

CURRICULUM VITAE

I- DATOS PERSONALES

APELLIDO Y NOMBRES: CASTRO, Eduardo Alberto

CORREO ELECTRÓNICO: castro@quimica.unlp.edu.ar / eacast@gmail.com /
ecastro@inifta.unlp.edu.ar

NACIONALIDAD: Argentino

CARGOS Y FUNCIONES ACTUALES

- Miembro de la Carrera del Investigador Científico del CONICET, Categoría Investigador Superior, desempeñando tareas en el INIFTA (UNLP-CONICET)
- Profesor Titular del Área Físicoquímica de la Facultad de Ciencias Exactas de la UNLP.
- Miembro del Cuerpo Académico de la Especialización y la Maestría en Tecnología de los Alimentos de la Facultad Regional de Avellaneda, Resolución No. 427/2007. Cátedra de Química de Alimentos y Miembro del Seminario de Integración.
- Docente de la Carrera del Doctorado en Ingeniería de Materiales, UTN, Regional La Plata, a partir de 2011, Área de Asignaturas Humanísticas.
- Áreas de Especialización en tareas de docencia e investigación: Educación en Ciencias, Química de Alimentos, Físicoquímica, Química Teórica y Computacional, Físicoquímica Orgánica, Físico-Matemática, Químico-Matemática, Farmacoquímica, Química Medicinal.
- Asesor Pedagógico del Colegio de nivel primario y secundario, Nueva Escuela del Sur, Bernal, Prov. Buenos Aires.
- Vicepresidente I de la Sociedad Científica Argentina.
- Secretario de la Asociación Química Argentina.
- Director de la Maestría en Tecnología de los Alimentos, UTN-RA/UNLanùs

II ESTUDIOS CURSADOS Y TÍTULOS OBTENIDOS

SECUNDARIO: Técnico Químico (expedido por el CONET, Diciembre 1962).

UNIVERSITARIOS DE GRADO: Químico Ciclo Básico, UNLP, 1968.

Licenciado en Ciencias Químicas (Orientación Físicoquímica), expedido por la Universidad Nacional de La Plata, 1970.

UNIVERSITARIO DE POSTGRADO: Doctor en Ciencias Químicas (Orientación Físicoquímica), expedido por la Universidad Nacional de La Plata el 17/3/72.

CURSOS DE POSTGRADO

- Lógica y Teoría de Conjuntos, Facultad de Ciencias Exactas, Departamento de Matemáticas, UNLP, 1971.
- Análisis Real, Facultad de Ciencias Exactas, Departamento de Matemáticas, UNLP, 1972.
- Cadenas Finitas de Markov, Facultad de Ciencias Exactas, Departamento de Matemáticas, UNLP, 1972.
- Termodinámica Estadística, Facultad de Ciencias Exactas, Departamento de Química, UNLP, 1973.
- Lógica Simbólica, Facultad de Humanidades, Departamento de Filosofía, UNLP, 1973.
- Seminario de Química Cuántica, Laboratorio de Espectroscopía Molecular, Facultad de Ciencias Exactas, Departamento de Física, UNLP, 1974.
- Métodos Numéricos, Facultad de Ciencias Exactas, Departamento de Química, UNLP, 1975.
- Seminario de Química Teórica, Instituto de Estructura de la Materia, Laboratorio de Química Cuántica, CSIC, Madrid, España, 1979.
- Curso Avanzado de Química Teórica, I Escuela Latinoamericana de Química Teórica, INIFTA, La Plata, Argentina, 1981.
- Seminario de Física Atómica y Molecular, Departamento de Física, UNLP, 1982.
- Curso Avanzado de Química Teórica, II Escuela Latinoamericana de Química Teórica, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay, 1982.
- Ciclo de Conferencias Regionales de Defensa Nacional, UNLP, 1981.
- Teoría de Propagadores en Química Cuántica, INIFTA, La Plata, 1983.
- La Ciencias Frente a los Confines del Conocimiento, Sociedad Científica Argentina, 1987.
- Curso sobre "Premisas para una Pedagogía de Síntesis", Sociedad Científica Argentina, 1988.
- Taller sobre "Reflexiones sobre las Representaciones Conscientes e Inconscientes del Docente en Química", VI Reunión Nacional de Educación en la Química, Universidad Nacional de Tucumán, Facultad de Agronomía y Zootecnia, Tucumán, 1992.
- Taller sobre "El Pensamiento Práctico de los Profesores en Química y su Relación con el Aprendizaje", II Jornadas en Enseñanza Universitaria de la Química, Facultad de Farmacia y Bioquímica, UBA, 27-29/4/95.
- Seminario-Taller sobre "Formación Docente Universitaria", Universidad Nacional de La Plata, La Plata, 12/4/95.
- Curso Internacional de "Nuevas Tecnologías de la Información y la Comunicación en la Educación, Centro de Diseño, Producción, Evaluación e Investigación de Recursos Multimediales para el Aprendizaje", Buenos Aires, 9-10/5/96.
- "Introducción a la Simulación por Dinámica Molecular", INIFTA, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, Segundo Semestre 1996.
- "El Proceso de Enseñanza de la Química y su Relación con el Pensamiento Práctico y Pedagógico del Docente", VIII Reunión Nacional de Educadores en la Química (REQ VII), Universidad Nacional de Rosario, Rosario, 14-18/10/96.
- Taller sobre el Tema "En el Pensar, Sentir y Actuar También hay Química?", V Congreso Provincial de Educadores en la Química de la Provincia de Buenos Aires y I Congreso Regional de Educadores en la Química, Facultad de Ciencias Veterinarias, Universidad Nacional del Centro de la Prov. Buenos Aires, 1-3/10/97.
- Taller sobre el Tema "Propiedades, Estructura y Reactividad en Química Orgánica,

ídem.

- Taller “Instrumentos de Selección Múltiple en la Evaluación de Cursos Básicos de Química”, III Jornadas de la Enseñanza Universitaria de la Química”, Universidad Nacional de Córdoba, Complejo Vaquerías, 10-12/11/97.
- Taller sobre Herramientas de Organización y Gestión Administrativa para Entidades sin Fines de Lucro, Centro de Estudios de Estado y Sociedad, Universidad de San Andrés y Universidad Torcuato Di Tella, Buenos Aires, 21/5/98.
- Curso “El Hombre y la Felicidad” del Ciclo de Cultura y Ética Social, Centro de Investigaciones de Ética Social, Instituto Terrero, La Plata, 14/9 al 12/10/00.
- Seminario de Liderazgo Efectivo, Innova-T, CONICET, Hotel Savoy, Buenos Aires, 31/3 y 1/4/04.
- Tópicos de Quimiometría I, Asociación Argentina de Químicos Analíticos, UNR, 6/9 al 19/11/04.
- Taller “Compromiso versus Estados de Ánimo”, Munay Entrenamientos de Liderazgo Personal, Avda. de Mayo 749, 2° Piso, Ofic. 11, 1084 Capital Federal, 2004.
- Curso “Nuevas Formas de Liderazgo en la Conformación de los Equipos de Trabajo”, Asociación Química Argentina, Buenos Aires, 9-10/9/04.
- Ciclo de Conferencias Magistrales “Manuel Belgrano, sus Ideas y su Tiempo. Tradiciones, Doctrina y Crónicas”, Academia Belgraniana de la República Argentina, Museo Mitre, Buenos Aires, 2005.
- Introducción a la Bibliometría y a sus Aplicaciones, Sociedad Científica Argentina, 15-16/11/07.

III- ANTECEDENTES EN INVESTIGACIÓN

- Becario del CONICET durante los años 1970-1971 en la Categoría de Iniciación y durante los años 1972-1973 en la Categoría de Perfeccionamiento, para desarrollar tareas de investigación sobre el tema "Cálculo Teórico de Estructuras Electrónicas Moleculares" en el Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, bajo la dirección del Dr. Oscar Manuel Sorraín.
- Becario del Departamento de Matemáticas de la Facultad de Ingeniería, UNLP, para estudiar temas de Teoría de Grafos, bajo la dirección de la Dra. Lía Oubiña, 1967.
- Miembro de la Carrera del Investigador Científico y Tecnológico del CONICET a partir del 1/3/74 y continúa, desarrollando tareas de investigación en el área de la Química Teórica en la División Química Teórica del INIFTA hasta el 30/6/92 y posteriormente en el CEQUINOR, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, hasta el 31/8/03.
Categoría actual: Investigador Superior designado a partir del 27/10/99, Resolución N°2303.
- Adscripto a la Dirección del INIFTA desde 1985 a 1988.
- Categorización en el Sistema de Incentivos: Clase 1
- Director del Proyecto “Estudio, Desarrollo, Aplicación y Correlación Teórico-Experimental de Métodos y Modelos Químico-Teóricos y Fisicomatemáticos de Interés Fisicoquímico”, desde 1978 y continúa.
- Director del Proyecto “Innovación en la Enseñanza de la Química Básica a Través de Nuevas Herramientas Didácticas y de la Incorporación de la Química del Ambiente, UNNE, 2000 y continúa.

- Director del INIFTA por concurso a partir del 1/9/03 al 17/12/09. Designado en el cargo de Director del Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas por Resolución Conjunta CONICET N° 1278 y Resolución Conjunta UNLP N° 9 del 8/8/03, hasta el 17/12/09.
- Director del Área de Investigación “*Ciencia de los Materiales*”, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Catamarca, Resolución FCEyN N° 080/05, a partir del 23/6/05 y continúa.

IV- ANTECEDENTES DOCENTES

- Ayudante de Trabajos Prácticos en la Escuela Nacional de Educación Técnica #1 de Avellaneda, Industrias Químicas, CONET, 4/64 al 7/65.
- Ayudante Alumno en la Cátedra de Álgebra, Curso de Ingreso, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, durante los años 1965, 1966 y 1967.
- Ayudante Alumno en la Cátedra de Química Analítica Cualitativa-Cuantitativa, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 5/67 al 2/69.
- Ayudante Diplomado en la Cátedra de Química Analítica Cualitativa-Cuantitativa, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 6/69 al 2/70.
- Ayudante Diplomado en la Cátedra de Análisis Matemático I, Facultad de Ciencias Exactas, Departamento de Matemáticas, UNLP, desde el 1/6/70 al 1/9/72, Nota #500 del 1/6/70.
- Jefe de Trabajos Prácticos a cargo del dictado del curso de clases teóricas en la Cátedra de Análisis Matemático I, Facultad de Ciencias Exactas, Departamento de Matemáticas, UNLP, desde el 1/9/72 al 1/3/73, Nota #1389 del 10/10/72.
- Ayudante Diplomado en la Cátedra de Introducción a la Mecánica Cuántica, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, desde el 1/4/72 al 1/12/78.
- Jefe de Trabajos Prácticos en la Cátedra de Introducción a la Mecánica Cuántica, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, desde el 19/4/79 al 31/12/79, Exp. 700-12998/79, Resol. #144 del 19/4/79.
- Jefe de Trabajos Prácticos en la Cátedra de Mecánica Analítica, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, desde el 1/3/74 al 31/12/74.
- Profesor Adjunto (ad-honorem) en la Cátedra de Fisicoquímica II, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, desde el 22/3/77 al 31/5/79.
- Profesor Titular de la Facultad de Ciencias Exactas, Naturales y Agrimensura, Universidad Nacional del Nordeste, a cargo del dictado de la Asignatura Fisicoquímica II, durante los años 1976 y 1977.
- Profesor de Matemáticas en el Curso de Ingreso de la Facultad de Ingeniería, UNLP, año 1978.
- Coordinador del Seminario de Temas de Química Teórica que se dictó en el INIFTA entre los años 1977-1992.
- Coordinador de los Seminarios de Química del Programa QUINOR, 1992-1994.
- Jefe de Trabajos Prácticos en la Cátedra de Fisicoquímica II, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, desde el 1/4/79 al 31/5/79, Exp. 700-13039/79, Resolución #154 del 19/4/79.
- Profesor Adjunto en la Cátedra de Fisicoquímica II, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP desde el 11/6/79 al 17/6/86, Exp. 741-13262/79, Resolución #277 del 21/5/79.
- Coordinador de la asignatura Matemáticas del Curso de Ingreso, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 1980.
- Ayudante de Trabajos Prácticos en la Cátedra de Lógica y Teoría de Conjuntos, Facultad de

Ciencias Exactas, UNLP, como parte del cumplimiento de las obligaciones emanadas de la obtención de una Beca de estudio, otorgada por el Departamento de Fisicomatemáticas de la Facultad de Ingeniería, UNLP, 1976.

- Profesor Asociado (ad-honorem) en la Cátedra de Fisicoquímica II, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, desde el 28/10/81 al 17/6/86, Exp. 700-17905/81, Resolución #368.
- Coordinador de la asignatura Química del Curso Preparatorio de Ingreso a la Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 1984, Resolución 010 del 13/2/84.
- Profesor Invitado para dictar cursos de Química Teórica en las Escuelas Latinoamericanas de Química Teórica llevadas a cabo en Uruguay (1982), México (1983), Venezuela (1984) y Cuba (1986).
- Profesor Asociado de Computación (Doctorado en Ciencias Químicas), por extensión del cargo de Profesor del Area Fisicoquímica, desde el 1/8/84 al 31/12/86.
- Profesor Titular Ordinario del Area Fisicoquímica (D.E.), Departamento de Química, UNLP, desde el 18/6/86 y continúa, designado por el Consejo Superior Provisorio de la UNLP el 17/6/86, Exp. 700-24035/85, Resol. #565 del 11/8/86. El 7/2/94 se aprobó la renovación de la Designación Ordinaria a partir del 16/8/93, según Exp. # 700-40987/1993. Confirmado en el cargo según expediente nro. 700-55633 del Honorable Consejo Superior de la UNLP, 18/12/01.
- Profesor a cargo de la asignatura Introducción a la Mecánica Cuántica y Química Teórica (Doctorado en Ciencias Químicas), Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, desde 1986 y continúa.
- Coordinador General de la asignatura Química del Curso Preparatorio de Ingreso, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 1988.
- Designado Profesor Invitado en carácter de "Huésped Oficial" de la Universidad Nacional del Sur, Departamento de Química e Ingeniería Química, para dictar conferencias sobre temas de Química Teórica y Educación Química, en dicho departamento, Expdte. # R-0681 del 6/11/87 de la UNS, Bahía Blanca, Prov. Buenos Aires.
- Profesor en la VII Escuela Latinoamericana de Química Teórica, 1994, La Plata, a cargo del dictado del curso de "Cálculo de Estructuras Electrónicas Moleculares".
- Profesor de la Maestría en Didáctica de las Ciencias Experimentales, Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, a partir del año 1997 y continúa.
- Profesor Titular de la Universidad CAECE, Buenos Aires, 1998-1999.
- Profesor Titular Interino con Dedicación Simple de la Cátedra "Técnicas de Expresión Oral y Escrita"(833), Departamento de Ingeniería de Producción, Carrera de Ingeniería Industrial (025), Facultad de Ingeniería (UNLP), entre 1/11/98 y 10/7/01.
- Profesor Titular Ordinario (DS) de la Cátedra 833 "Técnicas de Expresión Oral y Escrita" (Código 8-P-20) a partir del 10/7/01. A partir del año 2002 esta asignatura se reconvirtió en la denominada "Humanística B". Cargo renovado en el año 2008 según Ordenanza 174/86, Código 8-P-20/4, S952 Humanística B, con cese de funciones el 1/7/2015, Resolución 773/08. Se continúa en esta labor.
- Profesor Titular Estable del Doctorado en Química del Programa de Postgrado en Ciencias Químicas, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis, a partir de Octubre de 1998 y continúa. Resolución CD-0219/07.
- Profesor de la asignatura Lógica, Ciclo Polimodal, Nueva Escuela del Sur, a partir de 2001 y continúa.

- Director del Programa de Educación Continua para Adultos Mayores, Nueva Escuela del Sur, Bernal, Bs. As., 2002-2003.
- Director de la Carrera de Ingeniería Industrial, Facultad de Ingeniería, UNLP, a partir del 15/6/05, Resolución No. 538, Expdte. 300-004.024/05 y hasta 15/07/10.
- Profesor Titular (ad-honorem) de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad Nacional de Catamarca, a partir del 13/12/05, Resolución F.C.E. y N No. 182/05.
- Profesor Titular Ordinario de la Cátedra “Práctica Profesional Supervisada”, de la Carrera de Ingeniería Industrial, por extensión de actividades como Director de Carrera, a partir del año 2006 y continúa.
- Integrante del Cuerpo Docente y Profesor de la Asignatura Química de los Alimentos, de la Maestría de Tecnología de Alimentos, Universidad Tecnológica Nacional, Regional Avellaneda y Universidad Nacional de Lanús, Resolución No. 427/07 del Consejo Superior Universitario, Septiembre 2007.
- Profesor Responsable de los Cursos “Las Organizaciones, Sentido y Significado” y “Técnicas de Comunicación Científica” de la Carrera de Postgrado Doctorado en Ingeniería-Mención Materiales, Facultad Regional La Plata, Universidad Tecnológica Nacional, Resolución No. 688/07 del Consejo Superior de la UTN, 10/07/2008.
- Director de la Maestría en “Gestión y Evaluación en Ciencia y Técnica”, Universidad de Ciencias y Estudios Sociales (UCES), Buenos Aires, a partir del año 2010.
- Director del Instituto de Cursos y Conferencias de la Sociedad Científica Argentina, a partir del 01/03/10.

VIAJES DE ESTUDIO

- Invitado por el Consejo Superior de Investigación Científica (CSIC) de España para realizar trabajos de investigación en el campo de la Química Teórica en el Instituto de Estructura de la Materia, Laboratorio de Química Cuántica, Madrid, 1/1/79 al 28/2/79.
- Invitado por la Universidad de la República, Facultad de Química, Cátedra de Química Cuántica, Montevideo, Uruguay, en carácter de Profesor de la II Escuela Latinoamericana de Química Teórica, 1982.
- Profesor de la III Escuela Latinoamericana de Química Teórica, invitado por el Departamento de Química de la Universidad Autónoma de México, México, 1983.
- Profesor invitado de la Universidad de Alberta, Edmonton, Alberta, Canadá, para desarrollar tareas de investigación en Química Teórica en el Departamento de Química Teórica, 1/6/84 al 29/7/84.
- Profesor invitado del Instituto Venezolano de Investigación Científica (IVIC) para dictar un curso de Química Cuántica en la IV Escuela Latinoamericana de Química Teórica, Caracas, Venezuela, 1984.
- Invitado en carácter de "Symposium Leader" al 1986 Sanibel Symposium on Quantum Chemistry and Solid State Theory, Marineland, Florida, USA, 10-15/3/86.
- Invitado en carácter de “Invited Speaker” a la 69th Canadian Chemical Conference, University of Saskatchewan, Canada, 1-4/6/86.
- Invitado en carácter de "Symposium Leader" al 1987 Sanibel Symposium on Quantum Chemistry and Solid State Theory, Marineland, Florida, USA, 15-21/3/87.
- Profesor invitado por la Universidad de La Habana a la V Escuela Latinoamericana de Química Teórica, La Habana, Cuba, 17-28/11/86.

