Trabajos en eventos (Capítulos de memoria) - Resumen

EMILBUS AZELLEB URIBE GUERRERO, MARTHA CECILIA DAZA ESPINOSA, SILVIA ALEJANDRA DELGADO, JOSE LUIS VILLAVECES CARDOSO, "ANÁLISIS TOPOLÓGICO Y CARACTERIZACIÓN DEL ENLACE Cu-H Y H-Cu··H-H EN COMPLEJOS CuHn CON 1 Evento: VI Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica *Ponencia:* ANÁLISIS TOPOLÓGICO Y CARACTERIZACIÓN DEL ENLACE Cu-H Y H-Cu··H-H EN COMPLEJOS CuHn CON 1 Libro:, , p. - , v. <, fasc.

Palabras:

POLIHIDRUROS DE METALES DE TRANSICION, ATOMOS EN MOLECULAS,

Areas:

Ciencias Exactas y de la Tierra -- Química -- Físico-Química -- Química Teórica,

Sectores:

Otros sectores,

• Producción bibliográfica - Trabajos en eventos (Capítulos de memoria) - Resumen

EMILBUS AZELLEB URIBE GUERRERO, GUILLERMO RESTREPO, MARTHA CECILIA DAZA ESPINOSA, "Análisis quimiotopológico de los monohidruros del cuarto período" En: Colombia. 2005. *Evento:* XXXI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina *Ponencia:* Análisis quimiotopológico de los monohidruros del cuarto período *Libro:* , , p. - , v. <, fasc.

• Producción bibliográfica - Trabajos en eventos (Capítulos de memoria) - Resumen

EMILBUS AZELLEB URIBE GUERRERO. "INTERACCIONES COORDINATIVAS EN COMPLEJOS CoHn CON 1 Evento: VIII Reunión

EMILBUS AZELLEB URIBE GUERRERO, INTERACCIONES COBRE-HIDRÓGENO EN COMPLEJOS CuHn CON 1 Evento: VII Reunión Mexicana de Fisicoquímica *Ponencia:*INTERACCIONES COBALTO-HIDRÓGENO EN COMPLEJOS CoHn CON 1n<3 *Libro:*, , p. - , v. <, fasc.

• **Producción bibliográfica - Trabajos en eventos (Capítulos de memoria) - Resumen**

EMILBUS AZELLEB URIBE GUERRERO, MARTHA CECILIA DAZA ESPINOSA, GUILLERMO RESTREPO, "ESTUDIO TEORICO DE LOS MONOHIDUROS DEL CUARTO PERIODO" En: Colombia. 2006. *Evento:* XIV CONGRESO COLOMBIANO DE QUIMICA *Ponencia:*ESTUDIO TEORICO DE LOS MONOHIDUROS DEL CUARTO PERIODO *Libro:*ESTUDIO TEORICO DE LOS MONOHIDUROS DEL CUARTO PERIODO, , p.60 - 61 , v.28 <, fasc.80

Palabras:

TEORIA DEL FUNCIONAL DE LA DENSIDAD, ANALISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES, ANALISIS DE AGRUPAMIENTOS, QUIMIOTOPOLOGIA,

Areas:

Ciencias Exactas y de la Tierra -- Química -- Físico-Química -- Química Teórica,

Sectores:

Otros sectores - Otro,

• **Producción bibliográfica - Trabajos en eventos (Capítulos de memoria) - Resumen**

EMILBUS AZELLEB URIBE GUERRERO, MARTHA CECILIA DAZA ESPINOSA, SILVIA ALEJANDRA DELGADO, JOSE LUIS VILLAVECES CARDOSO, "COMPLEJOS DE COBRE - HIDRÓGENO CuHn con 1 Evento: XXXIII Congreso de químicos teóricos de expresión latina (QUITEL XXXIII) *Ponencia:*COMPLEJOS DE COBRE - HIDRÓGENO CuHn con 1*Libro:*, , p. - , v. <, fasc.