- Invitado en carácter de Conferencista Plenario al Curso de Química Teórica de Verano y Espectroscopía Molecular, Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso, Chile, 12-24/1/87.
- Invitado en carácter de Conferencista Plenario al XVII Congreso de los Químicos Teóricos de Expresión Latina, Peñíscola, España, 20-25/9/87.
- Invitado por el Departamento de Química Cuántica del CSIC para participar de una jornada de trabajo en el Instituto de Estructura de la Materia, Laboratorio de Química Cuántica, 17-19/9/87, Madrid, España.
- Invitado en carácter de Conferencista Plenario al Workshop on Finite Dimensional Integrable Nonlinear Dynamical Systems, Rand Afrikans University, Johannesburg, South Africa, 10-14/1/88.
- Profesor Invitado por la Universidad Nacional del Sur, para dictar conferencias sobre temas de Química Teórica y Educación en el Departamento de Ciencias Exactas e Ingeniería Química, Bahía Blanca, 5-7/11/87.
- Profesor Invitado para dictar un Curso sobre "Suma de Series Perturbativas Divergentes" en la Escuela Latinoamericana de Física, Cuernavaca, México, 7-25/8/89.
- Profesor invitado por la Universidad Nacional de San Luis, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia para dictar y coordinar el Curso de Introducción a la Escritura Científica dentro del marco del Proyecto Integral de Educación Química (PIEQ), 22-31/8/89.
- Invitado en carácter de "Symposium Leader" al Sanibel Symposium, Ponce de Leon Convention Center, St. Augustine, Florida, USA, 17-24/3/90.
- Invitado en carácter de Conferencista Plenario al II International Symposium on Far From Equilibrium Dynamics of Chemical Systems, Polish Academy of Sciences, Swidno, Poland, 3-7/9/90.
- Invitado como miembro del Comité de Honor del XIX Congresso dei Chimici Theorici dei Paesi di Espressione Latina, Istituto Superiore di Sanità, Roma, Italia, 10-14/9/90.
- Invitado en carácter de Conferencista Plenario al III Congreso Boliviano de Química, La Paz, Bolivia, 21-24/8/90.
- Invitado como Conferencista Plenario al Mini-Simposio en Química Cuántica, Sección Métodos Ab-Initio y Aproximados, Pontificia Universidad Católica de Chile, Facultad de Química, Santiago, Chile, 9-11/9/90.
- Acreedor a un subsidio de la Comisión de las Comunidades Europeas para tomar parte del Proyecto de Investigación sobre el tema "Molecular Orbital Calculations Related to Chemical Reactivity", llevado a cabo en el Departamento de Química y Química Industrial Universidad de Pisa, Pisa, Italia, Enero-Febrero 1992.
- Invitado en carácter de "Symposium Leader" al Sanibel Symposium, St. Augustine, Florida, USA, participando en una de las sesiones de conferencias plenarias como Chairman de la misma, 12-22/3/92.
- Asistente a la 12th Biennial Conference on Chemical Education, Universidad de Davis, California, USA, como acreedor a una Beca para Investigadores Formados otorgada por la American Chemical Society en el marco del Convenio de colaboración entre la ACS y la AQA, 2-6/8/92.
- Invitado al XX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Mérida, Venezuela, como miembro del Comité de Honor del Congreso, 12-17/10/92.
- Invitado en carácter de Disertante Plenario del Congreso Costarricense de Física, Universidad de Costa Rica, San José, Costa Rica, 7-11/9/92.

- Invitado como Conferencista Plenario a la VI Reunión Nacional de Educación en la Química, Universidad Nacional de Tucumán, Horco Molle, Tucumán, 20-23/9/92.
 - Invitado en carácter de "Symposium Leader" al XXXIII Sanibel Symposium, Ponce de Leon Resort and Convention Center, St. Augustine, Florida, USA, 13-20/3/1993.
 - Invitado en carácter de Conferencista Plenario y Coordinador de las Conferencias Plenarias Internacionales al IV Congreso Boliviano de Química, Universidad Mayor de San Marcos, La Paz, Bolivia, 14-16/4/93.
 - Invitado al XXX^o Congres International des Chimistes Theoricien d'Expression Latine, como miembro del Comité de Honor del Congreso y Conferencista Plenario, Grenoble, Francia, 20-24/9/93.
 - Invitado por el Director de Investigación del CNRS, Laboratoire de Chimie Physique, París, Francia, para dictar un Seminario de Química Teórica, 25-30/9/93.
 - Invitado en carácter de "Symposium Leader" al XXXIV Sanibel Symposium, Marriot at Sawgrass Resort, Ponte Vedra Beach, Florida, USA, 12-19/2/94.
 - Invitado al US-Latin American Workshop on the "Molecular and Material Sciences: Theoretical and Computational Aspects", University of Florida, Gainesville, Florida, USA, 10-12/3/93.
 - Invitado al US-Latin American Workshop on the "Molecular and Material Sciences: Theoretical and Computational Aspects", University of Florida Campus in Gainesville, Gainesville, Florida, USA, 8-10/2/94.
 - Invitado a las Primeras Jornadas de Especialistas en Enseñanza de la Química, Facultad de Odontología, Universidad Nacional de Rosario, 1-2/11/93.
 - Invitado al Spring Workshop in Quantum Chemistry, Montevideo, Uruguay, 5-7/11/93.
 - Invitado a la International Conference "Science and Mathematics Education for the 21st. Century: Towards Innovatory Approaches", Universidad de Concepción, Concepción, Chile, 26/9 al 1/10/94.
- Invitado como Conferencista Plenario a la VIII Reunión Nacional de Educadores en la Química (REQ VIII), Universidad Nacional de Rosario, Rosario, Argentina, 14-18/10/96.
- Invitado como Conferencista Plenario a la Reunión Nacional de la Asociación Física Argentina, Universidad Nacional de San Luis, 21-26/9/97.
- Invitado en carácter de Conferencista Plenario de la Jornadas Científicas 1997 de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional del Nordeste, Corrientes, 29/9/97 al 3/10/97.
- Invitado por el Prof. Imre Csizmadia para visitar el Laboratorio de Química Computacional del Departamento de Química de la Universidad de Toronto, Toronto, Canadá, durante el lapso 13-21/2/98.
 - Invitado por el Instituto de Física, Laboratorio de Cuernavaca, UNAM, Cuernavaca, México, para participar en carácter de Conferencista Plenario del 1999 US-Latin American Workshop on Molecular and Material Sciences: Theoretical and Computational Aspects, Cuernavaca, 24-26/2/99.
 - Invitado por la Universidad de San Antonio, Texas, USA, para iniciar las tratativas a fin de establecer convenios bilaterales entre dicha universidad y la UNLP y la Universidad CAECE, respectivamente, 13-17/2/99.
 - Invitado como Conferencista Plenario a la Reunión Internacional ICUC-PIEQ XV de Educación Química para el Desarrollo Sustentable, Universidad Nacional de San Luis, San Luis, Argentina, 26-28/10/06.

- Invitado como Conferencista Semiplenario al Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL), San Andrés, Colombia, 17-23/9/09.
- Invitado como Conferencista Plenario en el II Mathematical Chemistry Workshop of the Americas, Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia, 19-24/07/10.

V- OTROS ANTECEDENTES

PARTICIPACIÓN EN REUNIONES CIENTÍFICAS

Se asistió y/o se presentaron comunicaciones originales a las siguientes reuniones, cuyo detalle se presenta en el apartado d) de la Sección VI.

- I Reunión Argentina de Fisicoquímica, INIFTA, La Plata, 1978.
- II Congreso Argentino de Fisicoquímica, Córdoba, 1980.
- III Congreso Argentino de Fisicoquímica, INIFTA, La Plata, 1982.
- IV Congreso Argentino de Fisicoquímica, Río Cuarto, Córdoba, 1985.
- XII, XIII, XIV, XV, XVI y XVII Congresos Latinoamericanos de Química.
- II y IV Congresos Sobre Medios No Convencionales de Enseñanza.
- Reuniones Nacionales de Física 1979, 1980, 1981, 1982, 1984 y 1985.
- II Reunión Argentina de Fisicoquímica Orgánica.
- XVI y XVII Congresos Argentinos de Química.
- IV and V International Congress on Quantum Chemistry.
- VII Congreso de Investigación Científica.
- VII and VIII International Conferences on Chemical Education.
- I Reunión Nacional de Profesores de Metodología y Práctica de la Enseñanza de la Química.
- II y III Reuniones Nacionales de Educación en la Química.
- I, II y III Jornadas Argentinas de Informática en las Ciencias Químicas.
- Congreso Iberoamericano de Ciencias Químicas.
- I, II, III y IV Escuelas Latinoamericanas de Química Teórica.
- Congreso Panamericano de Química.
- I Congreso Internacional sobre Investigación en la Didáctica de las Ciencias y de las Matemáticas.
- International Symposium on Applications of Mathematical Concepts to Chemistry, Yugoslavia, 1985.
- International Symposia on Quantum Chemistry and Solid State Theory, Sanibel Symposia, Florida, USA, 1986, 1987 and 1988.
- Latin American Workshops in Quantum Chemistry and Solid State Theory, University of Florida, Gainesville, Florida, USA, 1986 y 1987.
- Symposium on Computational and Mathematical Chemistry, Saskatoon, Canada, 1986.
- CTEL XVIe Congrès des Chimistes Théoriciens d' Expression Latine, Lyon, France, 1986.
- III Simposio Brasileiro de Química Teórica, São Carlos, San Pablo, Brasil, 1985.
- Seminario Regional de la Alimentación "Rol de la Química en el Suministro de Alimentos", Asociación Química Argentina, International Union of Pure and Applied Chemistry and American Chemical Society, Fundación Banco Boston, Buenos Aires, 28-30/5/86.
- Simposio Internacional "La Migración de Científicos en los Países del Cono Sur:

- Determinaciones Económicas y Políticas", Fundación para el Estudio del Pensamiento Argentino e Iberoamericano (FEPAI), Regional Cono Sur.
- I Congreso Argentino y Latinoamericano de Educación en la Química (CEQI), Cosquín, Córdoba, 20-23/8/86.
 - III Reunión Latinoamericana de Ciencias Farmacéuticas, Montevideo, Uruguay, 30/11 al 5/12/86.
 - Colloque Franco Latinoamericain de Physique, Buenos Aires, Aout 28 - Septembre 5, 1986.
 - 71a. Reunión de la Asociación Física Argentina, La Cumbre, Córdoba, 13-17/10/86.
 - X International Conference on Molecular Energy Transfer, Emmetten, Switzerland, 23-28/8/87.
 - I Seminario sobre Metodología, Actualización y Perfeccionamiento para Profesores de Química, International Union of Pure and Applied Chemistry y Asociación Química Argentina, División Enseñanza de la Química de la AQA, La Plata, 8-12/12/86.
 - V Escuela Latinoamericana de Química Teórica, La Habana, Cuba, 17-28/11/86.
 - Curso Internacional de Química Teórica y Espectroscopía Molecular, Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso, Chile, 12-24/1/87.
 - IX International Conference on Chemical Education (IX ICCE), São Paulo, Brasil, 26-31/7/87.
 - V Congreso Argentino de Fisicoquímica, Mar del Plata, 27-30/4/87.
 - II Congreso Internacional de Investigación Didáctica, Bellaterra, Barcelona, España, 1987.
 - Workshop on Finite Dimensional Integrable Nonlinear Dynamical Systems, Rand Afrikams University, Johannesburg, South Africa, 10-14/1/88.
 - Escuela Latinoamericana de Física 1987, Departamento de Física, UNLP, La Plata, 6-24/7/87.
 - VIII International Conference on Computers in Chemical Research and Education, Beijing, China, 15-20/6/87.
 - 72a. Reunión Nacional de la Asociación Física Argentina, Centro Atómico Bariloche, San Carlos de Bariloche, 28/9 al 2/10/87.
 - XVII Congreso Argentino de Química, Universidad Nacional del Nordeste, Facultad de Ciencias Exactas, Naturales y Agrimensura, Corrientes, 20-25/9/87.
 - IV Simposio Brasileiro de Química Teórica, Caxambú, Minas Gerais, Brasil, 8-11/11/87.
 - Global Conference on Mathematical Physics, Centenary Celebration of Niels Bohr and Hernan Weyl, Einstein International Foundation, 2 Tilak Nagar, Nagpur 440 010, India, 20-26/10/87.
 - I International-Argentine Meeting on Methodology in the Teaching of Chemistry, Universidad Nacional de San Luis, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, 22-25/6/88.
 - XI Simposio Iberoamericano de Catálisis, Guanajuato, México, Instituto Mexicano del Petróleo y Universidad Autónoma Metropolitana, 12-17/6/88.
 - Seminario-Taller Latinoamericano destinado a la producción de un manual de Metodología de la Enseñanza de la Química, Departamento de Química, Instituto Católico del Profesorado, Cosquín, Córdoba, 9-12/10/87.
 - IV Jornadas Químicas Bonaerenses, Consejo Profesional de Química de la Provincia de Buenos Aires, La Plata, 10-13/11/87.

- IV Reunión Nacional de Enseñanza de la Química (REQ IV), San Salvador de Jujuy, Universidad Nacional de Jujuy, Facultad de Ingeniería, 17-20/8/88.
- XVIII Congreso Latinoamericano de Química y XVII Jornadas Chilenas de Química, Universidad de Chile, Santiago, Chile, 11-15/1/88.
- VI International Congress on Quantum Chemistry, Jerusalem, Israel, 21-25/8/88.
- VI Escuela Latinoamericana de Química Teórica, Río de Janeiro, Brasil, 11-17/9/88.
- VIII Reunión Latinoamericana de Electroquímica y Corrosión, Córdoba, 31/10 al 4/11/88.
- Escuela Latinoamericana de Física 1989, Cuernavaca, México, 7-25/8/89.
- 73a. Reunión de la Asociación Física Argentina, Mar del Plata, 1988.
- 1989 Sanibel Symposium, St. Augustine, Florida, USA, 1-8/4/89.
- X Canadian Symposium on Theoretical Chemistry, Centre, Banff, Alberta, Canada, 24 30/8/89.
- XIX Congreso Latinoamericano de Química, Asociación Química Argentina, Buenos Aires, 5-9/11/90.
- Primer Taller Nacional de Aplicaciones de la Computación a la Biología, La Habana, Cuba, 9-10/12/88.
- X International Conference on Chemical Education, University of Waterloo, Waterloo, Ontario, Canada, 20-25/8/89.
- I Congreso Provincial de Educadores en la Química, Mar del Plata, Provincia de Buenos Aires, ADEQRA, 8-10/6/89.
- III Congreso Internacional sobre la Didáctica de las Ciencias y de las Matemáticas, Santiago de Compostela, España, 20-22/9/89.
- I Congreso Paraguayo de Química - Expoquímica'89, Asunción, Paraguay, 7-9/5/89.
- II World Association of Theoretical Organic Chemists World Congress, Toronto, Canada, 8-14/7/90.
- Colloque International sur l'Enseignement Supérieur de Chimie dans les Langues Internationales d'Origine Latine, Lisbonne, Portugal, 8-11/11/89.
- XII Simposio Ibero-Americano de Catálisis, Río de Janeiro, 29/7 al 3/8/90.
- Encuentro FUNPRECIT'89 "Los Negocios en la Década del '90 Están Determinados por la Innovación Tecnológica", Fundación para la Interacción de los Sistemas Productivo, Educativo y Científico-Tecnológico, Fundación Banco de Boston, Buenos Aires, 17-18/8/89.
- V Simposio Brasileiro de Química Teórica, Fundación Universidad de Brasilia, Brasilia, Brasil, 19-22/11/89.
- XIII Conferencia de Química, Universidad de Oriente y Universidad Estatal de Leningrado, Santiago de Cuba, Cuba, 24-26/1/90.
- 1990 Sanibel Symposium, Ponce de Leon Convention and Resort Center, St. Augustine, Florida, USA, 17-24/3/90.
- Technological Literacy Conference. V - The National Association for Science, Technology and Society's Annual Meeting, Crystal City Marriott, Arlington, Virginia, USA, 2-4/2/90.
- XVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, La Plata, Argentina, 23-28/9/89.
- XVIII Colloquium "Group Theoretical Methods in Physics", Nuclear Physics Department of the Academy of Sciences of the USSR and P. N. Lebedev Institute of Physics of the Academy of Sciences of the USSR, Moscow, USSR, 4-9/6/90.

- Ohio Supercomputer Center Workshop on "Theory and Applications of Density Functional Approaches to Chemistry", Columbus, Ohio, USA, 7-9/5/90.
- III Congreso Boliviano de Química, Universidad Mayor de San Andrés, Facultad de Ciencias Puras y Naturales, La Paz, Bolivia, 21-24/8/90.
- VI Congreso Argentino de Físicoquímica, Termas de Río Hondo, Santiago del Estero, 24-28/4/89.
- XI International Conference on Chemical Education, University of York, York, England, 25-30/8/91.
- IX Congreso Iberoamericano de Electroquímica, Tenerife, Islas Canarias, España, 15-22/7/90.
- 75^a. Reunión Nacional de Física, Asociación Física Argentina, Facultad de Ciencias Exactas, Departamento de Física, UNLP, 8-11/10/90.
- II International Symposium on Far-from Equilibrium Dynamics of Chemical Systems, Polish Academy of Sciences, Swidno, Poland, 3-7/9/90.
- XIX Congresso dei Chimici Teorici dei Paesi di Espressione Latina, Istituto Superiore di Sanità, Roma, Italia, 10-14/9/90.
- Mini-Simposio en Química Cuántica, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile, 9-11/10/90.
- XXXI Sanibel Symposium, Ponce de Leon Resort and Convention Center, St. Augustine, Florida, USA, 9-16/3/91.
- I Conferencia Latinoamericana (1a CLAFQO) y VIII Conferencia de Físicoquímica Orgánica (8a COFQO), Florianópolis, SC, Brasil, 1-5/4/91.
- IV International Conference on Mathematical and Computational Chemistry, Bled, Yugoslavia, 3-7/6/91.
- IV International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics, Centro Stefano Franscini, Monte Verita, Ascona, Switzerland, 23-29/9/91.
- I Canadian Symposium on Computational Chemistry, Groupe de Chimie Théorique et Modélisation, Université de Sherbrooke, Oxford, Québec, Canada, 19-22/5/91.
- MATH/CHEM/COMP 1991, The Sixth International Conference on the Interfaces Among Mathematics, Chemistry and Computer Sciences, Dubrovnik, Croatia, Yugoslavia, 24/29/6/91/.
- XXXIII IUPAC Congress, Hungarian Academy of Sciences, Budapest, 17-22/8/91.
- X Congreso Iberoamericano de Electroquímica y 43th Meeting of the International Society of Electrochemistry, Córdoba, Argentina, 20-25/9/92.
- II Encuentro Internacional sobre Metodología de la Enseñanza de la Química, Centro de Convenciones y Exposiciones Jiménez de Quesada, Bogotá, Colombia, 17-20/10/91.
- 76a. Reunión Nacional de Física, Instituto de Física, FCEyT, Universidad Nacional de Tucumán, Tucumán, 1991.
- XXXII Sanibel Symposium, Ponce de Leon Resort and Convention Center, St. Augustine, Florida, USA, 14-21/3/92.
- XIV Austin Symposium on Molecular Structure, Department of Chemistry, The University of Texas, Austin, Texas, USA, 2-4/3/92.
- International Conference on Selected New Trends of Theoretical Organic Chemistry, World Association of Theoretical Organic Chemists, Soviet Union Branch, Anapa, USSR, 12-19/10/92.

- II Congreso Provincial de Educadores en la Química de la Provincia de Buenos Aires, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional de Avellaneda, Avellaneda, Provincia de Buenos Aires, 8-11/10/91.
- Congreso Nacional Interdisciplinario "Diagnósticos y Perspectivas de las Actividades Profesionales con Miras al Siglo XXI", Colegio de Abogados del Departamento Judicial de La Plata, La Plata, Provincia de Buenos Aires, 30-31/10 y 1/11/91.
- VI Simposio Brasileiro de Química Teórica, Caxambú, Minas Gerais, Brasil, 17-10/11/91.
- IV International Symposium "Theoretical Approach to Catalysis at Interfaces", Krakow, Poland, 27-31/7/92.
- Encuentro Sector Productivo-Sector Educativo, Científico y Tecnológico, COMAPCYT, PRONITTEC y FUNPRECIT, Archivo y Museo Histórico del Banco de la Provincia de Buenos Aires, Buenos Aires, 19-20/11/91.
- V Jornadas Científico-Tecnológicas de la Facultad de Ciencias Exactas, Naturales y Agrimensura, Facultad Nacional del Nordeste, Corrientes, 9-13/12/91.
- XX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL XX), Mérida, Venezuela, 12-17/10/92.
- XII Biennial Conference on Chemical Education "Changing the Image of Chemistry", University of California-Davis, Davis, California USA, 2-6/8/92.
- XI Canadian Symposium on Theoretical Chemistry, Montreal, Québec, Canada, 2-7/8/92.
- III World Congress of Theoretical Organic Chemists, Toyohashi, Aichi-ken, Japan, 18-24/7/93.
- II Congreso Paraguayo de Química, Asunción, Paraguay, 4-7/10/92.
- VI Reunión Nacional de Educación en la Química, Universidad Nacional de Tucumán, Localizaciones Universitarias, Horco-Molle, Tucumán, 20-23/9/92.
- II Conferencia Latinoamericana de Fisicoquímica Orgánica y Taller sobre "Reaction Intermediates and Mechanistic Organic Chemistry", Huerta Grande, Córdoba, 29/3-2/4/93.
- Congreso Iberoamericano de Ciencia y Tecnología, 1992, Plaza Hotel, Buenos Aires, 16-18/11/92.
- Symposium on Numeric Intensive Computations in Chemistry and Physics, Centro di Ricerca, Sviluppo e Studi in Sardegna, Cagliari, Italy, 21-23/9/92.
- Escuela Costarricense de Física, Universidad de Costa Rica, Escuela de Física, San José, Costa Rica, 7-11/9/92.
- IV Seminario sobre "Problemas de Frontera Libre y sus Aplicaciones", Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias Empresariales, Universidad Austral y PROMAR, Instituto de Matemáticas Beppo Levi, Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, Universidad Nacional de Rosario, 14-19/12/92.
- XXXIII Sanibel Symposium, Ponce de Leon Resort and Convention Center, St. Augustine, Florida, USA, 13-20/3/93.
- IV Congreso Boliviano de Química, Sociedad Boliviana de Química, Universidad Mayor de San Andrés, La Paz, Bolivia, 14-16/4/93.
- XXIème Congrès de Chimistes Théoriciens d'Expression Latine (XXI CHITEL), Grenoble, France, 20-24 September, 1994.
- I Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics, University of Girona, Institute of Computational Chemistry, Girona, Spain, 28/6 al 3/7/93.

- XIII Biennial Conference on Chemical Education, Bucknell University, Lewisburg, PA 17837, USA, 31/7 al 4/8/94.
- V International Conference on Mathematical and Computational Chemistry, University of Missouri-Kansas City, Kansas City, Missouri, USA, 17-21/5/93.
- VIII International Congress of Quantum Chemistry, Prague, Czechoslovakia, Municipal Convention Center, 19-23/6/94.
- III International Seminar on "Misconceptions and Educational Strategies in Science and Mathematics", University, Department of Education, College of Agriculture and Life Sciences, Ithaca, New York, USA, 1-4/8/93.
- Jornadas sobre "Las Nuevas Tecnologías de la Información en la Sociedad del Futuro", Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Buenos Aires, 19-20/11/92.
- US-Latin American Workshop on Molecular and Material Sciences: Theoretical and Computational Aspects, University of Florida-Gainesville, Gainesville, Florida, USA, 10-12/3/93.
- XXI Congreso Latinoamericano de Química, Colegio Panameño de Química, Panamá, 31/7 al 5/8/94.
- XXXIV IUPAC Congress, Beijing, China, Chinese Chemical Society, 15-20/8/93.
- VIII Reunión Nacional de Educación en la Física, Rosario, 18-22/10/93.
- VII Congreso Nacional de Fisicoquímica, Mar del Plata, 19-23/4/93.
- MATH/CHEM/COMP'93, The Eighth International Course & Conference on the Interfaces Among Mathematics, Chemistry and Computer Sciences and The First Meeting on Fullerenes, Dubrovnik, Croatia, 21-25/6/93.
- Thirty Years of Density Functional Theory: Concepts and Applications, Kracow, Poland, 13-16/6/94.
- XIII International Conference on Chemical Education, Inter American University, Metropolitan Campus, San Juan, Puerto Rico, 8-12/8/94.
- III Congreso Provincial de Educadores en la Química de la Provincia de Buenos Aires, ADEQRA, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional de Avellaneda, Avellaneda, Buenos Aires, 1-3/7/93.
- XXXIV Sanibel Symposia, Marriot at Sawgrass Resort, Ponte Vedra, Florida, USA, 12-19/2/94.
- V Austin Symposium on Molecular Structure, Department of Chemistry, The University of Texas, Austin, Texas, USA, 21-23/3/94.
- IX Congreso Costarricense de Física, Escuela de Física, Universidad de Costa Rica, San José, Costa Rica, 8-13/11/93.
- V Taller de Física para Profesores de Segunda Enseñanza (TAFPSE 93), Escuela de Física, Universidad de Costa Rica, San José, Costa Rica, 5-13/11/93.
- US-Latin American Workshop and Material Sciences: "Theoretical and Computational Aspects", University of Florida, Gainesville, Florida, USA, 8-10/2/94.
- I Jornadas de Especialistas en Enseñanza de la Química, Facultad de Odontología, Universidad Nacional de Rosario, Rosario, Santa Fe, 1-2/11/93.
- Spring Workshop on Quantum Chemistry, Cátedra de Química Cuántica, Universidad de la República del Uruguay, Montevideo, Uruguay, 5-7/11/93.
- CHEMED 95, Department of Chemistry and Biochemistry, Old Dominion University, Virginia, USA, August 5-10, 1995.
- 35th IUPAC Congress, Turkish Chemical Society, 14-19/8/95, Istanbul, Turkish.

- II Simposio Nacional sobre la Enseñanza de las Ciencias y la Tecnología SINECYT 94, Servicio de Difusión Científica, Secretaría de Ciencia y Técnica, Centro Cultural General San Martín, Buenos Aires, 20-22/7/94.
- IV Congreso Internacional sobre Investigación en la Didáctica de las Ciencias y de las Matemáticas, Institut de Ciències de l'Educació de la Universitat Autònoma de Barcelona, Vice-rectorat d'Investigació de la Universitat de València, Barcelona, 13-16/9/93.
- International Conference on "Science and Mathematics Education for the 21st. Century: Towards Innovative Approaches", Universidad de Concepción, Facultad de Educación Humanidades y Arte, Concepción, Chile, 26/9 al 1/10/94.
- III International History, Philosophy and Science Teaching Conference, 29 October-2 November 1995, Department of Curriculum and Instruction, University of Minnesota, Minneapolis, MN 55455-0208, USA.
- III Conferencia Latinoamericana de Fisicoquímica Orgánica, Florianópolis, SC, Brasil, 10-14/5/95.
- II Jornadas de Especialistas de Enseñanza Universitaria de la Química, Facultad de Farmacia y Bioquímica, Universidad de Buenos Aires, 27-29/4/95.
- III Congreso Argentino de Historia de la Ciencia y de la Técnica, Sociedad Científica Argentina, Buenos Aires, 11-13/8/94.
- Primer Encuentro Docente "Experiencias Didácticas y/o Pedagógicas en la Universidad Nacional de La Plata", Facultad de Ciencias Naturales, UNLP, La Plata, 24/6/94.
- XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL 95, Universidad de Chile, Pucón, Chile, 25-29/9/95.
- XX Congreso Argentino de Química, Universidad Nacional de Córdoba y Asociación Química Argentina, Departamento de Química, Ciudad Universitaria, Córdoba, 14-18/11/94.
- Primeras Jornadas Docentes del Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 12/12/94.
- Encuentro Nacional de Profesores de Matemática, Física, Química y Biología, Instituto Católico del Profesorado, Córdoba, 17-19/11/94.
- Primeras Jornadas Académicas, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 19-21/10/94.
- II Jornadas de Políticas Científicas de la UNLP, UNLP, 2-3/11/94.
- Jornadas sobre "Formación Docente", Facultad de Humanidades y Ciencias de la Educación, UNLP, 7-8/3/95.
- Reunión sobre "Estructura Molecular y Teoría de Colisiones", Dpto. Física, FCEN, Buenos Aires, 23-24/5/95.
- "Partners in Chemical Education", The Royal Society of Chemistry, The University of York, August 22-September 2, 1995, York, England.
- III European Conference on Chemical Education Research, Lubling-Kazimierz, Poland, September 25-29, 1995.
- XXXVI Sanibel Symposium, Quantum Theory Project, University of Florida, Ponce de Leon Resort, St. Augustine, Florida, USA, February 24-March 2, 1996.
- US-Latin American Workshop on Molecular and Materials Sciences: Theoretical and Computational Aspects, University of Florida, Gainesville, Florida, USA, February 22-23, 1996.
- X Simposio Nacional de Química Orgánica, Sociedad Argentina de Investigación en Química Orgánica, Córdoba, 12-15/11/95.

- II Encuentro Docente, Universidad Nacional de La Plata, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, La Plata, 16/12/95.
- IX Congreso Argentino de Fisicoquímica, San Luis, 21-25/11/94.
- VIII Reunión Nacional de Educadores en la Química (REQ VIII), Universidad Nacional de Rosario, Rosario, Argentina, 14-18/10/96.
- 36th IUPAC Congress, New Swiss Chemical Society, Geneva, Switzerland, August 17-22, 1997.
- Jornadas de Actualización y Discusión sobre Investigación en Enseñanza de las Ciencias, IMApEC, Departamento de Fisicomatemáticas, Facultad de Ingeniería, UNLP, 15 16/7/96.
- III Encuentro Docente de la Universidad Nacional de La Plata, Colegio Nacional "Rafael Hernández" y Facultad de Ingeniería, 20-22/11/96.
- XXXVII Sanibel Symposium, University of Florida, Ponce de Leon, St. Augustine, Florida, USA, March 1-7, 1997.
- US-Latin American Workshop on Molecular and Materials Sciences. Theoretical and Computational Aspects, University of Florida, Florida, U.S.A., February 27-28, 1997.
- XXI Congreso Argentino de Química, Bahía Blanca, 18-20/9/96.
- XXII Congreso Argentino de Química, UNLP, La Plata, 22-24/9/98.
- III Jornadas en Enseñanza Universitaria de la Química, Vaquerías, Córdoba, 10-12/11/97.
- Working Session IV, Ometeca Institute, Rutgers University, New Brunswick, New Jersey, U.S.A., 24-28/7/96.
- First International Conference of the European Science Education Research Association (E.S.E.R.A.), Universit degli Studi "Roma Tre", Dipartimento di Biologia, Consiglio Nazionale delle Ricerche, Roma, Italy, September 2-6, 1997.
- X Congreso Argentino de Fisicoquímica, Universidad Nacional de Tucumán, Tucumán, 21-25/4/97.
- VI Inter-American Conference on Physics Education, Córdoba, Argentina, June 30-July 4, 1997.
- V Congreso Internacional sobre Investigación en la Didáctica de las Ciencias, Murcia, España, 10-13/9/97.
- Jornadas Científicas de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura 1997, Universidad Nacional del Nordeste, Corrientes, 29/9 al 3/10/97.
- Reunión Anual 1997 de la Asociación Física Argentina, Departamento de Física, Universidad Nacional de San Luis, 21-26/9/97.
- V Congreso Provincial de Educadores en Química de la Provincia de Buenos Aires y I Congreso Regional de Educadores en la Química, Facultad de Ciencias Veterinarias, Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires, Tandil, 1-3/10/97.
- IX Reunión de Educadores en Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de Salta, 20- 24/9/98.
- IV Encuentro Docente de la Universidad Nacional de La Plata, Facultad de Arquitectura, Universidad Nacional de La Plata, 11-12/11/97.
- 2nd International Conference on Industry-Education Co-operation (2nd ICIEC), Partners in Chemical Education, IUPAC and Institute of Chemistry, University of Sao Paulo, Brasil, December 7th-12th, 1997.
- XXXVIII Sanibel Symposium, Quantum Theory Project, University of Florida, Ponce de Leon Resort, St. Augustine, Florida, USA, 21-27 February 1998.

- Jornadas Argentinas de Investigación en Química Inorgánica, Fac. Cs. Exactas, UNLP, 21-22/9/98.
- Jornadas del X Aniversario del Anuario Latinoamericano de Educación en Química, Universidad Nacional de San Luis, 26-28/5/98.
- V Working Sessions, OMETECA Institute, The Convergence of Science and Humanities, Buenos Aires, Septiembre 1998.
- XI Congreso Argentino de Fisicoquímica y I Congreso de Fisicoquímica del Mercosur, Facultad de Ingeniería Química, UNLitoral, Santa Fe, Argentina, 19-23/4/99.
- Jornadas del 50 Aniversario del INIFTA, Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 19-20/10/98.
- Jornada sobre "Investigación Científica e Innovación Tecnológica", INIFTA, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 4/6/98.
- International Meeting on Physical Chemistry Frontier Topics, INIFTA, La Plata, Argentina, November 2-6, 1998.
- V Encuentro Docente de la Universidad Nacional de La Plata, Facultad de Ciencias Agrarias y Forestales, UNLP, La Plata, 25-26/11/98.
- Fifth Electronic Computational Chemistry Conference (ECCC-5), Northern Illinois University, Illinois, USA, November 2-3, 1998.
- Reunión Nacional 1998 de la AFA, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, La Plata, 21-25/9/98.
- 1999 Sanibel Symposium, University of Florida, Ponce de Leon Resort, St. Augustine, Florida, USA, 27/2 al 5/3/99.
- US-Latin American-Canada-Caribbean Workshop on Molecular and Materials Sciences: Theoretical and Computational Aspects, Cuernavaca, México, 24-26/2/99.
- II Encuentro Internacional de Desarrollo Personal, Quito, Ecuador, 30/10 al 3/11/98.
- International Conference on Science Education for the 21st Century, Szeged, Hungary, June 22-25, 1999.
- 5th World Congress of Theoretically Oriented Chemists (WATOC'99), Imperial College, London, UK, 1-6 August, 1999.
- ACS Symposium on "Bridging the Gap Between Chemical Modeling and Engineering", American Chemical Society, Anaheim, 22-24 march, 1999.
- 10ª Reunión de Educadores en Química (X REQ), Universidad de Morón, Morón, Buenos Aires, 17-21/9/2000.
- 6th Conference in Advanced Medicinal Chemistry, Aristotelian University of Thessaloniki, Greece, 28-29/5/99.
- 10th International Cyclodextrin Symposium CD2000, University of Michigan, Ann Arbor, Michigan, USA, May 21st-24th, 2000.
- XII SINAQO "Dr. Eduardo Guerreiro", Los Cocos, Córdoba, 14-17/11/99.
- 4th Australian Molecular Modelling Workshop, Center for Drug Design and Development, University of Queensland, Brisbane, Queensland, Australia, September 21-24, 1999.
- VI Encuentro Docente de la Universidad Nacional de La Plata, Facultad de Ingeniería, UNLP, 28-29/10/99.
- 13th European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relationships (QSAR 2000), Rational Approaches to Drug Design, Universität Düsseldorf, Germany, 27 August-September 1st, 2000.

- VIII Congress on Computational and Theoretical Chemistry (8th CCTCC), US Army Corps of Engineers Warterway Experiment Station (WES), Vicksburg, Mississippi, USA, November 5-6, 1999.
- Primera Jornada de Comunicaciones Científicas, Tecnológicas y de Extensión, Universidad Nacional del Nordeste, Facultad de Agroindustrias, Chaco, 22-25/11/99.
- II Congreso Iberoamericano de Educación en Ciencias Experimentales, Universidad Nacional de Córdoba, 5-8/9/00.
- 2000 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, Honolulu, Hawaii, American Chemical Society, December 14-19, 2000.
- II Congreso Iberoamericano de Educación en Ciencias Experimentales, Córdoba, 5-8/9/00.
- VI Working Sessions, OMETECA Institute, The Convergence of Science and Humanities, Cumaná, Venezuela, Septiembre 2000.
- 2000 ACS Pan-American Conference, San Juan, Puerto Rico, American Chemical Society Education and International Activities Division, June 29-July 3, 2000.
- XXIII Congreso Argentino de Química, Universidad Nacional del Nordeste y Asociación Química Argentina, Corrientes, 10-13/9/00.
- The Harry Wiener International Memorial Conference on the Role of Topology in Chemistry, University of Georgia, Athens, Georgia, U. S. A., March 20-24, 2001.
- XXIV Congreso Latinoamericano de Química y XXI Congreso Peruano de Química, Lima, Perú, 15-19/10/00.
- XII Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica, Universidad Nacional del Comahue, San Martín de los Andes, 23-27/4/00.
- American Chemical Society National Spring Meeting, San Diego, CA, USA, April 2-4, 2001.
- VI Congreso Internacional sobre Investigación en la Didáctica de las Ciencias, Barcelona, España, Septiembre 2001.
- Jornadas de Intercambio de Experiencias “La Lectura y la Escritura como Práctica Académicas Universitarias”, 20-22/6/01, Universidad Nacional de Luján, Departamento de Educación, División Pedagogía Universitaria, Luján, Buenos Aires.
- Taller sobre Experiencia de la Unión Europea en Facilitación del Comercio y la Armonización de Normas y Reglamentos, Instituto Argentino de Normalización (IRAM), Hotel Sheraton Libertador, Buenos Aires, 24/7/02.
- Third International Conference on Supramolecular Science and Technology, Buenos Aires, 25-29/8/02.
- XV Congreso Latinoamericano e Ibérico de Químicos Cosméticos, Asociación Argentina de Químicos Cosméticos (AAQC), Buenos Aires, 10-13/9/01.
- III Jornadas de Intercambio y Reflexión de Docentes del Ciclo Superior de la Especialidad Química, Gobierno de la Ciudad de Buenos Aires, Secretaría de Educación. Dirección del Área de Educación Media y Técnica, PROTET, Escuela Técnica No.9 “Ing. Luis A. Huergo”, Buenos Aires, 18-20/10/01.
- Primeras Jornadas de la Asociación Argentina de Químicos Analíticos, Universidad Nacional de Rosario y Asociación Argentina de Químicos Analíticos, Rosario, 6-7/12/01.
- XVIIIth World Energy Congress. Energy Markets: The Challenges of the New Millennium, Buenos Aires, Argentina, 21/10/01.
- IX Congreso Argentino de Ciencia y Tecnología de Alimentos, Asociación Argentina de Tecnólogos Alimentarios, Buenos Aires, 7-10/8/02.

- XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (Quitel XXVIII), Montevideo, Uruguay, Septiembre 1-8, 2002.
- Seminario Internacional sobre o Intercambio Académico em Áreas Prioritarias no Brasil e Argentina, 18-19/4/02, Canela, RS, Brasil.
- XXIV Congreso Argentino de Química, UNL y AQA, Santa Fe, 7-9/8/02.
- 2003 Pan-American Workshop on Molecular and Materials Science: Theoretical and Computational Asepts, Cuernacava, México, 17-19/2/03.
- II Encuentro Nacional de Universidades Abiertas (UNI 3) y I Encuentro de Educación No Formal para Adultos Mayores, Proyecto 3, Santa Fe, 8-10/11/02.
- IV Jornadas de Intercambio y Reflexión de Docentes del Ciclo Superior de la Especialidad Química de las Escuelas Técnicas de la Ciudad de Buenos Aires, Escuela Técnica No.27, Buenos Aires, 24/16/10/02.
- I Jornadas Nacionales de Producción, Ciencia y Tecnología para la Reindustrialización de Argentina, Hotel Savoy, Buenos Aires, 28-29/11/02.
- I Reunión Informativa del Proyecto Interacadémico para el Mejoramiento y la Integración del Aprendizaje de la Ciencia y la Tecnología, INIFTA, UNLP, La Plata, 1/11/02.
- VI Congreso Boliviano de Química, Sociedad Boliviana de Química, Universidad Autónoma Tomas Frías, Potosí, Bolivia, 9-14/11/03.
- VII Working Sessions OMETECA, Pinamar, Argentina, 24-28/11/03.
- XVII Reunión Latinoamericana de Matemática Educativa (RELME 17), Santiago, Chile, 21-25/7/03.
- Tercer Encuentro de Investigadores en Temas Relacionados con Sustancias Peroxidicas, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, UNNE, Corrientes, 14-15/8/03.
- Jornadas Internacionales Ciencias – Filosofía – Teología en Búsqueda de una Cosmovisión, Fundación Santa Ana y Universidad Popular Autónoma del Estado de Puebla, México, La Plata, 20-22/8/03.
- Primeras Jornadas de Ciencia, Tecnología y Medios de Comunicación “En Búsqueda de un Lenguaje Común”, Academia Nacional de Medicina, Bs. As., Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales (ANCEFN), 21-22/8/03.
- Tercer Encuentro de Reflexión Sobre Liderazgo, “Como Construir Liderazgo con Valores en Argentina”, Instituto Universitario Naval, Casa Amarilla, Buenos Aires, 24-25/10/03.
- VII Working Sessions, OMETECA Institute, The Convergence of Science and Humanities, Pinamar, Buenos Aires, Argentina, 24-28/11/03.
- XI Jornadas de Jóvenes Investigadores de AUGM y I Encuentro de Jóvenes Investigadores de la UNLP, Observatorio Astronómico de La Plata, 10-12/9/03.
- Jornadas Bonaerenses de Ciencia y Tecnología, Aportes al Conocimiento y la Comunidad, Legislatura de la Provincia de Buenos Aires, Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires, La Plata, 25-26/11/03.
- Seminario-Taller “La CIC y las Políticas Provinciales en Ciencia, Tecnología e Innovación”, Club de Rugby “Los Tilos”, La Plata, 24/11/03.
- VI Jornadas Nacionales y III Internacionales de Enseñanza Universitaria de la Química, Facultad de Ingeniería y Colegio Nacional de la UNLP, La Plata, 28/9-1/10/03.
- XXV Congreso Argentino de Química, Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires, Olavarría, 22-24 de Septiembre de 2004.