Palabras:

HIDRUROS DE COBRE, ATOMOS EN MOLECULAS, B3LYP,

Areas:

Ciencias Exactas y de la Tierra -- Química -- Físico-Química -- Química Teórica,

Sectores:

Otros sectores,

Trabajos dirigidos/tutorías concluidas

• **Trabajos dirigidos/Tutorías concluidas - Trabajo de conclusión de curso de pregrado**

EMILBUS AZELLEB URIBE GUERRERO, MARTHA CECILIA DAZA ESPINOSA, SILVIA ALEJANDRA DELGADO, COMPLEJOS DE COBRE-HIDRÓGENO CuHn con 1*Persona orientada:* Silvia Alejandra Delgado , *Dirigió como:* Cotutor/asesor, 0 meses

Areas:

Ciencias Exactas y de la Tierra -- Química -- Físico-Química -- Química Teórica,

Participación en eventos

• **Datos complementarios - Participación en eventos - Congreso**

XIV CONGRESO COLOMBIANO DE QUIMICA

• **Datos complementarios - Participación en eventos - Congreso**

XXXIII CONGRESO DE QUÍMICOS TEORICOS DE EXPRESION LATINA

• **Datos complementarios - Participación en eventos - Encuentro**

VI Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica.

• **Datos complementarios - Participación en eventos - Encuentro**

III Encuentro Nacional de Químicos Teóricos

Página 18 de 25

Datos generales	Producción bibliográfica	Producción Técnica	Más información	Buscar
-----------------	--------------------------	--------------------	-----------------	--------

Nombre	José Miguel Cabarcas Bolaños
Nombre en citaciones	J.M. CABARCAS
Nacionalidad	Colombiana

Formación Académica

- **Doctorado** Universidad Nacional De La Plata
Doctorado de la Facultad de Ciencias Exactas
Abrilde2006 - Noviembre de 2009
Física mas allá del modelo estándar y su posible observación experimental
- **Pregrado/Universitario** Universidad Nacional de Colombia - Sede Bogotá
Física
Enero de 1998 - Junio de 2004
Cálculo del valor $\langle 0|qq|0 \rangle$ en el Formalismo de las Teorías Efectivas.

Experiencia profesional

- **Universidad Santo Tomas**
Dedicación: 40 horas semanales Febrero de 2011 de
- **Universidad Sergio Arboleda**
Dedicación: 12 horas semanales Agosto de 2010 Diciembre de 2010
- **Universidad Militar Nueva Granada - Unimilitar**
Dedicación: 15 horas semanales Agosto de 2010 Diciembre de 2010
- **Instituto de Física La Plata**
Dedicación: 45 horas semanales Abril de 2006 Abril de 2010
- **Universidad De Cundinamarca - Sede Fusagasuga - Udec**
Dedicación: 20 horas semanales Febrero de 2005 Junio de 2005
- **Universidad De Cundinamarca - Sede Fusagasuga - Udec**
Dedicación: 40 horas semanales Agosto de 2005 Diciembre de 2005
- **Universidad De Cundinamarca - Sede Fusagasuga - Udec**
Dedicación: 40 horas semanales Agosto de 2004 Noviembre de 2004

Áreas de actuación

- Ciencias Exactas y de la Tierra – Física – Física de las Partículas Elementales y Campos – Modelos 331
- Ciencias Exactas y de la Tierra – Física – Física de las Partículas Elementales y Campos – Teoría General de Partículas y Campos

Líneas de investigación

- Física Teórica de Altas Energías., *Activa:* Si

Premios y reconocimientos

- Trabajo de Grado: Mención Meritoria, Universidad Nacional de Colombia - Sede Bogotá - Junio de 2004
- Beca Latinoamericana Tipo I, Conicet - Enero de 2006
- Beca Interna Tipo II, Conicet - Enero de 2009
- Trabajo Doctoral Sobresaliente, Universidad Nacional De La Plata - Noviembre de 2009

Artículos

- **Producción bibliográfica - Artículos publicados en revistas científicas - Completo**

JOSE MIGUEL CABARCAS BOLANOS, ROBERTO MARTINEZ, JAIRO ALEXIS RODRIGUEZ, "Representación no lineal de los Bosones de Goldstone y el Little Higgs". En: Colombia
Revista Colombiana De Física ISSN: 0120-2650 ed: Revista De La Sociedad Colombiana De Física
v.38 fasc.4 p.1611 - , 2006

Palabras:

Little Higgs, Bosones de Goldstone,

- **Producción bibliográfica - Artículos publicados en revistas científicas - Completo**

JOSE MIGUEL CABARCAS BOLANOS, DANIEL ALBERTO GOMEZ DUMM, ROBERTO MARTINEZ, "Phenomenological aspects of the exotic T quark in 331 models" . En: Alemania
European Physical Journal C *ISSN:* 1434-6044 *ed:* Springer Verlag
v.58 *fasc.*N/A p.569 - ,2008

- **Producción bibliográfica - Artículos publicados en revistas científicas - Completo**