- Internet Electronic Conference of Molecular Design 2003, IECMD 2003, November 23 – December 6, <http://www.biochempress.com>.
- IV Indo-US Workshop on Mathematical Chemistry, January 8-12, 2005, Pune, India.
- International Conference on “Monitoring Systems and Novel Technologies for Detection Removal of Pollutants in/from Ecosystems, Hotel Crowne Plaza Panamericano, Buenos Aires, Argentina, 18-22 April, 2004.
- Jornadas Universitarias Nacionales y Desarrollo Sustentable, Universidad Nacional de San Luis, 28-30 de Octubre de 2004.
- IV Encuentro de Reflexión sobre Liderazgo, “Hacia una Cultura del Liderazgo con Valores en Argentina”, Instituto Universitario Naval, Casa Amarilla, Buenos Aires, 24-25/10/04.
- II Congreso Iberoamericano de Ambiente y Calidad de Vida y III Congreso de Ambiente y Calidad de Vida, Catamarca 2004, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Catamarca, Catamarca, 27-29/9/04.
- Jornada de Homenaje al Prof. Hans J. Schumacher en el Centenario de su Nacimiento, INIFTA, La Plata, 30/9/04.
- II Jornadas de Ciencia y Técnica de la Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 1-3/9/04.
- Reunión “Ciencia, Tecnología y Sociedad”, Asociación Argentina para el Progreso de las Ciencias, La Rural, Buenos Aires, 1-4/11/04.
- I Seminario Virtual: El Cambio Organizacional: En qué medida contribuye la acción individual? Cómo se efectiviza la acción colectiva?, IRICE-CONICET, Septiembre- Noviembre 2004.
- Internet Electronic Conference of Molecular Design 2004 (IECMD 2004), November 29 –December 12, <http://www.biochempress.com>.
- XIV Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica, Termas de Río Hondo, Santiago del Estero, 2005.
- The VIII Working Conference on the Relations Between the Humanities and Science, October 17-21, 2005, Mexico City, Mexico, The OMETECA Institute and Universidad Autónoma Metropolitana.
- IV Jornadas Internacionales para la Enseñanza Universitaria y Preuniversitaria de la Química, Mérida, Yucatán, México, 15-18/11/05.
- I Workshop Argentino de Química Medicinal, División Química Medicinal, Asociación Química Argentina, Buenos Aires, 27-28/5/05.
- XIII Encontro Nacional de Químicos Analíticos (ENQA) y I Congreso Iberoamericano de Química Analítica (CIAQA), Universidade Federal de Fluminense, Niteroi, Río de Janeiro, Brasil, 12-16/9/05.
- Reunión Nacional de Física, Asociación Física Argentina, La Plata, 26-30/9/05.
- Quinto Encuentro de “Liderazgo, Creatividad e Innovación en la Era del Conocimiento” Instituto Universitario Naval, Centro Naval Olivos, Buenos Aires, 10-11/11/05, 2005.
- Jornada de Reflexión sobre Ciencia y Tecnología, Universidad Nacional de La Plata, 11/8/05.
- XV Simposio Nacional de Química Orgánica, INIQO, Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca, Argentina, 6-8/11/05, Mar del Plata, Buenos Aires.
- XXXI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 2005), Margarita, Venezuela, 2-6/10/05.
- Congreso Binacional SAM/CONAMET 2005, Sociedad Chilena de Metalurgia y Materiales y Asociación Argentina de Materiales, Universidad Nacional de Mar del

- Plata, Facultad de Ingeniería, Mar del Plata, Buenos Aires, 2005.
- XIII Jornadas de Jóvenes Investigadores de la AUGM, Asociación de Universidades Grupo Montevideo y Universidad Nacional de Tucumán, Centro Ing. Roberto Herrera, San Miguel de Tucumán, 31/8 al 2/9/05.
 - First South American TIAFT Regional Meeting, La Plata, 24-26/10/05.
 - VII Jornadas Nacionales de Enseñanza Universitaria de la Química, Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco, Comodoro Rivadavia, Chubut, 9-12/4/06.
 - Jornada de Ciencia y Tecnología, Facultad de Ingeniería, UNLP, La Plata, 30/9/05.
 - Panel de Emprendedorismo, Facultad de Ingeniería, UNLP, La Plata, 9/9/05.
 - Bienal de Ciencia y Tecnología. El Conocimiento en Acción, 8-10/11/05, Comisión de Investigaciones Científicas, Buenos Aires, Sede del Jockey Club, La Plata, Bs. As.
 - 12th International Workshop on Quantitative Structure-Activity Relationships in Environmental Toxicology, Lyon, France, May 8-12, 2006.
 - CSPS IX Annual International Symposium, "Current Scientific Regulatory Challenges in Drug Development and Safety", Canadian Society of Pharmaceutical Sciences, Crowne Plaza, Ottawa, Ontario, Canada, May 24-27, 2006.
 - International Conference on Computational Methods in Sciences and Engineering 2004 (ICCMSE-2004), Athens-Vouliagmeni, Greece, 19-23/11/2004.
 - XXVII Congreso Latinoamericano de Química (XVII CLAQ), La Habana, Cuba, 2006.
 - National Seminar on Emerging Trends in Chemoinformatics NESTC 2006, March 7-9, 2006, India.
 - III Congreso Iberoamericano de Ambiente y Calidad de Vida y IV Congreso de Ambiente y Calidad de Vida, Catamarca, 2006.
 - XIX International Symposium of Medicinal Chemistry, European Federation of Medicinal Chemistry, 29/8 al 2/9/06, Estambul, Turquía.
 - XXVI Congreso Argentino de Química, Universidad Nacional de San Luis, Facultad de Química, Farmacia y Bioquímica, San Luis, 13-15/9/06.
 - Congreso Binacional CONAMET/SAM 2006, Universidad de Chile, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Santiago, Chile.
 - Reunión Internacional ICUC-PIEQ XV de Educación Química para el Desarrollo Sustentable, Universidad Nacional de San Luis, San Luis, Argentina, 26-28/10/06.
 - IV Semana Nacional de Ciencia y Tecnología, SECyT-CONICET, Buenos Aires, 12-16/6/06.
 - IV Encuentro Nacional de Investigadores Relacionados con Sustancias Peroxídicas, INFIQC, Departamento de Físicoquímica, Universidad Nacional de Córdoba, Vaquerías, Valle Hermoso, Córdoba, 29-30/6 y 1/7/06.
 - XIV Jornadas de Jóvenes Investigadores, Universidades Estadual de Campinas, Brasil, 13-15/9/06.
 - VIII J. J. Giambiagi Winter School Part A, "Clusters, Molecules, Biomolecules and Materials", 24-28/7/06, Departamento de Física, FCEyN, UBA, Ciudad Universitaria, Pabellón I, Buenos Aires, <http://www.giambiagi.df.uba.ar/2006A/>
 - II Jornadas Interdisciplinarias "Fuentes e Interdisciplina", Instituto Interdisciplinario de Historia y Ciencias Humanas, CONICET, Buenos Aires, 24-26/10/06.
 - I Encuentro de Directores de Carrera de Ingeniería Industrial, Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca, 19-20/8/06.
 - 91° Reunión Nacional de Física, Asociación Física Argentina, Filial San Luis, Merlo, San Luis, 25-29/9/06.

- XXXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, La Habana, Cuba, 2007.
- XV Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica, Tandil, 2007.
- I Simposio SETAC Ecotoxicología y Contaminación, Society of Environmental Toxicology & Chemistry, Hotel Los Cocos, Córdoba, Argentina, 30/11 al 1/12/06.
- V Jornadas Internacionales para la Enseñanza Preuniversitaria y Universitaria de la Química, Universidad Metropolitana de Ciencias de la Educación (UMCE) y Universidad de Santiago de Chile (USACH), Santiago, Chile, 14-17/11/07.
- *Encontro REQUIMTE – Rede de Química e Tecnologia*, Fátima, Portugal (2006)
- I Reunión Latinoamericana de Química Medicinal (LatQuiMed), 22-25/4/07, Montevideo, Uruguay.
- Pan-American Workshop on Molecular and Materials Science, Instituto de Ciencias Físicas, UNAM, Cuernavaca, México, 9-11/10/07.
- VIII Jornadas de Enseñanza Universitaria de la Química y XIV Reunión de Educadores en la Química, ADEQRA-AQA-Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires, Olavarría, 20-23/5/08.
- 2007 NSF Pan-American Advanced Studies Institute on Sustainability & Green Chemistry, American Chemical Society, Education Division and ACS Green Chemistry Institute. Universidad Iberoamericana, México D.F., México, 29/5 – 10/6/07.
- IX Florida Heterocyclic Conference (FLOHET 9), Gainesville, FL, USA, March 9-12, 2008.
- XXVII Congreso Argentino de Química, Universidad Nacional de Tucumán, Tucumán, 17-19/09/08.
- I Congreso de Ingeniería Industrial, Univ. Nac. de La Matanza y UTN, Regional Avellaneda, 1-2/11/07.
- II Encuentro Nacional de Directores de Carrera de Ingeniería Industrial, UNSalta y Universidad Católica de Salta, Salta, Argentina, 17/08/07.
- IX Latin American Conference on Physical Organic Chemistry, Los Cocos, Córdoba, 30/09-05/10/07.
- XV Jornadas de Jóvenes Investigadores, Asociación de Universidades, Grupo Montevideo, “Investigación, Integración y Desarrollo”, 24-26/10/07. Campus de la UNA, Paraguay.
- WSEAS Conferences, Cairo, Egypt, December 29-31, 2007.
- V Congreso Iberoamericano de Física y Química Ambiental, Sociedad Iberoamericana de Física y Química Ambiental, Mar del Plata, 14/18-04-08.
- Reunión Nacional de Física “Sólidos 2007”, Huerta Grande, Córdoba, 6-9/11/07.
- 92 Reunión Nacional de Física, Salta, 24-28/9/07.
- Semana de la Divulgación del Conocimiento, Fac. Cs. Exactas, UNLP, 4-11/12/07.
- IV Reunión Internacional de Editores y Publicadores Científicos de Bases de Datos, Systems Link International, Sheraton Libertador Hotel, Buenos Aires, 14-15/04/08.
- X Congreso/sesión de trabajo sobre las relaciones entre las humanidades y la ciencia, OMETECA Institute, University of South Florida, Campus of Saint Petersburg, Florida, USA, 9-14/06/08.
- XXth International Symposium on Medicinal Chemistry, EFMC-ISMC 2008, August 31, September 4, Vienna, Austria.
- Jornada de Presentación de los Grupos de Investigación, INIFTA, 27/03/08.

- V Encuentro Nacional de Investigadores en Temas Relacionados con Sustancias Peroxídicas (5° ENISP), Facultad de Ingeniería, UNCPBA, Olavarría, Buenos Aires, 23-24/10/08).
- II Encuentro de Jóvenes Investigadores en Ciencia y Técnica de Materiales, Asociación Argentina de Materiales, Posadas, Misiones, 16-17/10/08.
- IV Congreso Iberoamericano de Ambiente y Calidad de Vida, Universidad Nacional de Catamarca, 2008.
- III Workshop Argentino de Química Medicinal, División Química Medicinal, AQA, Los Cocos, Córdoba, 10-11/11/2008.
- Jornadas 2008 de Becarios del INIFTA: “60 Aniversario del INIFTA”, INIFTA, 7-10/10/08, ídem 2010, 18-20/10/10.
- Fronteras en Fisicoquímica. Un Enfoque Interdisciplinario, 1948-2008: 60 Aniversario de Actividades en el Campo de la Fisicoquímica en el INIFTA, INIFTA, 24-28/11/08.
- Shedding Light on Disease: Optical Diagnosis for the New Millennium, SPC 2008 Conference, Technological Park, Universidade do Vale do Paraiba, Sao José dos Campos, Sao Paul, Brasil, 25-29/10/08.
- XIX Latin American Symposium on Solid State Physics, Puerto Iguazú, 5-9/10/08.
- VI Jornadas Internacionales y IX Nacionales de Enseñanza Universitaria de la Química, Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, UNL, 9-11/06/2010.
- XVI Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica, Asoc. Arg. de Inv. Fisicoquímica y Universidad Nacional de Salta, Salta, 18-21/05/09.
- COINI 2009, III Congreso Argentino de Ingeniería Industrial, Universidad Nacional de Misiones, Oberá, Misiones, 29-30/10/2009.
- VI Encuentro Nacional de Investigadores en Temas Relacionados con Sustancias Peroxídicas (6° ENISP), INIFTA, 23-25/06/2010.
- V Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (V QUITEL), San Andrés, Colombia, 18-22/09/09.
- II Simposio SETAC Ecotoxicología y Contaminación, Society of Environmental Toxicology & Chemistry, Lima, Perú, 5-9/10/09.
- Frontiers in Medicinal Chemistry – Emerging Targets, Novel Candidates and Innovative Strategies, European Federation for Medicinal Chemistry and Sociedad Española de Química Terapéutica, Barcelona, October 4-6, 2009.
- XVII Simposio Nacional de Química Orgánica, SAIQO, Mendoza, 15-18/11/09.
- XVII Jornadas de Jóvenes Investigadores, Facultad de Ciencias de la Administración y Facultad de Ciencias de la Alimentación, UNER, Concordia, Entre Ríos, 27-29/09/09.
- Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL), San Andrés, Colombia, 17-23/9/09.
- IV Jornadas de Ciencia y Técnica, 2009, Facultad de Cs. Exactas, UNLP.
- II Mathematical Chemistry Workshop of the Americas, Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia, 19-24/07/10.
- IX Jornadas Nacionales y VI Jornadas Internacionales de Enseñanza Universitaria de la Química, Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina, 9-11/06/10.
- Segundas Jornadas Universitarias de Ciencias Exactas y Naturales (JUCEN) – Química, 2009, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, San Fernando del Valle de Catamarca, 10-11/12/2009, Resolución F.C.E. y N. No. 267/09
- III Congreso Argentino de la Sociedad de Toxicología y Química Ambiental (III

- SETAC), 12-14/05/10, Santa Fe, Argentina.
- XXI Internacional Symposium on Medicinal Chemistry, Brussels, Belgium, September 5-9, 2010, organized by Medicinal and Bioorganic Chemistry Division of Royal Flemish Chemical Society (KVCV) and Division for Medicinal Chemistry of the Société Royale de Chimie (SRC), on behalf of European Federation for Medicinal Chemistry (EFMC).
 - Cercul Stiintific Studentesc, "Cercul Principiilor", Universitatea de Vestdin Timisoara, Facultatea de Chimie-Biologie-Geografie, 11 Noiembrie 2009.
 - Ingeniería 2010, Argentina, Buenos Aires, 17-20/10/10.
 - XVIII Congreso Argentino de Química y IV Workshop de Química Medicinal, AQA y Universidad Nacional de Lanús, Lanús, Buenos Aires, 13-16/9/10.
 - Miembro del Proyecto Study of Open Access Publishing (Project SOAP), a partir del 13/05/10.
 - XI Conference/Working Session: Relations between the Humanities and the Sciences in the Hispanic World, University of Wyoming, Laramie, WY 82071-3603, 36-30 July, 2010.
 - Actualidad en Física de Partículas, Cosmología y Mecánica Cuántica, Homenaje a Héctor Vucetich, Fac. Cs. Astronómicas y Geofísicas de La Plata, 1-3/11/10.
 - III Convención de la Prensa Técnica y Especializada Argentina, APTA, Salón Auditorio del Museo de Ciencias Naturales, Buenos Aires, 8 de septiembre de 2010.
 - V Congreso Iberoamericano de Ambiente y Calidad de Vida y VI Congreso de Ambiente y Calidad de Vida, 27-29/9/10, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de Catamarca.
 - VI Jornadas de Ciencias y Tecnología de Facultades de Ingeniería del NOA, Universidad Nacional de Jujuy, S.S. de Jujuy, 4-5/11/10.
 - XII Congreso/Sesión de Trabajo sobre las Relaciones entre las Humanidades y las Ciencias en el Mundo Hispánico
Madrid, España: Ateneo de Madrid; Instituto Cajal; Instituto Submarino, 18-22 de junio de 2012
 - XXIX Congreso Argentino de Química "Centenario de la Asociación Química Argentina",
Mar del Plata, 3-5/10/2012.

DIRECCIÓN, CO-DIRECCIÓN Y ASESORÍA DE BECARIOS, ESTUDIANTES, TÉCNICOS, PASANTES E INVESTIGADORES

<i>APELLIDO Y NOMBRES</i>	<i>FECHAS DE INICIO Y TERMINACIÓN</i>	<i>ORGANISMO PATROCINANTE</i>
SICRE, Eduardo	1/9/76 al 1/2/77	CIC (Becario)
FERNÁNDEZ, Francisco M.	1/2/78 al 31/3/85	CONICET (Becario)
FERNÁNDEZ, Francisco M.	1/4/85 al 1/10/87	CONICET (Investigador)
BARBIRIC, Dora Ana J.	1/9/80 al 28/2/85	CONICET (Becaria)
BARBIRIC, Dora Ana J.	1/3/87 al 1/3/89	FCEN, UBA (JTP)
MESÓN, Alejandro M.	1/4/81 al 30/3/86	CIC (Becario)
MESÓN, Alejandro M.	1/4/87 al 1/3/89	FCE, UNLP (JTP)
DONNAMARÍA, María C	1/4/81 al 31/3/85	CIC (Becaria)
DONNAMARÍA, María C	1/4/85 al 31/8/87	CIC (Investigadora)

ARTECA, Gustavo A.	1/3/82 al 31/3/85	CONICET (Becario)
VILLAR, Hugo O.	1/3/82 al 31/3/85	CONICET (Becario)
MALUENDES, Sergio A	1/3/82 al 31/8/87	CONICET (Becario)
MALUENDES, Sergio A	1/9/87 al 31/9/91	CIC (Investigador)
STRADELLA, Omar G.	1/5/84 al 8/12/89	CONICET (Becario)
GLOSSMAN, Mario D.	1/4/82 al 10/8/88	CONICET (Becario)
GLOSSMAN, Mario D.	9/10/91 al 31/9/92	CONICET (Investigador)
CACHAU, Raúl E.	1/3/85 al 11/9/87	CONICET (Becario)
GÓMEZ, Inés	1/3/85 al 30/4/85	CONICET (Becaria)
OTTAVIANELLI, Emilce E.	1/11/85 al 30/6/91	CIC (Becaria)
ESTIÚ, Guillermina L.	1/4/86 al 15/11/90	CONICET (Becaria)
ESTIÚ, Guillermina L.	9/10/91 al 30/4/99	CONICET (Investigadora)
FRYDMAN, Gabriel I	1/4/86 al 9/10/87	CONICET (Becario)
DÍAZ, Carlos G.	1/5/86 al 31/12/91	FCE, UNMP (JTP)
ESTRÍN, Darío A.	1/11/86 al 29/2/88	CIC (Becario)
ESTRÍN, Darío A.	1/3/88 al 15/8/89	FCEN, UBA (JTP)
KALKO, Susana G.	1/11/86 al 31/7/88	CIC (Becaria)
SASTRE VIDAL, Luis	1/9/87 al 30/11/87	PNUD (Investigador)
LÓPEZ, María B.	1/10/87 al 1/12/95 y 1/6/04 y continúa	UNCatamarca (Profesora UNC)
GUBERMAN, Guillermo	1/11/87 al 31/7/88	CIC (Becario)
BIDACOVICH, Eduardo A.	1/2/87 al 31/12/89	FCE, UNLP (JTP)
ECHAVE, Julián	1/4/87 al 31/1/91	CONICET (Becario)
ECHAVE, Julián	11/8/92 al 31/6/98	CONICET (Investigador)
PAREDES O., Patricia	1/4/88 al 31/8/91	FCE, UNLP (ATP)
MILESI, María V.	1/11/87 al 31/12/89	CIC (Becaria)
PERUCHENA, Nélica M.	1/3/92 al 30/4/99	FCENA, UNN (Profesora)
JORGE, Nelly L.	1/11/92 al 30/4/99	FCENA, UNN (Profesora)
SOSA, Gladys L.	1/4/93 al 30/7/01	FCENA, UNN (Profesora)
SOTELO, Edgar D.	1/5/93 al 31/12/93	FCENA, UNN (JTP)
ABARCA LEÓN, Carmen L.	1/3/94 al 31/7/94	FCE, UNLP
PIS DÍEZ, Reinaldo	1/1/95 al 30/4/00	CONICET (Investigador)
ESPEJO, Viviana	1/12/94 al 31/5/95	U.N. Tierra del Fuego
MEDINA C., Lucrecia	1/5/95 al 31/12/96	Facultad. Bioquím., UNT
TAINI, Mario	1/5/95 al 31/12/97	Fac. Cs. Exactas, UNLP
OCAMPO, Ofelia R.	11/2/96 y continúa	Fac. Cs. Exactas, UNLP
GAVERNET, Luciana	1/3/97 al 31/12/00	Fac. Cs. Exactas, UNLP
FIRPO, Mariano	1/3/97 al 30/7/01	Fac. Cs. Exactas, UNLP
TUEROS, Matías	1/8/97 al 30/2/02	Fac. Cs. Exactas, UNLP
PIAGGIO, María V.	1/9/97 al 1/9/00	Fac. Bioq. y Cs. Biol.. UNLP
OKULIK, Nora Beatriz	1/12/97 al 30/4/02	Fac. Ingeniería, UNN Nordeste
CERVELLINI, María Inés	1/12/97 al 31/12/01	Fac. Cs. Ex. Nat. UNPampa
ZAMBRUNO, Marta Alicia	1/12/97 al 31/12/01	Fac. Cs. Ex. Nat. UNPampa
UNKRODT, Fernando R.	1/5/97 al 31/12/97	Fac. Cs. Exactas, UNLP
OSICKA, Rosa M.	1/3/98 al 31/12/01	Fac. Agroind. UNN Nordeste
CARDOZO, María C.	1/3/98 y continúa	Fac. Agroind. UNN Nordeste
FRANCA, Carlos	1/3/98 al 31/5/98	Fac. Cs. Exactas, UNLP

NÚÑEZ, María B.	1/3/98 al 31/12/03	Fac. Ingeniería, UNN
AGUADO, María I.	1/3/98 al 31/12/03	Fac. Ingeniería, UNN
PIOMBI de CAMPO, Cecilia	1/11/98 al 30/3/03	Nordeste UN Litoral
MERCADER, Andrés	1/3/99 al 30/7/01 y 1/1/05 y continúa	Fac. Cs. Exactas, UNLP
DUCHOWICZ, Pablo	1/3/99 al 31/12/05	Fac. Cs. Exactas, UNLP
RENDTORFF, Nicolás	1/5/99 al 30/7/01	Fac. Cs. Exactas, UNLP
GEMIO SIÑANI, Rómulo R.	1/6/99 al 1/03/02	Univ. Mayor San Andrés, Bolivia
MARTINO, Claudia M.	1/7/99 al 31/12/01	Fac. Cs. Exactas, UNLP
KRENKEL, Germán	1/3/00 al 30/4/03	Fac. Ingeniería, UNLP
LÓPEZ TÉVEZ, Libertad L.	1/11/99 al 30/10/02	Fac. Ingeniería, UNN
MORA, Verónica	1/3/00 al 30/7/01	Nordeste Fac. Cs. Exactas, UNLP
MARINO, Damián M.	1/3/00 y continúa	Fac. Cs. Exactas, UNLP
PERUZZO, Pablo	1/3/00 al 1/1/03	Fac. Cs. Exactas, UNLP
MAGUNA, Fabiana P.	1/7/00 al 26/10/10	Fac. Agroind., UNN
TOMÁS, Roberto	1/9/01 al 30/11/01	Colegio Nacional de La Plata
CASTAÑETO, Heriberto	1/2/03 al 31/10/05	Univ. Mayor San Andrés, Bol.
COSCARELLO, Ethel N.	1/10/02 y continúa	Fac. Cs. Exactas, UNLP
PONNAMBALAM, Venuvanalingam	1/5/04 al 31/7/04, 10/9/05 al 11/11/05	INIFTA, UNLP y TWAS
IGLESIAS, Silvia	1/3/04 al 1/12/07	Fac. Farmacia y Bioq., UBA
SANCHO, Matías Israel	1/5/04 y continúa	Fac. Quim. Bioq., UNSL
GARRO MARTÍNEZ, Juan C.	1/6/04 al 04/09/08	Fac. Quim. Bioq., UNSL
TALEVI, Alan	1/1/05 y continúa	Fac. Cs. Exactas, UNLP
FALZONI, Elvira María	1/4/05 al 17/08/07	Fac. Cs. Ex. Nat., UBA
ANDRADA, Matías Fernando	1/6/05 y continúa	Fac. Quim. y Bioq. UNSL
COMELLI, Nieves Carolina	1/6/05 y continúa (Cs. Ex.)	Fac. Cs. Ex. y Nat., UNCA
COMELLI, Nieves Carolina	1/5/06 y continúa (Cs. Hum.)	Fac. Cs. Ex. y Nat., UNCA
FUENTES, Ana Silvina	1/6/05 al 1/12/07	Fac. Cs. Ex. y Nat., UNCA
STAHL, Adriana Elizabeth	1/6/05 y continúa	Dpto. Qca. Org., FCEN, UBA
GIRAUDO, Miguel A. Domingo	1/8/05 al 21/05/09	Carrera de C. y T. UNL
BATTISTA, Stella Maris	1/8/05 y continúa	ánus PROPLAME, FCEN, UBA
PAMIES, Silvana C.	1/8/06 y continúa	Fac. Ing., UTN, Reg. Chaco
DEL VALLE ORTIZ, Erlinda	1/3/06 y continúa	Fac. Cs. Exactas, UNCA
VITALE, Martín G.	1/3/06 y continúa	INIFTA, Div. Quim. Teórica
TRAJTEMBERG, Silvia	1/10/06 al 01/03/09	Dpto. Qca. Org., FCEN, UBA
GUPTA, Anuj	1/05/07 al 31/07/07	Indian Inst. Technology, India
MYERS, Ernesto S.	1/10/08 y continúa	Fac. Ingeniería, UNLP
ALEGRE, María L.	1/05/09 al 30/10/09	INIFTA, Div. Quim. Teórica
IBEZIM, Emmanuel C.	01/09/09 al 30/11/09	University of Nigeria, Nsukka
MOFIKOYA, Adegboyega Isau	01/03/10 y continúa	Fed. Colle. Educat., Ogun State
MULLEN, Laverne	01/01/09 al 31/12/09	Irish University, Irlanda
VILLAMAYOR, Rafael	01/09/09 al 31/12/10	INIFTA, Div. Química Teórica
EYHARCHET, Alejandro	01/10/09 y continúa	INIFTA, Div. Química Teórica
PANDEY, Kartikay		Sanat Products Ltd., India
LEE, Adam		Durham University, UK
KOLACZ, Magdalena	15/11/10 al 13/02/2011	AGH University, Poland

CAMINO, Jeremías	01/03/10 y continúa	INIFTA, Div. Química Teórica
VIDAKOVIĆ, Nikola	28/07/10 al 31/10/10	Serbia
OÑA, Ofelia	19/11/10 y continúa	INIFTA, Div. Química Teórica
WONG, Kenneth	04/07/11 y continúa	Imperial College, London
MÜLLER, Marlen	01/10/11 y continúa	EHCT, Suiza
GARCÍA, Javier	1/1/10 al 21/3/12	INIFTA, Divisiòn Quimica Teòrica

Desde el 1/9/03 y hasta el 17/12/09, a partir de la puesta en funciones como Director del INIFTA, se ejerce la dirección de todo el personal Técnico y de Profesionales de Apoyo que revista en esta institución y que realizan diversas tareas específicas. Este plantel estaba constituido de la siguiente forma

TÉCNICOS

APELLIDO Y NOMBRE

CATEGORÍA

AMARILLA, Fernando	Asociado (t.c.)
ANTONELLI, Mabel	Principal (d.e.)
ARAMBURU, Julio	Principal (d.e.)
CÁNEVA, Carlos	Principal (t.c.)
CÁNEVA, Fernando	Principal (t.c.)
COTIGNOLA, Luis H.	Principal (d.e.)
DEVOTO, Sergio M.	Principal (d.e.)
FORMOSO, Abraham	Principal (d.e.)
HERNÁNDEZ, Liliana A.	Principal (d.e.)
MELÉNDEZ, Ana G.	Principal (d.e.)
PAOLOZZI, Paola	Asistente (d.e.)
TIMBERI, Claudia	Principal (d.e.)

PROFESIONALES

ALDASORO, Roberto	Principal (d.e.)
BATTISTONI, Patricia A.	Adjunto (t.c.)
CARUSO, Jorge A.	Adjunto (d.e.)
CORDERO, María C.	Principal (d.e.)
CORTIZO, Susana	Principal (d.e.)
FLORES, Ethel S.	Principal (d.e.)
GRILLO, Claudia	Principal (d.e.)
ISIDORI, Alberto	Principal (d.e.)
LEDESMA, Alicia	Asistente (t.c.)
LLANOS, Jorge L.	Principal (t.c.)
MASSARUTTI, Jorge	Principal (d.e.)
OCAMPO, Ofelia	Adjunto (d.e.)
PESCE, Adolfo	Adjunto (t.c.)
RODRÍGUEZ PRESA, María J.	Adjunto (d.e.)
ROZAS, María F.	Adjunto (t.c.)
SAN MARTÍN, José Lino	Principal (d.e.)

SANSERVINO, Miguel	Asistente (d.e.)
TORI, Carlos A.	Principal (d.e.)
TURNER, Daniel	Principal (d.e.)
ZUBIAGA, Alicia	Principal (d.s.)

DIRECCIÓN Y CODIRECCIÓN DE TESIS DOCTORALES Y DE MAESTRÍAS

- FERNÁNDEZ, Francisco M., *Aplicación de la metodología hipervirial a la resolución mecano-cuántica de modelos de interés fisicoquímico* (finalizada y aprobada).
- DONNAMARÍA, María C., *Aplicación de la teoría de los funcionales de la densidad al estudio de la estructura electrónica de átomos y moléculas* (finalizada y aprobada).
- MALUENDES, Sergio A., *Estudio teórico de las propiedades cuánticas fundamentales de sistemas de interés fisicoquímico* (finalizada y aprobada).
- ARTECA, Gustavo A., *Desarrollo y aplicación de métodos teóricos para obtener autovalores y autofunciones en sistemas atómicos y moleculares* (finalizada y aprobada).
- BARBIRIC, Dora Ana J., *Aplicación de la teoría de orbitales moleculares al cálculo de la estructura electrónica de hidrocarburos saturados* (finalizada y aprobada).
- VILLAR, Hugo O., *Estudio teórico de la reactividad química en reacciones donde intervienen radicales-iones* (finalizada y aprobada).
- CACHAU, Raúl E., *Estudio teórico de las interacciones intermoleculares en sistemas donador-aceptor* (finalizada y aprobada).
- ESTIÚ, Guillermina L., *Estudio teórico de fenómenos superficiales de interés fisicoquímico* (finalizada y aprobada).
- GLOSSMAN, Mario D., *Estudio de la estructura de átomos y moléculas por medio de funcionales de la densidad* (finalizada y aprobada).
- STRADELLA, Omar G., *Análisis topológico cuántico de sistemas moleculares* (finalizada y aprobada).
- OTTAVIANELLI, Emilce E., *Propiedades electrónicas y reactividad en química inorgánica y bio-inorgánica* (finalizada y aprobada).
- ECHAVE, Julián, *Estudio de sistemas fisicoquímicos dinámicos* (finalizada y aprobada).
- ESTRÍN, Darío A., *Tratamiento de problemas de autovalores a través de relaciones de recurrencia* (finalizada y aprobada).
- LÓPEZ, María B., *Métodos aproximados de la química cuántica aplicados a la interpretación de procesos de electrodo* (finalizada y en redacción)
- PAREDES-OLIVERA, Patricia, *Estudio teórico de procesos elementales vinculados a los fenómenos superficiales de origen químico y/o electroquímico* (finalizada y aprobada).
- DÍAZ, Carlos G., *Estudio teórico de sistemas fisicoquímicos* (finalizada y aprobada).
- FRYDMAN, Gabriel I., *Implementación de métodos teóricos para resolver problemas fisicoquímicos* (iniciada e interrumpida)
- MESÓN, Alejandro M., *Desarrollo teórico de la metodología mecano-cuántica hipervirial y aplicación a modelos fisicoquímicos* (finalizada).
- KALKO, Susana G. *Estudio teórico de proteínas* (finalizada y aprobada).
- BIDACOVICH, Eduardo A., *Estudio teórico de moléculas de interés biológico* (iniciada e interrumpida)

- GUBERMAN, Guillermo D., *Optimización de los métodos de cálculo para el estudio de estructuras farmacológicamente activas. Aplicación al estudio de inhibidores del influjo del catión calcio* (iniciada e interrumpida).
- MILESI, María V., *Diseño, síntesis y estudio teórico de la estructura electrónica de nuevos antagonistas cálcicos* (iniciada e interrumpida).
- MRAULAG, María I., *Desarrollo y aplicación de la teoría de los funcionales de la densidad a diversos aspectos de la reactividad química* (iniciada e interrumpida).
- PERUCHENA, Nélica M., *Cálculos de constantes de acoplamiento en espectroscopía de resonancia magnética nuclear por medio de la teoría de orbitales moleculares* (finalizada y en aprobada).
- JORGE, Nelly, *Estudios conformacionales teóricos, estructura electrónica molecular y reactividad química de peróxidos cíclicos* (finalizada y aprobada)
- SOSA, Gladys L., *Análisis topológico de heteroanillos* (finalizada y aprobada).
- CAMPOS, Ofelia R., (Asesoramiento Académico), *Estudio del efecto producido por hongos sobre la adsorción de algunos elementos en suelos* (en ejecución).
- PIAGGIO, María V., *Evaluación de los resultados del aprendizaje realizando la práctica como una actividad integrada a algunos aspectos de los proyectos de investigación en marcha* (finalizada y aprobada).
- OKULIK, Nora B., *Hacia una enseñanza-aprendizaje más apropiada del concepto de orbitales en Química* (finalizada y aprobada).
- ZAMBRUNO, Marta Alicia, *La Química interesa a los alumnos de otras ciencias?* (iniciada e interrumpida)
- CERVellini, María Inés, *La Química: Razones de la poca adhesión de los educandos en sus aprendizajes* (iniciada e interrumpida).
- FRANCA, Carlos, *Estudio Teórico de compuestos supramoleculares del tipo calix-resorcinarenos* (iniciada e interrumpida).
- PIOMBI de CAMPO, Cecilia L., *Escribir para aprender: Ensayo de una alternativa en la enseñanza de la química en 5° y 6° año de la carrera de técnico químico de la EET N° 279 de Sunchales, Provincia de Santa Fe* (finalizada y aprobada el 3/12/02).
- GEMIO SIÑANI, Rómulo R., *Descomposición térmica del fotodímero de antraceno en fase gaseosa y en solución* (finalizada y aprobada).
- COSCARELLO, Ethel N., *Aplicación de la Teoría QSAR/QSPR a problemas de interés fisicoquímico* (en ejecución).
- KRENKEL, Germán, *Búsqueda y Análisis de Alternativas para la Reducción del Nivel de Scrap en la Industria de Moldeo Plástico por Inyección* (Trabajo Final terminado y aprobado el 3/5/03).
- DUCHOWICZ, Pablo, *Empleo de la Teoría QSAR/QSPR en problemas de interés fisicoquímico y de actividad biológica* (finalizada y aprobada el 7/12/05).
- IGLESIAS, Silvia, *Estudio, desarrollo y aplicación de modelos psico-neuro-inmuno-endócrinos para el manejo del estrés en la optimización del rendimiento académico de estudiantes y graduados universitarios* (iniciada e interrumpida).
- CASTAÑETO, Heriberto, *Estudio teórico-experimental de la adsorción de materiales carbonáceos* (finalizada y aprobada el 7/12/05).
- SANCHO, Matías Israel, *Estructura y propiedades complejantes de anillos fenólicos presentes en benzofenonas y flavonoides* (finalizada y aprobada el 16/03/09)).
- MARINO, Damián, *Estudio teórico-experimental sobre la acción (geno)tóxica de compuestos orgánicos de relevancia ambiental* (finalizada y aprobada, 29/04/09).

- TALEVI, Alan, *Topología molecular aplicada al diseño y búsqueda de nuevos fármacos anticonvulsivos* (finalizada y aprobada el 28/09/07).
- GARRO MARTÍNEZ, Juan Ceferino, *Estudio molecular de enaminonas: una propuesta en la búsqueda de nuevas drogas antiépilépticas* (finalizada y aprobada el 04/09/08).
- FALZONI, Elvira María, *Compuestos tóxicos y etiopatogenia de solanáceas* (finalizada y aprobada el 17/08/07).
- COMELLI, Nieves Carolina, *Estudio ab initio de la interacción de la feromona sexual de *Cydia Pomonella* con la proteína ligante de Feromona (PBP)* (en ejecución).
- COMELLI, Nieves Carolina, *Diagnosic del estado de la educación provincial en las disciplinas del área de Ciencias Naturales y los modos de inclusión en la educación ambiental. Diseño de propuestas estratégicas* (en ejecución).
- MAGUNA, Fabiana P., *Administración de medicamentos sin prescripción médica en la infancia*, (finalizada y aprobada el 26/10/10).
- BATTISTA, Stella Maris, *Correlación del estudio estructural con la actividad biológica de ciclopéptidos de origen fúngico y vegetal* (en ejecución).
- STAHL, Adriana, *Preparación de moléculas susceptibles de ser marcadas para uso en diagnóstico por imágenes* (en ejecución).
- GIRAUDO, Miguel Ángel Domingo, *Genuinidad y calidad de los alimentos. Caso aminoácidos* (finalizada y aprobada con Sobresaliente diez el 21/05/09).
- MERCADER, Andrés, *Desarrollo de nuevos métodos y modelos en la teoría QSAR/QSPR para estudiar propiedades fisicoquímicas* (finalizada y aprobada el 13/03/09).
- DEL VALLE ORTIZ, ERLINDA, *Estudio teórico de las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de materiales nanoestructurados* (en ejecución).
- PAMIES, Silvana C., *Interacciones intra e intermoleculares en reactantes deMaillard* (en ejecución).
- ANDRADA, Matías F., *Termodinámica y mecanismo de las reacciones de oxidación competitiva en compuestos azufrados de ajo. Un estudio molecular computacional del primer principio* (en ejecución).
- MYERS, Ernesto S., *El Parque Tecnológico y su vinculación con los estudiantes de ingeniería* (en ejecución).
- GARCÍA, Javier, *Consideración de la flexibilidad conformacional molecular en los estudios QSAR* (finalizada y aprobada el 21/3/12).

POSICIONES Y CARGOS QUE ACTUALMENTE OCUPAN ALGUNOS EX-TESISTAS Y BECARIOS

- FERNÁNDEZ, Francisco Marcelo: Profesor Asociado Ordinario (D.E.) del Area Fisicoquímica, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP y miembro de la Carrera del Investigador Científico (Categoría Inv. Principal) del CONICET.
- SICRE, Eduardo: Sub-Director del Centro de Investigaciones Ópticas (CIOp) y Miembro de la Carrera del Investigador Científico (Categoría Independiente) del CONICET.
- DONNAMARÍA, Cristina: Miembro de la Carrera del Investigador Científico de la CIC (Provincia de Buenos Aires) e investigadora del ILFYSIB (CONICET-UNLP).