JOSE MIGUEL CABARCAS BOLANOS, DANIEL ALBERTO GOMEZ DUMM, ROBERTO MARTINEZ, "Constraints on economical 331 models from mixing of K, Bd and Bs neutral mesons" . En: Estados Unidos
Physical Review D *ISSN:* 1550-2368 *ed:*
v.77 *fasc.*N/A p.1 - ,2008

- **Producción bibliográfica - Artículos publicados en revistas científicas - Completo**

JOSE MIGUEL CABARCAS BOLANOS, DANIEL ALBERTO GOMEZ DUMM, ROBERTO MARTINEZ, "Flavor changing neutral currents in 331 models" . En: Inglaterra
Journal Of Physics G-Nuclear And Particle Physics *ISSN:* 0954-3899 *ed:* Iop Publishing
v.37 *fasc.*N/A p.1 - ,2010

- **Producción bibliográfica - Artículos publicados en revistas científicas - Completo**

JOSE MIGUEL CABARCAS BOLANOS, JAIRO ALEXIS RODRIGUEZ, JAVIER DUARTE CHAVEZ, "Sources of FCNC in SU(3)_C⊗SU(3)_L⊗U(1)_X Models" . En: Estados Unidos
Advances In High Energy Physics *ISSN:* 1687-7357 *ed:*
v.2012 *fasc.*2012 p.1 - 12 ,2012

- **Producción bibliográfica - Artículos publicados en revistas científicas - Completo**

JOHN MORALES APONTE, JOSE MIGUEL CABARCAS BOLANOS, "Renormalización de una Teoría Efectiva" . En: Colombia
Momento *ISSN:* 0121-4470 *ed:* Universidad Nacional de Colombia
v.36 *fasc.*NA p.1 - 17 ,2008

- **Producción bibliográfica - Artículos publicados en revistas científicas - Completo**

JOSE MIGUEL CABARCAS BOLANOS, JAVIER DUARTE CHAVEZ, JAIRO ALEXIS RODRIGUEZ, "Lepton Flavor violation processes in 331 models" . En: Italia
Pos. Proceedings Of Science *ISSN:* 1824-8039 *ed:* Sissa
v.HQL 2012 *fasc.*N/A p.072 - ,2012

Participación en eventos

- **Datos complementarios - Participación en eventos - Congreso**

XXIV Congreso Nacional de Física.

- **Datos complementarios - Participación en eventos - Congreso**

VII Latin American Symposium on High Energy Physics (SILAFAE)

- **Datos complementarios - Participación en eventos - Congreso**

93 Reunión Nacional de Física y XI Reunión de Física Uruguaya

- **Datos complementarios - Participación en eventos - Congreso**

Encontro Nacional de Particulas e Campos

- **Datos complementarios - Participación en eventos - Congreso**

XXI Congreso Nacional de Física

- **Datos complementarios - Participación en eventos - Congreso**

3 CERN CLAF School of High Energy Physics

- **Datos complementarios - Participación en eventos - Congreso**

91 Reunión Nacional de Física

- **Datos complementarios - Participación en eventos - Congreso**

Congreso Nacional de Física

Ciencia e Ingenieria de Materiales

Datos básicos	
Año y mes de formación	2007 - 1
Departamento - Ciudad	Distrito Capital - Bogotá
Líder	Fabio Castillejo Nieto
¿La información de este grupo se ha certificado?	Si el día 2012-11-07
Página web	
E-mail	null
Clasificación	D
Área de conocimiento	Ingenierías -- Ingeniería de Materiales y Metalúrgica
Programa nacional de ciencia y tecnología	Ciencias Básicas
Programa nacional de ciencia y tecnología (secundario)	Desarrollo Tecnológico e Innovación Industrial

Instituciones
1.- Universidad Santo Tomás De Aquino - Sede Bucaramanga - Ustabuc - (No Avalado)
2.- Universidad Santo Tomás - (Avalado)

Líneas de investigación declaradas por el grupo
1.- Fisicoquímica Teórica

Sectores de aplicación

Integrantes del grupo			
Nombre	Vinculación	Horas dedicación	Inicio - Fin Vinculación
1.- Fabio Castillejo Nieto	Investigador		2007/1 - Actual
2.- José Miguel Cabarcas Bolaños	Investigador	10	2011/8 - Actual
3.- Ángela Margarita González Rengifo	Investigador	10	2007/7 - 2010/1
4.- Diana Maritza Marulanda Cardona	Investigador		2007/1 - Actual
5.- Jhon Jairo Olaya Florez	Investigador	4	2007/1 - Actual
6.- Gloria Elena Torres Duarte	Investigador	20	2009/1 - Actual
7.- Emilbus Azelleb Uribe Guerrero	Investigador	10	2012/2 - Actual
8.- David Guillermo Bernal Varas	Estudiante	5	2010/1 - Actual
9.- Héctor Cifuentes Aya	Estudiante	40	2007/1 - Actual
10.- John Daved Fuentes Mariscal	Estudiante	0	2008/1 - Actual
11.- Nelson Rincon Quiñonez	Estudiante	40	2007/1 - Actual
12.- Olivo Rodriguez	Estudiante	40	2008/1 - Actual
13.- Mauricio Alejandro Sierra Cetina	Estudiante	40	2007/1 - Actual