- BARBIRIC, Dora Ana: Jefe de Trabajos Prácticos (D.E.) del Departamento de Fisicoquímica, FCEN, UBA.
- MESÓN, Alejandro Mario: Profesor Adjunto del Departamento de Fisicomatemáticas, Facultad de Ingeniería, UNLP y Profesor Adjunto del Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP.
- ARTECA, Gustavo Alberto: Professeur Agregué de Chimie Physique, Université Laurentienne, Chemin Du Lac, Ramsey, Sudbury, Ontario, Canada.
- DÍAZ, Carlos: Profesor Adjunto (D.E.), Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Mar del Plata.
- ESTRÍN, Darío: Miembro de la Carrera del Investigador Científico y Tecnológico del CONICET, Categoría Investigador Independiente, Jefe de Trabajos Prácticos, Departamento de Química, FCEN, Universidad de Buenos Aires.
- ESTIÚ, Guillermina L.: Investigadora del Quantum Program Exchange, Gainesville University, Florida, USA, a partir del año 2004.
- GLOSSMAN, Daniel M.: Miembro de la Carrera del Investigador Científico y Tecnológico del CONICET, Categoría Adjunto, Profesor Adjunto del Departamento de Química, Universidad Nacional de Lujan. Actualmente radicado en México, Univ. Guanajuato.
- PERUCHENA, Nélica: Profesora Titular de Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Exactas, Naturales y Agrimensura, Universidad Nacional del Nordeste.
- SOSA, Gladys L.: Profesora Titular de Química Inorgánica, Universidad Tecnológica Nacional, Delegación Corrientes.
- JORGE, Nelly: Profesora Titular de Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Exactas, Naturales y Agrimensura, Universidad Nacional del Nordeste.
- PIS DÍEZ, Reinaldo: Miembro de la Carrera del Investigador Científico y Tecnológico del CONICET, Categoría Independiente.
- MALUENDES, Sergio A.: Staff Programmer, IBM, San José, California, U.S.A.
- OTTAVIANELLI, Emilce: Miembro de la Carrera del Investigador Científico y Tecnológico del CONICET, Categoría Asistente y Profesora Adjunta de Química General e Inorgánica, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de Salta.
- VILLAR, Hugo O.: Director of Chemistry, Terrapin Technologies, San Francisco, California, U. S. A.
- STRADELLA, Omar: Senior Scientist and Director of Computation, Silicon Graphics, California, U. S. A.
- GUBERMÁN, Guillermo D.: Gerente del Departamento de Computación, TEPELCO S.A.C.I., Buenos Aires.
- ECHAVE, Julián: Miembro de la Carrera del Investigador del CONICET, Categoría: Investigador Principal. Lugar de trabajo: INIFTA.
- CACHAU, Raul E.: Investigador Permanente del Structural Biochemistry Program, Biomedical Supercomputing Center, National Cancer Institute-Frederick Cancer Research and Development Center, Frederick, Madison, USA.
- PAREDES-OLIVERA, Patricia: Miembro de la Carrera del Investigador Científico del CONICET, Profesora de Fisicoquímica, Universidad Nacional de Córdoba.
- LÓPEZ, María B.: Profesora Titular de la Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de Catamarca.
- SIÑANI, Rómulo René Gemio, Profesor de Química, Universidad Mayor de San Andrés,

- La Paz, Bolivia y Presidente de la Asociación Boliviana de Químicos.
- OKULIK, Nora, Profesora Titular de la Facultad de Agroindustrias, Universidad Nacional del Nordeste, Roque Saenz Peña, Chaco.
 - PIOMBI del CAMPO, Cecilia, Profesora de Educación Media y Terciaria, Sunchales, Santa Fe.
 - KRENKEL, Germán, Ingeniero Industrial contratado en REPSOL-YPF, Planta La Plata.
 - CASTAÑETO, Heriberto, Profesor de Química, Universidad Mayor de San Andrés, La Paz, Bolivia.
 - DUCHOWICZ, Pablo Román, Miembro de la Carrera del Investigador Científico del CONICET, Categoría Inv. Adjunto.
 - GIRAUDO, Miguel, Profesor Titular de la Universidad Nacional de Lanús y Director de la Carrera de Ciencia y Tecnología de los Alimentos de la UNLa.
 - MOFIKOYA, Adegboyega Isau, Chemistry Lecturer at National Open University of Nigeria.
 - IBEZIM, Emmanuel C., Chemistry Lecturer and Independent Researcher at Department of Pharmaceutics, University of Nigeria, Nsukka.
 - COSCARELLO, Ethel, Profesora Titular Ordinaria de Química Analítica en la Universidad de Morón, Prov. Bs. As.
 - OÑA, Ofelia, Miembro de la Carrera del Inv. Científico y Tecnológico del CONICET, en el cargo de Investigador Asistente, a partir del 19/11/10.

COLABORACIÓN EN PUBLICACIONES CIENTÍFICAS

- * Miembro del Comité de Redacción de la Folia Chimica Theoretica Latina, Madrid, España.
- * Miembro del Consejo Científico del Acta Sud Americana de Química.
- * Vocal del Comité Asesor de Industria y Química, AQA.
- * Miembro del Comité de Redacción de los Anales de la Sociedad Científica Argentina.
- * Miembro Consultor del Anuario Latinoamericano de Educación Química.
- * Guest Columnist for Meetings Roundup, a Regular Feature of Chemical Design Automation News, Massachusetts, USA.
- * Miembro del Editorial Advisory Board del Journal of Mathematical Chemistry, J. C. Baltzer AG, Scientific Publishing Company, Switzerland.
- * Secretario de Redacción de los Anales de la Sociedad Científica Argentina.
- * Miembro del Comité Editorial de los Anales de la Asociación Química Argentina.
- * Co-Editor del Volumen del Journal of Molecular Structure (THEOCHEM) dedicado al XVIII CIQTEL, La Plata, Argentina.
- * Director de los Anales de la Sociedad Científica Argentina.
- * Revisor de las siguientes publicaciones: Anales de la Asociación Química Argentina, Anales de la Sociedad Científica Argentina, Industria y Química, Acta Sud Americana de Química, Journal of Chemical Physics, Journal of Computational Physics, Physics Letters A, Journal of the American Chemical Society, Journal of Mathematical Physics, Journal of Computational Chemistry, American Journal of Physics, Proceedings of the Indian Academy of Sciences, Inorganic Chemistry, European Journal of Inorganic Chemistry, Journal of Chemical and Engineering Data, Journal of Chemometrics, Physical Chemistry Chemical Physics (CPPC),

Journal of Physical Chemistry, Internet Electronic Journal of Molecular Design, Journal of Organic Chemistry, Organic Letters, Acta Physica et Chimica Debrecina, Chemical Physics Letters, THEOCHEM- Journal of Molecular Structure, Molecular Diversity, Polymer, European Journal of Medicinal Chemistry, Journal of Pharmacy & Pharmaceutical Sciences, Journal of Fluorine Chemistry, Molecular Diversity, Journal of Chemical Information and Computational Sciences, Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters, Journal of Molecular Structure, Asian Chemistry Letters, Journal of Molecular Modeling, Chemical Physics, Current Computer-Aided Drug Design, Journal of Agricultural and Food Chemistry, Croatica Chemica Acta, Bioorganic & Medicinal Chemistry, Chemosphere, Journal of Biomolecular Screening, European Journal of Medicinal Chemistry, Physical Review Journals, Current Medicinal Chemistry, Minireviews in Medicinal Chemistry, Rapid Communications in Mass Spectrometry, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, Journal of Nanomaterials, Revista de Tecnología y Ciencias Aplicadas, Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry, Central European Journal of Physics, Journal of Chemical Information and Modeling, Journal of Biological Systems, Indian Journal of Biochemistry & Biophysics Proceedings of the International Symposium on Bio-Medical Informatics and Cybernetics: BMIC 2007, Archiv der Pharmazie, Current Drug Discovery Technologies, Environmental Chemistry Letters, Chemical Biology & Drug Design, Marine Pollution Bulletin, Chemical Research in Toxicology, The Open Crystallography Journal, The Open Spectroscopy Journal, African Journal of Pure & Applied Chemistry, QSAR & Combinatorial Science, Letters in Organic Chemistry, Biomedical Central Immunology, Acta Bioquímica Clínica Latinoamericana, Journal of Molecular Graphics & Modelling, Journal of Organometallic Chemistry, The Open Natural Products Journal, Letters in Drug Design & Discovery, Materials Science and Engineering B, Asian Journal of Material Sciences, Journal of Applied Sciences, Journal of Computational Sciences and Engineering, Latin American Journal of Pharmacy, Journal of Computational Biology & Bioinformatic Research, International Journal of Biomedical Science (IJBS), ISSN 1550-9702, International Journal of Chemical Kinetics, Cellulose Chemistry and Technology, Medicinal Chemistry Communications (Royal Society of Chemistry), African Journal of Biochemistry Research, Avances en Ciencia e Ingeniería (ISSN: 0718-8706), Journal of the Serbian Chemical Society, African Journal of Pharmacy and Pharmacology, SAR and QSAR in Environmental Research, Nanoscale, Physical Chemistry Chemical Physics, Critical Reviews in Toxicology, Journal of Chemical Engineering and Materials Science, The Chemical Educator, Chemical Sciences Journal, African Journal of Food Sciences, Chirality,

Dalton Transactions, Industrial and Engineering Chemical Research, Medicinal Chemistry Research,

HYLE on Mathematics & Chemistry, J. Enzyme & Med. Chem., Dove Medical Press Journals,

Journal of Modern Mathematics Frontier (JMMF), Revista Aportes Científicos desde las Humanidades,

Herald Journal Education and General Studies, Drug Design, Development and Therapy.

* Asesor Científico del Comité Editor de la Revista de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura (FACENA), Universidad Nacional del Nordeste, a partir del 29/11/93 y continúa.

* Asesor del Comité, Editorial de CRC Press, Boca Raton, Florida, USA, a partir del

26/1/94.

- * Presidente de la División de Publicaciones de la Sociedad Científica Argentina entre 1994 y 1999.
- * Director de la Colección Evolución de las Ciencias de la Sociedad Científica Argentina, a entre 1994 y 1997.
- * Miembro del Advisory Board del Asian Journal of Spectroscopy, a partir del año 1996.
- * Miembro de Consejo Asesor Interdisciplinario de la Serie de Monografías de Síntesis, "Temas y Modelos de Futuro", Director Dr. Ramón P. Muñoz Soler, Buenos Aires, 1972.
- * Director de Industria y Química, Asociación Química Argentina, desde el 1/9/03 al 31/10/05.
- * Miembro de Consejo Editorial de OMETECA, Penn State University, USA, desde 2004 y continúa.
- * Miembro del Editorial Board de la publicación periódica Molecular Diversity, Molecular Diversity Preservation International, Matthaeusstrasse 11, CH-4057 Basel, Switzerland, desde March 2004 y continúa.
- * Miembro del Advisory Board del Asian Chemistry Letters, desde Septiembre del 2004.
- * Editorial Board Member of International Journal of Molecular Sciences (ISSN 1422-0067), at the <http://www.mdpi.org/ijms/website>, a partir del 25/11/04 y continúa.
- * Editor-in-Chief del International Journal of Molecular Sciences, 1/12/04 al 31/12/05.
- * Member of the Scientific Advisory Board of MDPI Open Access Journals, a partir del 1/12/04 y continúa.
- * Member of the Editorial Board of the Proceedings of the National Seminar on Emerging Trends in Chemoinformatics NESTC 2006, March 7-9, 2006, India.
- * Editor del IJMS Issue devoted to the "POR Approximation in QSAR/QSPR Theory", 2006.
- * Reviewer del book/symposium in "Knowledge Communication and Peer Reviewing", (KCPR 2006).
- * Member of the Editorial Board, con el cargo de Editor-in-Chief of the Global Journal of Molecular Sciences (GJMS-www.idosi.org), a partir del 27/7/06.
- * Member of the Editorial Board of the Chemistry Central Journal, Chemistry Central, Kilmorie Clarke Ltd., a partir del 23/8/06.
- * Chemical Physics Section Editor, Chemistry Central Journal, a partir del 16/10/06.
- * Member of the Editorial Board of the Journal of Applied Sciences, a partir del 1/2/07.
- * Section Editor of the Cheminformatics and Molecular Modelling section of the Chemistry Central Journal, a partir de 1/10/06.
- * Section Editor of the Computational and Theoretical Chemistry section of the Chemistry Central Journal, a partir de 1/10/06.
- * Editorial Advisory Board Member del Current Drug Discovery Technologies (CDDT), Bentham Science Publishers, a partir del 11/6/07.
- * Associate Editor for Advances in Natural and Applied Sciences, from 1-9-2007 to 1-9-2010, American-Eurasian Network for Scientific Information (AENSI).
- * Editorial Board Member del The Open Natural Products Journal y del Open Natural Products Reviews, Bentham Science Publishers, a partir del 10/08/07.
- * Editorial Board Member del Open Spectroscopy Journal, Bentham Science Publishers, a partir del 19/09/07.
- * Editorial Board Member of the African Journal of Pure & Applied Chemistry, a partir del

15/11/07.

- * Editorial Board Member of The Open Crystallography Journal, Bentham Science Publishers, a partir del 1/12/07.
- * Editorial Board Member of the Kragujevac Journal of Science, a partir del 1/12/07.
- * Editor-in-Chief del The Open Spectroscopy Journal, Bentham Science Publishers, a partir del 13/01/08.
- * Member of the Editorial Board of the Structural Chemistry Section, Chemistry Central Journal, Chemistry Central, Kilmorie Clarke Ltd., a partir del 14/01/08.
- * Reviewer of the International Multi-Conference on Engineering and Technological Innovation (IMETI 2008), June 29 - July 2, 2008, Orlando, Florida, USA. Íbid 2009 y 2010.
- * Member of the Editorial Board of the International Journal of Environmental Sciences (IJES) at Serials Publication, New Delhi, India, www.serialpublications.com, a partir del 1/6/06.
- * Reviewer of the First WSEAS International Conference on Nanotechnology (NANOTECHNOLOGY'09), Cambridge, UK, February 2009.
- * Evaluador de los trabajos presentados en el XXVI Congress of the International Federation of Scientific Cosmetical Chemists (IFSCC), Buenos Aires, 2010.
- * Revisor de trabajos sometidos para su presentación en el International Symposium on Peer Reviewing (ISPR) 2009, Third International Conference on Knowledge Generation, Communication and Management (KGCM) 2009, Orlando, Florida, USA, 10-13/07/09. Ídem 2010.
- * Revisor de los trabajos presentados a la Conferencia Ibero-Americana de Ingeniería e Innovación Tecnológica (CIIT) 2009. Ídem 2010.
- * Editorial Board Member of Technology and Investment (TI), ISSN Print 2150-4059, ISSN Online 2150-4067, a partir del 18/12/09, <http://www.scirp.org/journal/ti>.
- * Member of the Editorial Advisory of Current Organic Synthesis, Bentham Science Publishers, <http://www.bentham.org/cos/EBM>, a partir del 29/12/09.
- * Member of the Editorial Board of the Asian Chemistry Letters a partir del 01/01/10.
- * Member of the Editorial Board of the Intelligent Control and Automation (ICA), Scientific Research Council Inc., <http://www.SciRP.org/journal/ica>, a partir del 01/01/2010.
- * Associate Editor of the American-Eurasian Network for Scientific Information, AENSI Publications a partir del 01/01/10.
- * **Recent Advances in QSAR/QSPR Theory**, Special Thematic Issue of International Journal of Molecular Sciences, Section Physical Chemistry – Theoretical and Computational Chemistry, ISSN 1422-0067, E. A. Castro, Editor, 2009.
- * Recent Advances on Applications of QSAR/QSPR Theory to Chemistry, Special Thematic Issue of Asian Chemistry Letters, E. A. Castro, Editor, 2010.
- * Editorial Board Member of Materials Sciences and Applications, a partir del 1/2/10.
- * Journal's Regional Editor of Current Drug Discovery Technologies, a partir del 1/2/10, <http://www.bentham.org/cddt>.
- * Member of the Editorial Board of International Journal of Water Resource and Protection, a partir del 1/2/10, <http://www.scirp.org/journal/jwarp>.
- * Editorial Board Member of Current Chemical Research a partir del 1/2/10, <http://www.mehtapress.com>.
- * Member of the Editorial Board of the Modern Economy, Scientific Research Publishing,

- <http://www.scirp.org>, a partir del 01/02/10.
- * Member of the Editorial Board of the Journal of Analytical Chemistry, Scientific Research Publishing, USA, <http://www.SciRP.org/journal/ajac>, ajac@scirp.org, ajac@jjemail.org, a partir del 26/02/10.
 - * Member of the Editorial Board of American Journal of Information Security, Scientific Research Publishing, USA, <http://www.SciRP.org/journal/jis>, a partir del 26/02/10.
 - * Member of the Editorial Board of Applied Mathematics, Scientific Research Publishing, USA, <http://www.SciRP.org/journal/am>, am@gremail.com, a partir del 01/03/10.
 - * Member of the Editorial Board of Internacional Journal of Chemoinformatics and Chemical Engineering, a partir del 01/03/10, <http://www.igi-global.com/journals/details.asp?ID=34654>.
 - * Member of the Editorial Board of Journal of Engineering, <http://www.mehtapress.org>, Mehta Press, India, a partir del 05/03/10.
 - * Executive Editor of Internacional Journal of Chemoinformatics and Chemical Engineering (IJCCE), an Official Publication of the Information Resources and Management Association, IGI Global, partir del 07/03/10, <http://www.igi-global.com/Bookstore/TitleDetails.aspx?>
 - * Member of the Editorial Board of Journal of Intelligent Control and Automation, Scientific Research Publishing, USA, <http://www.dcirp.org/journal/ica>, ica@Scirp.org, a partir del 10/03/10.
 - * Member of the Editorial Board of Journal of Physics and Astronomy, Mehta Press, Nr. Saurashtra University, Rajkot, Gujarat, India, a partir del 10/03/10, Physics&astronomy@mehtapress.org, <http://www.mehtapress.com>.
 - * Member of the Editorial Board of “Circuits and Systems”, Scientific Research Publishing, Inc., USA, <http://www.scirp.org/journals/cs>, a partir del 23/03/10.
 - * Evaluador de un DVD Educativo, designado por el Consejo Editorial de la Universidad Nacional de Salta, 09/04/2010.
 - * Journal’s Editorial Board Member of Natural Products Journal, Bentham Science Publishers, <http://www.bentham.org/cos/NPJ>, a partir del 28/04/10.
 - * Member of the Editorial Board of “Journal of Creative Education”, Scientific Research Publishing, Inc., USA, <http://www.scirp.org/journals/cse>, a partir del 01/05/10.
 - * Member of the Editorial Board of International Journal of Communications, Network and System Sciences (IJCNS), Scientific Research Publishing, USA, a partir del 12/05/10.
 - * Reviewer del II International Symposium on Peer Reviewing; ISPR 2010, June 29th – July 2nd, 2010, Orlando, Florida, USA.
 - * Member of the Editorial Board of International Journal of English and Literature, www.academicjournals.org/IJEL, a partir del 14/07/10.
 - * Asesor editorial de Brill Publishers, Leiden, the Netherlands and Boston, MA, 2010.
 - * Member of the Editorial Board of the Journal of Signal and Information Processing, Scientific Research Publishing, USA, a partir del 01/08/10.
 - * Miembro del Comité Editorial de Avances en Ciencias y Tecnología, ISSN: 0718-8706, a partir del 15/08/10.
 - * Reviewer del SPRING 4th International Conference on Knowledge Generation, Communication and Management (KGCM 2010) 2010.
 - * Reviewer de la International Conference on Engineering and Meta-Engineering (ICEME 2010), 2010.
 - * Miembro del Comité Científico y Revisor de la Revista Iberoamericana Interdisciplinar

de Métodos, Modelos y Simulación “Nereis”, Universidad Católica de Valencia, España, a partir del 19/10/2010.

- * Member of the Editorial Board of the Journal of Brewing and Distilling, www.academicjournals.org/JBD, a partir del 01/11/10.
- * Member of the Editorial Board del Journal of Developmental Biology and Engineering, Academic Journals, a partir del 1/12/10.
- * External Editor del International Journal of the Molecular Sciences, desde el 1-2-2009.
- * Revisor de los trabajos presentados en el ECIE-11, Abril de 2011.
- * Miembro del Comitè Revisor de los trabajos presentados al Congreso Nacional de Ingeniería Industrial (COINI) 2011, 3-4/11/11, Rìo Gallegos, Argentina.
- * Member of the Editorial Board and Reviewer of the International Journal of Research in Chemistry and Environmental Sciences (IJRCE), a partir de 27/04/11.
- * Member of the Editorial Board of the Journal of Surfaces and Interfaces in Materials, <http://www.aspbs.com/jsim.html>, a partir del 1/8/11.
- * Member of the Editorial Board of Polymers Research Journal, Nova Science Publishers, 30/08/11.
- * Editor de los Advances in Biological Chemistry (ABC), Scientific Research Publishing, www.scirp.org, a partir del 7/9/11.
- * Member of the Editorial Advisory Board of the Journal Current Computer Aided Drug Design (CCADD), a partir del 1/12/11.
- * Member of the Editorial Advisory Board of the International Journal of Chemical Modeling, (IJCM), a partir del 1/01/12.
- * Revisor del texto electrònico « Advances in Mathematical Chemistry », Editores S. Basak, J. L. Villaveces, y G. Restrepo, 2012.
- * Revisor de las siguientes revistas de Dove Medical Press : Reports in Organic Chemistry, Reports in Theoretical Chemistry y Research and Reports in Medicinal Chemistry a partir del 25/01/12.
- * Executive Editorial Board Member of the SciTech, Journal of Science and Technology.
- * Editorial Board Member of the Biomolecular Research & Therapeutics, a partir del 1/8/2012.
- * Member of the Editorial Board of Agricultural Research and Fisheries (JARF), www.apexjournals.org/jarf, a partir del 24/9/2012.
- * Member del Editorial Review Board of the Journal of Business and Finance: An Open Access International Journal, <http://www.sCiJournals.net/JBF>, ISSN 2305-1825, from September 1, 2012 ending August 31, 2014.
- * Member of the Editorial Board of the AQCSR-Research Journal of Chemical Sciences, www.rapsr.com, a partir

- del 1/10/2012.
- * Advisory Board Member del OA Biochemistry, OA Publishing London, www.OAPublishingLondon.com, a partir del 20/10/2012.
 - * Miembro del Comitè de Referato de la Revista “*Aportes Científicos desde Humanidades 9*”, Fac. Humanidades, Universidad Nacional de Catamarca, Catamarca, Argentina, Resol. F.H. No.420, del 2/10/12.
 - * Member of the Editorial Board of the Journal of Business and Finance, eSci. Journals Publishing, a partir del 1/12/12.

PREMIOS, DISTINCIONES Y RECONOCIMIENTOS ACADÉMICOS

- Premio al mejor promedio de la Promoción 1962 Turno Nocturno de la Escuela Nacional de Educación Técnica #1 "Industrias Químicas", Consejo Nacional de Educación Técnica, Ministerio de Educación de la Nación, Avellaneda, diciembre de 1962.
- Premio "Bernardo Houssay" 1987 en Ciencias Físicas, otorgado por el CONICET, 21/12/87.
- Premio "Dr. Rafael Labriola" 1988 otorgado por la Asociación Química Argentina, 18/11/88.
- Ganador del Concurso 1991 para las Ciencias y las Humanidades, Becas ANTORCHAS, Buenos Aires, 28/4/92.
- Primer Premio Nacional otorgado a obras publicadas en Letras, Artes y Ciencias, Especialidad Física y Química, Producción 1987-1990, Ministerio de Cultura y Educación de la Nación Argentina, Secretaria de Cultura de la Nación, entregado el 10/12/92.
- Designado Socio Honorario de la Sociedad Boliviana de Química, IV Congreso Boliviano de Química, La Paz, Bolivia, 1993.
- Premio "Perito P. Moreno" como Director de los Anales de la Sociedad Científica Argentina, Vol. 223, #1, Año 1993, con las conclusiones de la Campaña al Lago del Desierto, otorgado por la Sociedad Argentina de Estudios Geográficos, GAEA, Buenos Aires, 24 de septiembre de 1993.
- Distinguido como *Preprint Pionner* por “The Chemistry Preprint Server”, Delaware, USA, 16/5/01.
- Premio Horacio Damianovich de la Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales en Química Teórica, Año 1996.
- Premio Cincuentenario, Mención Especial, Asociación Argentina para el Progreso de las Ciencias, Buenos Aires, 20/11/97.
- Designado Académico Plenario de la Academia Belgraniana de Historia, 22/7/02.
- Premio KONEX 2003 en Ciencia y Tecnología, Diploma al Mérito en el Área Físicoquímica, Química Inorgánica y Analítica, Teatro Nacional Cervantes, 2/9/03.
- Preseleccionado para el Premio Iberoamericano a la Excelencia Educativa 2004, Consejo Iberoamericano, Lima, Perú, diciembre de 2003. Designado “Magíster en Gestión Educativa” por resolución del consejo Iberoamericano, 16/4/04, Lima, Perú.
- Diploma de Honor “World Leader Business Person” como distinción al desempeño como

- Director del INIFTA y “Honorary Partner” en carácter de miembro activo de la World Confederation of Bussiness, Houston, Texas, UNLP, 13 de Enero de 2005.
- Designado “Visitante Distinguido” 2004-2007 del Ayuntamiento de Mérida, Yucatán, México, en mérito a la co-creación de las Jornadas Universitarias Internacionales de la Enseñanza de la Química, Mérida, Yucatán, 15/11/2005.
 - Premio Hans J. Schumacher correspondiente al área Fisicoquímica, otorgado por la Asociación Química Argentina, 9/11/07.
 - Reconocimiento como Editor del libro “Ciencias y Humanidades. Convergencias”, A. Barra Ruata, M. C. Boiero y E. A. Castro, Editores, ISBN 950-665-358-5, con el otorgamiento del Testimonio de Honor, Resolución Rectoral No.1322/07, del 20/08/2008.
 - Designado Presidente Honorario de las VI Jornadas Internacionales y IX Nacionales de Enseñanza Universitaria de la Química, Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, UNL, Santa Fe, 9-11/06/2010.
 - Most Cited Paper 2006-2009 Award otorgado por la Revista Bioorganic & Medicinal Chemistry por el trabajo QSAR for non-nucleoside inhibitors of HIV-1 reverse transcriptase, publicado en Bioorg. Med. Chem. Volume14, Issue 17, Pages 5876-5889, P. R. Duchowicz, M. Fernández, J. Caballero, E. A. Castro, F. M. Fernández, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, October 2009.
 - Most Cited Paper 2006-2009 Award otorgado por la Revista Bioorganic & Medicinal Chemistry por el trabajo “Quantitative Structure-Activity Relationship to predict differential inhibition of aldose reductase by flavonoid compounds” publicado en Bioorg. Med. Chem. Volume13, Issue 9, (2005) Pages 3269-3277, M. Fernández, J. Caballero, A. M. Helguera, E. A. Castro, M. P. González, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, October 2009.
 - Premio J. J. J. Kyle otorgado por la Asociación Química Argentina, 26/11/10.
 - Award of Appreciation of ACS Publications for the valuable contribution and dedicated Service in the peer review of manuscripts submitted to ACS journals, December 2011.

ORGANIZACIÓN, PARTICIPACIÓN EN LA GESTIÓN Y MIEMBRO DE COMISIONES Y COMITÉS DE REUNIONES CIENTÍFICAS

- # Secretario Ejecutivo del Comité Organizador de la Primera Reunión Argentina de Fisicoquímica, INIFTA, La Plata, 1978.
- # Secretario Ejecutivo del Comité Organizador del III Congreso Argentino de Fisicoquímica, INIFTA, La Plata, 1983.
- # Miembro del Comité Organizador del II Congreso Argentino de Fisicoquímica, Córdoba, 1980.
- # Organizador del I Encuentro Argentino de Químicos Teóricos, INIFTA, La Plata, 1979.
- # Presidente del Comité Organizador de la I Escuela Latinoamericana de Química Teórica, INIFTA, La Plata, 1981.
- # Organizador de las Escuelas de Verano de Química Teórica 1985, 1986 y 1987, INIFTA, La Plata.
- # Miembro del Comité Académico de las I Jornadas Argentinas de Informática en la Química, AQA, Buenos Aires, 1982.
- # Presidente de las Sesiones de Exposiciones Plenarias de la Primera Reunión Nacional

- de Profesores de Metodología y Práctica de la Enseñanza de la Química (REMPEQ I), Instituto Católico del Profesorado de Córdoba, La Falda, Córdoba, 1983.
- # Miembro del Comité Académico de las II y III Jornadas Argentinas de Informática en la Química, AQA, Buenos Aires, 1984 y 1986.
 - # Organizador del Seminario sobre "La Utilidad de la Química Teórica en el Planteo y Resolución de los Problemas Químicos e Interpretación y Correlación de sus Resultados", AQA, Buenos Aires, 1983.
 - # Miembro del Comité Organizador del Programa Nacional de Actualización y Perfeccionamiento Docente para Profesores de Química, AQA, 1985.
 - # Presidente del Simposio de Química Teórica del XVII Congreso Latinoamericano de Química, Bogotá, Colombia, 1986.
 - # Chairman de la Sesión de Conferencias Plenarias del 19/3/87 en el 1987 Sanibel-Marineland Symposium in Quantum Sciences, Florida, USA.
 - # Presidente del Comité Organizador de las IV Jornadas Argentinas de Informática en las Ciencias Químicas, INIFTA-AQA, La Plata, 1988.
 - # Organizador del I Curso Internacional de Química Teórica del Cono Sur, INIFTA, La Plata, 1988.
 - # Organizador del Microsimposio de Química Teórica, INIFTA, División Química Teórica, 1987.
 - # Miembro de la Comisión Nacional del I International-Argentinian Meeting in Methodology in the Teaching of Chemistry, Universidad Nacional de San Luis, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, 1988.
 - # Secretario del Comité Organizador del International Seminar on Centers of Technological Information in Latin American, AQA, Buenos Aires, 1988.
 - # Secretario de las Sesiones de Exposición de Trabajos presentados en el I Congreso Argentino y Latinoamericano de Educación en la Química (CEQ I), Cosquín, Córdoba, Argentina, 1986.
 - # Co-Organizador del Curso "La Ciencia Frente a los Confines del Conocimiento", Sociedad Científica Argentina, Buenos Aires, 1987.
 - # Presidente del Comité Organizador del XVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, La Plata, 1989.
 - # Miembro del Comité Organizador de la Jornada de Celebración del 40 Aniversario de la creación del INIFTA, 1988.
-
- # Miembro del Comité Científico del XIX Congreso Latinoamericano de Química, AQA, Buenos Aires, 1990.
 - # Componente de la Mesa Redonda sobre el Tema "La Enseñanza de la Química y la Investigación Científica", III Congreso Boliviano de Química, La Paz, Bolivia, 1990.
 - # Organizador y Coordinador de los Seminarios Anuales del Programa QUINOR, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 1992-1994.
 - # Presidente del Comité Organizador de la VII Escuela Latinoamericana de Química Teórica, La Plata, 1994.
 - # Vicepresidente del Comité Organizador del XX Congreso Argentino de Química, Córdoba, 1994.
 - # Coordinador del Taller "Curriculum y Acto de Enseñar", I Jornadas de Especialistas en Enseñanza de la Química, Facultad de Odontología, Universidad Nacional de Rosario, Rosario, Santa Fe, 1993.

- # Coordinador del IV Congreso Boliviano de Química "La Química y el Medio Ambiente", Sociedad Boliviana de Química, Facultad de Ciencias Puras y Naturales, UNMSA, La Paz, Bolivia, 1993.
- # Chairman de la Segunda Sesión Plenaria del XX^e Congrès International des Chimistes Théoricien d'Expression Latine, Grenoble, France, 1993.
- # Organizador de la Primeras Jornadas Docentes del Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 12/12/94.
- # Miembro del Comité Organizador por el Grupo de Especialistas de Enseñanza de la Química (AQA) de las II Jornadas de Enseñanza Universitaria de la Química, Facultad de Farmacia y Bioquímica, UBA, 27-29/4/95.
- # Moderador de la Sesión Vespertina del día 23/5/95 de la Reunión de Estructura Electrónica y Teoría de Colisiones, IAFE, FCEN, Universidad de Buenos Aires, 23-24/5/95.
- # Organizador del II Encuentro Docente, Universidad Nacional de La Plata, Facultad de Ciencias Exactas, 16/12/95.
- # Presidente del Comité Científico del XXI Congreso Argentino de Química, Universidad Nacional del Sur y Asociación Química Argentina, Departamento de Ciencias Exactas, UNS, Bahía Blanca, 18-20/9/96.
- # Coordinador de la AQA del XXII Congreso Argentino de Química, UNLP, La Plata, 22-24/9/98.
- # Miembro del Comité Científico de las III Jornadas en Enseñanza Universitaria de la Química, Vaquerías, Córdoba, 10-12/11/97.
Presidente del Comité Organizador del V Workshop on Sciences and Humanities, Buenos Aires, 1998.
- # Miembro del Comité Organizador del 2nd International Conference on Industry-Education Co-operation (2nd ICIEC), IUPAC and Institute of Chemistry, University of Sao Paulo, Brasil, December 7th - 12th, 1997.
- # Designado Symposium Leader para actuar en carácter de Chairman de la Sesión Plenaria sobre el Tema Proton Transfer Reactions del XXXVIII Sanibel Symposium, Quantum Theory Project, University of Gainesville, Ponce de Leon Resort, St. Augustine, Florida, USA, 21-27/2/98.
- # Miembro del Comité Científico del Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina 1998 (QUITEL 98), Puebla, México, 20-25/9/98. Idem Quitel XXVIII, Montevideo, Uruguay, Septiembre 1-8, 2002.
- # Miembro del Comité Científico de las IV Jornadas Nacionales y I Internacionales de Enseñanza Universitaria de la Química, Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, UNL-AQA, 26-28/5/99.
- # Miembro del Comité Científico de la San Luis Conference for the XXI Century, International Interdisciplinary Congress on Drug Design, San Luis University, San Luis, Argentina, 24-30 August, 2000.
- # Organizador del Workshop on Intra and Intermolecular Interactions in Chemistry, Physics and Biology, Buenos Aires, 31 August-2 September, 2000.
- # Chairman the sesión de poster III del 1 de marzo en el 39th Sanibel Symposium, University of Florida, Ponce de Leon Resort and Conference Center, Florida, USA, 27/2/99 al 4/3/99.
- # Miembro de la Comisión Evaluadora de la X Reunión de Enseñanza de la Química, Universidad de Morón, Buenos Aires, 17-21/9/2000.

- # Miembro del Comité Científico de la Working Conference VII On the Relationships Between the Sciences and Humanities, Costa Rica, junio de 2002.
- # Representante de la AQA al XXIII Congreso Argentino de Química, Corrientes, 10-13/9/00.
- # Miembro del Comité de Honor del XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Caxambú, MG, Brasil 3-9/9/00.
- # Representante argentino ante la Asamblea del año 2000 de la Federación Latinoamericana de Asociaciones Químicas, Lima, Perú, 14-19/10/00.
- # Vocal de la Comisión Organizadora de las II Jornadas Internacionales de la Enseñanza Universitaria de la Química y V Jornadas Argentinas de la Enseñanza Universitaria de la Química, Montevideo, Uruguay, 17-19/9/01.
- # Coordinador del Área de Formación Metodológica Profesional del Departamento de Ingeniería de la Producción, Facultad de Ingeniería, UNLP, a partir del 12/6/01.
- # Coordinador de la Comisión ad hoc de Química para la consideración de los Ingresos a la Carrera del Investigador Científico y Tecnológico del CONICET, Resolución D No. 845, CONICET, Buenos Aires, a partir del 11/6/01.
- # Miembro de Enlace entre la AQA y la Asociación Argentina de Tecnólogos Alimentarios, Buenos Aires, 7-10/8/02.
- # Presidente del Comité Organizador de las VII Working Sessions OMETECA, Pinamar, Argentina, 24-28/11/03.
- # Miembro de la Comisión Asesora de las IV Jornadas Internacionales de Educación Preuniversitaria y Universitaria de la Química, Mérida, Yucatán México, 15-18/11/05.
- # Miembro del Comité de Honor del QUITEL 2004, Porto, Portugal, 2004.
- # Miembro de la Comisión Asesora Científica de las Jornadas Universitarias Nacionales y Desarrollo Sustentable, Universidad Nacional de San Luis, 28-30 de Octubre de 2004.
- # Miembro del Comité de Honor del XXXI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 2005), Margarita, Venezuela, 2-6/10/05.
- # Miembro del Comité Organizador de la “Bienal de Ciencia y Tecnología 2005”, Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires, 8-10/11/05, Jockey Club de La Plata, La Plata, Buenos Aires.
- # Miembro del Comité de Honor de las VII Jornadas Universitarias de Educación en la Química, Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco, Comodoro Rivadavia, Chubut, 10-14/4/06.
- # Miembro del Comité Científico del II Workshop Argentino de Química Medicinal, Reunión Satélite del XXVI Congreso Argentino de Química 2006, San Luis, Argentina.
- # Miembro del Comité de Honor del XXXII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 2006), Cotes de Carthage, Tunisie, 1-6 Septiembre 2006.
- # Miembro del Comité de Honor del XXXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 2007), La Habana, Cuba, 2007.
- # Member of the International Scientific Committee of Computational Chemistry 2007, Cairo, Egypt, December 29-31/2007.
- # Member of the International Advisory Committee of the Pan American Workshop in Quantum Chemistry, Cuernavaca, México, 9-11/10/07.
- # Miembro del Comité Científico de las VIII Jornadas de Enseñanza Universitaria de la Química y XIV Reunión de Educadores en la Química, Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires, Olavarría, 20-23/5/08.
- # Miembro del Comité Científico del XXVI Congreso Argentino de Química, Universidad

- Nacional de Tucumán, Tucumán, 17-19/09/08.
- # Miembro del Comité de Honor del XXXIV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 2008), Universidad de Calabria, Italia, 2008.
 - # Organizador y Coordinador de las Jornadas de Presentación de los Grupos de Investigación del INIFTA, INIFTA, La Plata, 27/03/08.
 - # Miembro del Comité Científico del V Encuentro Nacional de Investigadores en Temas Relacionados con Sustancias Peroxídicas (5° ENISP), Facultad de Ingeniería, UNCPBA, Olavarría, Buenos Aires, 24/10/08.
 - # Miembro de la Comisión Organizadora en el cargo de Presidente Honorario de las VI Jornadas Internacionales y IX Nacionales de Enseñanza Universitaria de la Química, Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, UNL, Santa Fe, 9-11/06/2010.
 - # Presidente del XXVII Congreso Argentino de Química, Universidad Nacional de Lanús, Lanús, Buenos Aires, Septiembre del año 2010.
 - # Member of the Programme Committee for the European Conference on Entrepreneurship and Innovation (ECEI 10), 2009. Íbid 2010.
 - # Member of the Scientific Committee of the II Mathematical Chemistry Workshop of the Americas. Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia, 19-24/07/10.
 - # Miembro del Comité Científico del VI Encuentro Nacional de Investigadores en Temas Relacionados con Sustancias Peroxídicas (6° ENISP), INIFTA, 23-25/06/2010.
 - # Chairman de una Sesión Plenaria del II Mathematical Chemistry Workshop of the Americas, Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia, 19-24/07/10.
 - # Chairman de una Sesión Plenaria de la XI Conference/Working Session: Relations between the Humanities and the Sciences in the Hispanic World, University of Wyoming, Laramie, WY 82071-3603, 36-30 July, 2010.
 - # Miembro Participante de la Mesa Redonda sobre el tema “Chemomathematical Core of Mathematical Chemistry”, II Mathematical Chemistry Workshop of the Americas, Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia, 19-24/07/10.
 - # Evaluador de los trabajos presentados en el Encuentro Binacional de Jóvenes Investigadores del Bicentenario – Encuentro Sur, Universidad Nacional de la Patagonia Austral, 2010.
 - # Moderador de la primera sesión de las Jornadas 2010 de Becarios del INIFTA, INIFTA, 18-20/10/2010. Ídem Jornadas 2011.
 - # Committee member for the 6th Europe Conference on Innovation and Entrepreneurship (ECIE-11), 2011.
 - # Committee member of the 2013 International Conference on Innovation and Entrepreneurship (ICIE), Amman, Jordan, 4-5 March, 2013.
 - # Miembro del Comité Organizador del XXIX Congreso Argentino de Química “Centenario de la Asociación Química Argentina, Mar del Plata, 3-5/10/2012.