Producción
Artículos publicados en revistas científicas
1.- Completo: Deposición de carburo de niobio por la técnica de deposición/difusión termorreactiva (TRD) en aceros de bajo carbono Colombia, Revista Inge@Uan ISSN: 2145-0935, 2011 vol:2 fasc: 3 págs: 56 - 58 Autores: DAVID BERNAL, FABIO CASTILLEJO NIETO, DIANA MARITZA MARULANDA,
2.- Completo: ELECTRICAL FURNACE FOR PRODUCING CARBIDE COATINGS USING THE THERMOREACTIVE

DEPOSITION/DIFFUSION TECHNIQUE

Colombia, Dyna ISSN: 0012-7353, 2011 vol:170 fasc: N/A págs: 192 - 197

Autores: FABIO CASTILLEJO NIETO,

Trabajos en eventos (Capítulos de memoria)

1.- **Resumen** : Estudio Microestructural de Multicapas Nanométricas de Cr/CrN Depositadas por la Técnica de Sputtering con Mangetrón Desbalanceado
Colombia, Nacional Evento: III SIMPOSIO NACIONAL DE NANOTECNOLOGÍA - NANOCOLOMBIA 2009 Ponencia: Estudio Microestructural de Multicapas Nanométricas de Cr/CrN Depositadas por la Técnica de Sputtering con Mangetrón Desbalanceado año:2009, ISBN: vol: págs: ,
Autores: DIANA MARITZA MARULANDA,

Libros publicados

Capítulos de libro publicados

Textos en publicaciones no científicas

Partituras musicales

Prefacio, epílogo

Otra producción bibliográfica

Softwares

Productos tecnológicos

Procesos o técnicas

Trabajos técnicos

Normas

Cartas, mapas o similares

Cursos de corta duración dictados

Desarrollo de material didáctico o de instrucción

Editoración o revisión

Mantenimiento de obras artísticas

Organización de eventos

Programas en radio o TV

Informes de investigación

Presentación de trabajo**Otra producción técnica****Producción artística/cultural****Trabajos dirigidos/Tutorías concluidas**

1.- **Trabajo de conclusión de curso de pregrado** : ESTUDIO DE LA ADHERENCIA ENTRE UNA RESINA COMERCIAL Y LA FIBRA NATURAL DE FIQUE
Colombia, 2007, Tutor principal, Orientados: HUGO ERNESTO LOPEZ LOZANO, INGENIERIA MECANICA, Universidad Santo Tomás De Aquino - Sede Bucaramanga - Ustabuc.
Autores: FABIO CASTILLEJO NIETO, HUGO ERNESTO LOPEZ LOZANO,

2.- **Trabajo de conclusión de curso de pregrado** : DISEÑO Y CONSTRUCCIÓN DE UN HORNO ELÉCTRICO DE INDUCCIÓN PARA REALIZAR PROCESO TRD
Colombia, 2009, Tutor principal, Orientados: Olivo Rodrigue Orduz, Ingenieria Mecanica, Universidad Santo Tomas de Aquino.
Autores:

Demás trabajos**Jurado/Comisiones evaluadoras de trabajo de grado****Participación en comités de evaluación****Trabajos dirigidos/Tutorías en marcha****Empresas de I+D****Proyectos**

1.- RECUBRIMIENTOS DE CARBUROS TERNARIOS DEPOSITADOS CON LA TÉCNICA DE TRD; 2009 -
recubrimientos de carburos mixtos(VNbC, CrVC y CrNbC) serán producidas y caracterizadas usando la técnica de deposición por difusión termoreactiva TRD. las capas obtenidas van a ser caracterizadas usando XRD, TEM, SEM, microscopia óptica, microdureza y pruebas de resistencia al desgaste y resistencia a la corrosión. se espera que las capas de carburos ternarios alcancen mejores desempeños que los exhibidos por los sistemas binarios que se producen actualmente de VC y NbC.