CURSOS DICTADOS DE POST-GRADO Y DE COMPLEMENTACIÓN CIENTÍFICA

- Cursos de programación FORTRAN, INIFTA, 1974 a 1978.
- Teoría y práctica del cálculo de orbitales moleculares, Departamento de Química

- Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, UNC, Córdoba, 1978.
- Análisis virial de moléculas diatómicas con enlaces débiles, II Escuela Latinoamericana de Química Teórica, Montevideo, Uruguay, 1982.
 - Introducción y práctica de la teoría de orbitales moleculares, I Escuela Latinoamericana de Química Teórica, INIFTA, La Plata, 1981.
 - El método hipervirial para sistemas cuánticos no-acotados, III Escuela Latinoamericana de Química Teórica, México, 1983.
 - Metodología hipervirial para sistemas cuánticos acotados, IV Escuela Latinoamericana de Química Teórica, Caracas, Venezuela, 1984.
 - Curso de actualización para profesores de enseñanza media sobre temas de Química Teórica y Mecánica Cuántica, Escuela Nacional de Educación Técnica #5 de La Plata, 1983.
- Preparación y presentación de manuscritos científicos, INIFTA, 1983 y 1984.
- Preparación y presentación de manuscritos científicos, Universidad Nacional del Sur, 1984.
 - Preparación y presentación de manuscritos científicos, AQA, 1984 y 1988.
 - Preparación y presentación de manuscritos científicos, Federación Bioquímica de la Provincia de Buenos Aires, 1985 y 1987.
 - Preparación y presentación de manuscritos científicos, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de Catamarca, 1986.
 - Piaget para químicos y por químicos, Asociación Química Argentina, Buenos Aires, 1984, 1985 y 1988.
 - Introducción al cálculo de estructuras electrónicas de átomos e iones, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 1986.
 - Teoría de la estructura electrónica atómica, INIFTA, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 1987.
 - Introducción al análisis de la organización de sistemas, Sociedad Científica, Argentina, 1987.
 - Premisas para una pedagogía de síntesis, Sociedad Científica Argentina, Buenos Aires, 1988.
 - Director del Curso de Especialización en "Diseño de Fármacos", Colegio de Farmacéuticos de la Provincia de Buenos Aires, La Plata, 1988.
 - Suma de serie perturbativas divergentes, Escuela Latinoamericana de Física, Cuernavaca, México, 1989.
 - Curso de metodología del trabajo científico, Universidad Nacional de Lomas de Zamora, Lomas de Zamora, Provincia de Buenos Aires, 1988.
 - Introducción a la escritura científica, Proyecto Integral de Educación Química, Universidad Nacional de San Luis, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, San Luis, 1989.
 - Preparación y presentación de manuscritos científicos, Hospital Rossi, La Plata, 1989.
 - Curso de cálculo de estructuras electrónicas moleculares, VII Escuela Latinoamericana de Química Teórica, La Plata, 1994.
 - Preparación y publicación de manuscritos científicos y presentaciones orales, Instituto de Química Inorgánica, Facultad de Bioquímica, Universidad Nacional de Tucumán, San Miguel de Tucumán, 28/11/94 al 2/12/94.
 - Introducción a la Investigación Educativa, VIII Reunión Nacional de Educadores en la Química (REQ VIII), Universidad Nacional de Rosario, 14-18/10/96.

- Preparación y presentación de manuscritos científicos, Instituto del Diagnóstico de La Plata, La Plata, Junio de 1996.
- Introducción a la Comunicación Científica, Curso de especialización en la Maestría en Didáctica de las Ciencias Experimentales, Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, 4-8/8/97.
- Introducción a la Investigación Científica. La comunicación oral y escrita en el quehacer científico y educativo, Secretaría de Ciencia y Técnica, Universidad Nacional de Lomas de Zamora, Agosto de 1996.
- Introducción al diálogo, III Jornadas de la Enseñanza Universitaria de la Química, Complejo Vaquerías, Córdoba, 10-12/11/97.
- Introducción al diálogo, Jornadas de celebración del X Aniversario de la creación del Anuario Latinoamericano de Educación en Química, Universidad Nacional de San Luis, 26-28/5/98.
- Metodología de la Investigación Científica, Curso de Especialización de la Maestría en Didáctica de las Ciencias Experimentales, Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, 7-11/9/98. Ídem 1999 al 2009.
- Taller sobre Técnicas de Diálogo, II Encuentro Internacional de Desarrollo Personal, Quito, Ecuador, 30/10 al 3/11/98.
- Introducción a la Comunicación Oral y Escrita, Curso de Especialización de la Maestría en Didáctica de las Ciencias Experimentales, Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, 23-27/11/98. Ídem 1999 al 2009.
- Química Teórica, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, Segundo Semestre de 1998.
- Enseñanza de la Química, Universidad CAECE, Buenos Aires, Segundo Semestre de 1998.
- Introducción a la Comunicación Oral y Escrita, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 1998-2009.
- Química Contemporánea, Universidad CAECE, Primer Semestre de 1999.
- Taller sobre Introducción al Diálogo, Nueva Escuela del Sur, Jornadas de Actualización Docente y Reflexión Institucional, Bernal, 15/9/00.
- Taller para Docentes del Ciclo Polimodal acerca del tema “Mapas Temáticos”, Jornadas de Actualización Docente, NES, Bernal, 2/7/02.
- Química Teórica y Computacional, INIFTA, Fac. Cs. Exactas, 2003-2009.
- Minicurso sobre “La Escritura de Artículos Científicos”, XI Jornadas de Jóvenes Investigadores de AUGM y I Encuentro de Jóvenes Investigadores de la UNLP, Observatorio Astronómico de la UNLP, La Plata, 10/9/03.
- Técnicas de Comunicación Escrita en Ciencia y Tecnología, Asociación Química Argentina, 18-19/9/03, 29-30/7/04 y 18-19/7/05.
- Introducción a la Oratoria, Asociación Química Argentina, Buenos Aires, 4-5/12/03. Ídem 7-8/9/06.
- La Función de Liderazgo en las Organizaciones de Enseñanza y de Ciencia y Tecnología, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, Año 2004.
- Disertante en el Curso Teórico-Práctico 2005 de Actualización Interdisciplinaria de la Problemática del Estrés. Un abordaje integral que permite optimizar el desempeño Profesional, sobre el tema “El problema del nerviosismo en la comunicación oral”, Área de Química Analítica Instrumental, Facultad de Farmacia y Bioquímica, UBA, 8/6/05. Ídem 14/6/06.
- Liderar: Arte y Ciencia del Comportamiento Humano. Algunas Aplicaciones en el

- Quehacer Organizativo, Asociación Química Argentina, 27-28/3/06 y 7-8/9/06.
- Técnicas de Comunicación Escrita en Ciencia y Técnica, Estación EA de Rafaela, INTA Rafaela, 24/9/97.
 - Dictado del Taller "El desarrollo de las capacidades comunicacionales en la formación del Ingeniero Industrial", I Congreso de Ingeniería Industrial, Univ. Nac. de La Matanza y UTN, Regional Avellaneda, 1-2/11/07.
 - La Comunicación Oral, Asociación Química Argentina, 17-18/10/07.

COLOQUIOS Y CONFERENCIAS

- ~ Alcances y limitaciones de los métodos de la Química Cuántica, INIFTA, 1977.
- ~ Posibilidades de los métodos de la Química Teórica, Instituto de Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de Córdoba, 1978.
- ~ El teorema no-diagonal del hipervirial y su aplicación a la determinación de funciones de onda estacionarias, Universidad Complutense, Madrid, 1979.
- ~ Transferibilidad de los elementos de matriz de Fock en el cálculo de estructuras electrónicas moleculares, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, España, 1979.
- ~ Metodología de la Química Teórica Molecular y sus aplicaciones, Universidad del Centro de la Provincia de Buenos Aires, Facultad de Ingeniería, Olavarría, Provincia de Buenos Aires, 1979.
- ~ Relaciones hiperviriales y su aplicación a la resolución de modelos físicos sencillos, Comisión Nacional de Energía Atómica, Buenos Aires, 1981.
- ~ Ponente de la Mesa Redonda sobre el tema "Importancia de la investigación científica química en el desarrollo latinoamericano", Congreso Iberoamericano de Ciencias Químicas, Lima, Perú, 1983.
- ~ La investigación científica en los países subdesarrollados. El Tercer Mundo, Latinoamérica, Argentina e INIFTA, Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca, 1984.
- ~ La investigación científica en los países subdesarrollados. El Tercer Mundo, Latinoamérica, Argentina e INIFTA, Comisión Nacional de Energía Atómica, Buenos Aires, 1985.
- ~ La psicología cognoscitiva en la enseñanza de la Química y de la Física, XIX Ateneo de Química, Asociación Química Argentina, Buenos Aires, 1985.
- ~ El desarrollo formal más allá de las operaciones formales, III Reunión Nacional de Educación en Química (REQ III), Universidad Nacional de San Luis, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, 1985.
- ~ Aplicación de la Teoría del Aprendizaje en la Enseñanza de la Química, XVII Congreso Argentino de Química, Bahía Blanca, 1985.
- ~ Suma de serie perturbativas divergentes, III Simposio Brasileiro de Química Teórica, Universidad Federal de San Carlos, São Carlos, San Pablo, Brasil, 1985.
- ~ Some new aspects on the summation of divergent power series, Sanibel Symposium, Session "Resolvents, Propagators, Perturbation Theory and Rational Approximations", University of Florida, Florida, USA, 1986.
- ~ An overview of the research fields in the Theoretical Chemistry Division, INIFTA, Florida-Latin American Workshop on Quantum Sciences, Quantum Theory Project, University of Florida, Gainesville, Florida, USA, 1986.
- ~ Reflexiones acerca de la sobreabundancia de información, Asociación de Cultura

- Espiritual Argentina (ADCEA), Buenos Aires, 1986.
- ~ Algunas paradojas emergentes del exceso de información, Ateneo de Química, Asociación Química Argentina, Buenos Aires, 1986.
 - ~ El Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA): su organización y actividades específicas, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Catamarca, 1986.
 - ~ Significado de la teoría en la Química para racionalizar, correlacionar y predecir fenómenos de reactividad, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Catamarca, 1986.
 - ~ El desarrollo de la Química Teórica a nivel latinoamericano, Simposio de Química Teórica, XVII Congreso Latinoamericano de Química, Bogotá, Colombia, 1986.
 - ~ El programa de cursos de postgrado en el INIFTA, Seminario sobre Integración y los Postgrados en América Latina, XVII Congreso Latinoamericano de Química, Bogotá, Colombia, 1986.
 - ~ Ponente del Seminario sobre "La Química en la Integración Latinoamericana. Sus políticas de cooperación y desarrollo científico-tecnológico", XVII Congreso Latinoamericano de Química, Bogotá, Colombia, 1986.
 - ~ Moderador de la Mesa Redonda sobre "Metodología, Actualización y Perfeccionamiento para Profesores de Química" IUPAC-AQA, La Plata, 1986.
 - ~ Las expansiones $1/N$ en la resolución de modelos de interés fisicomatemáticos, Curso de Verano de Química Teórica y Espectroscopía Molecular, Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso, Chile, 1987.
 - ~ Algunos nuevos desarrollos en la teoría de expansiones $1/N$, XVII Congreso de los Químicos Teóricos de Expresión Latina, Peñíscola, España, 1987.
 - ~ $1/N$ expansions, Florida-Latin American Workshop in Quantum Chemistry and Solid State Theory, University of Florida, Gainesville, Florida, USA, 1987.
 - ~ On the algebraic solution of the time-dependent Schrödinger equation for simple dynamical systems, Workshop on Finite Dimensional Nonlinear Dynamical Systems, Rand Afrikans University, Johannesburg, South Africa, 1988.
 - ~ Algunas reflexiones sobre la Física Cuántica y la expansión de la conciencia, Curso "La Ciencia frente a los confines del conocimiento". Hacia la Universidad de Síntesis, Sociedad Científica Argentina, Buenos Aires, 1987.
 - ~ Algunas metodologías y estrategias aplicables a la formación de Doctores en Química, First Argentine-International Meeting on Methodology in the Teaching of Chemistry, Universidad Nacional de San Luis, 1988.
 - ~ Introducción a la Teoría de Piaget en la enseñanza de la Química Universidad Nacional del Sur, Departamento de Ciencias Exactas, 1987.
 - ~ El papel de la Química Teórica en las Ciencias Químicas, Universidad Nacional del Sur, Departamento de Ciencias Exactas, 1987.
 - ~ Para qué sirve la Química Teórica?, IV Jornadas Químicas Bonaerenses, Consejo Profesional de Química de la Provincia de Buenos Aires, La Plata, 1987.
 - ~ La evaluación primaria de la producción científica, Conferencia Premio Dr. Rafael Labriola, Asociación Química Argentina, Buenos Aires, 1989.
 - ~ Coordinador de la Mesa Redonda "Proyecto Nacional de Información Química", Seminario Regional de Centros de Información Química Tecnológica en América Latina, Asociación Química Argentina, Buenos Aires, 1988.
 - ~ Participante de la Mesa Redonda sobre "Modelación de Moléculas" en el I Taller

- Nacional de Aplicaciones de la Computación a la Biología, La Habana, Cuba, 1988.
- ~ Spectroscopic properties and chemical reactivity of fluoroxi-organic compounds, II WATOC World Congress, Toronto, Canada, 1990.
 - ~ Qué son los Liposomas?, Seminario de Química Teórica, INIFTA, 1990.
 - ~ Some applications of Scheidemann-Dreizler solution of the Thomas-Fermi-Dirac Equation, Ohio Supercomputer Center Workshop on Theory and Applications of Density Functional Theory in Chemistry, Ramada University Hotel & Conference Center, Columbus, Ohio, USA, 1990.
 - ~ The electric potential as a perturbation on the structure grown by deposition of Cu atoms on single crystal Pt(111) surfaces, II International Symposium on Far-from Equilibrium Dynamics of Chemical Systems, The Institute of Physical Chemistry of the Polish Academy of Sciences, Swidno, Poland, 1990.
 - ~ El empleo de modelos en la enseñanza de la Química, III Congreso Boliviano de Química, La Paz, Bolivia, 1990.
 - ~ Conferencista Plenario en el Mini-Simposio de Química Cuántica, Pontificia Universidad Católica de Chile, Facultad de Química, Sección de métodos ab-initio y aproximados, Santiago, Chile, 1990.
 - ~ Modelos, teorías y fenómenos en la enseñanza y la investigación científica, V Jornadas Científico-Tecnológicas de la Facultad de Ciencias, Exactas, Naturales y Agrimensura, Universidad Nacional del Nordeste, 1991.
 - ~ Coordinador de la sesión sobre "Colaboración Internacional en la Educación Química", XII Biennial Conference on Chemical Education, University of California-Davis, Davis, California, USA, 1992.
 - ~ A valuable tool for preparing and delivering speeches and lectures: Thematic Maps, XII Biennial Conference on Chemical Education, University of California-Davis, Davis, California, USA, 1992.
 - ~ Mitos y realidades vinculados a los orbitales, VI Reunión Nacional de Educación en Química, Universidad Nacional de Tucumán, Horco-Molle, Tucumán, 1992.
 - ~ Una aproximación semiempírica a la interfase electroquímica y correlación teórico-experimental, Congreso Costarricense de Física Universidad de Costa Rica, Escuela de Física, San José, Costa Rica, 1992.
 - ~ Ciencia y mitología vinculadas a los orbitales atómicos y moleculares, Congreso Costarricense de Física, Universidad de Costa Rica, Escuela de Física, San José, Costa Rica, 1992.
 - ~ Principales líneas de investigación en química teórica orientadas por E. A. Castro entre 1970 y 1992, Seminarios del Programa QUINOR, Ciclo 1992, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 1992.
 - ~ Una aproximación semiempírica aplicada al estudio teórico-experimental de la interfase electroquímica, IV Congreso Boliviano de Química, La Paz, Bolivia, 1993.
 - ~ Determinación de calores de formación molecular mediante un método de átomos equivalentes, II Conferencia Latinoamericana de Fisicoquímica Orgánica, Huerta Grande, Córdoba, 1993.
 - ~ Un nuevo método de factorización aplicado a la teoría de perturbaciones, XXI^e Congrès des Chimistes Théoricien d'Expression Latine (XXI CHITEL), Grenoble, France, 1993.
 - ~ Preparación y presentación de manuscritos científicos, Programa LADECOR, Facultad de Ciencias Exactas, Departamento de Química, UNLP, La Plata, 1993.
 - ~ Mitos y realidades vinculados a los conceptos de orbitales atómicos y moleculares, Pro-

- grama QUINOR, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 1993.
- ~ A factorization method with application to perturbation theory, US-Latin American Workshop on Molecular and Material Sciences: Theoretical and Computational Aspects, University of Florida, Gainesville, Florida, USA, 1993.
 - ~ A simplified scheme to calculate enthalpies of formation from an equivalent atoms procedure, Laboratoire de Chimie Physique, Université Pierre et Marie Curie (Paris VI), Paris, France, 1993.
 - ~ Cálculo de calores de formación por medio de un esquema simplificado de átomos equivalentes, Laboratorio de Química Cuántica, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, España, 1993.
 - ~ La electroquímica desde un punto de vista teórico semiempírico, Departamento de Química Física, Universidad de Valladolid, Valladolid, España, 1993.
 - ~ Thematic Maps: A synthesis of Mind Maps and Concept Maps, King's College Centre for Educational Studies, London, England, 1993.
 - ~ El Reduccionismo en la Química, I Jornadas de Especialistas en Enseñanza de la Química, Facultad de Odontología, Universidad Nacional de Rosario, Rosario, Santa Fé, 1993.
 - ~ Cálculo simplificado de propiedades termodinámicas a partir de métodos ab-initio de determinación de las estructuras electrónicas, I Spring Workshop on Quantum Chemistry, Cátedra de Química Cuántica, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay, 1993.
 - ~ A semiempirical approach to the electrochemical phenomena, US-Latin American Workshop on the Molecular and Material Sciences: Theoretical and Computational Aspects, Quantum Theory Project, University Florida, Gainesville, Florida, USA, 1994.
 - ~ Aproximación teórico-experimental al estudio de la interfase electroquímica, Seminarios CEQUINOR, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 11/4/94.
 - ~ Química Teórica: Un desafío a la imaginación y la apertura de nuevas posibilidades en el desarrollo y la aplicación de la Química, idem, 1/12/94.
 - ~ El accionar y la proyección internacional de la Asociación Química Argentina, idem, 2/12/94.
 - ~ Ponente de la Mesa Redonda: "Planificación y Descripción del Conocimiento Básico" sobre el tema "Escribir sobre Química para Aprender Química" en las II Jornadas en Enseñanza Universitaria de la Química, Facultad de Farmacia y Bioquímica, Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires, 27-29/4/95.
 - ~ Estimación semiempírica de entalpías de formación, Reunión sobre "Estructura Molecular y Teoría de Colisiones", Departamento de Física, FCEN, UBA, 23-24/5/95.
 - ~ Ciencia versus anticiencia o Cómo aprendí qué es la Nueva Izquierda, CEQUINOR, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 11/9/95.
 - ~ Las carreras de Química, Bioquímica y Farmacia, Reunión Informativa, Secretaria de Asuntos Estudiantiles, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 23/10/95.
 - ~ Theoretical study of inclusion complexes of cyclodextrins, US-Latin American Workshop on Molecular and Materials Sciences: Theoretical and Computational Aspects", University of Florida, Gainesville, Florida, U.S.A., February 22 and 23, 1996.
 - ~ La filosofía de la ciencia y su proyección sobre la enseñanza-aprendizaje de la Química, Octava Reunión Nacional de Educadores en la Química (REQ VIII), Universidad Nacional de Rosario, Rosario, 14-18/10/96.

- ~ Estudios Teóricos de las Ciclodextrinas y sus Complejos de Inclusión, CEQUINOR, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 2/5/97.
- ~ Estudios Teóricos de los Complejos de Inclusión de las Ciclodextrinas, Reunión Nacional 1997 de la Asociación Física Argentina, Departamento de Física, Universidad Nacional de San Luis, 21-26/9/97.
- ~ La Alfabetización Científica del Ciudadano, Jornadas Científicas de la Facultad de Ciencias Exactas, Naturales y Agrimensura, Universidad Nacional del Nordeste, Corrientes, 29/9/97 al 3/10/97.
- ~ Introducción a la comunicación oral, CIDEPINT, La Plata, 10/10/97.
- ~ Las Desventuras de un Editor Científico, Jornadas de Celebración del X Aniversario del Anuario Latinoamericano de Educación en Química, Universidad Nacional de San Luis, 26-28/5/98.
- ~ Sociología de la Ciencia y la Tecnología: Porqué y Para qué?, Jornadas del 50 Aniversario del INIFTA, Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 19-20/10/98.
- ~ Recent Advances in the Theoretical Studies of Beta-Cyclodextrins and their Inclusion-Oclusion Complexes, International Meeting on Physical Chemistry Frontier Topics, INIFTA, November 2-6, 1998.
- ~ Elementos de Organización y Administración de Entidades sin Fines de Lucro de Cara al Siglo Veintiuno, CEQUINOR, 14/8/98.
- ~ Introducción a la Teoría QSPR, Reunión Nacional de Física 1998, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 20-25/9/98.
- ~ Expositor en la Mesa Redonda de las Jornadas Didácticas de la Química en las IV Jornadas Nacionales y I Internacionales de la Enseñanza Universitaria de la Química, Facultad de Bioquímica y Cs. Biológicas, Universidad Nacional del Litoral, 26-28/5/99.
- ~ Las Relaciones Estructura-Actividad y Estructura-Propiedad en el Estudio de Diversos Compuestos Químicos y el Problema del Tratamiento Adecuado de las Regresiones Matemáticas, CEQUINOR, Departamento de Química, Fac. Cs. Exactas, UNLP, 16/4/99.
- ~ An Improved QSAR Analysis of Toxicity of Saturated Alcohols, ACS Meeting on "Bridging the Gap Between Chemical Modeling and Engineering", American Chemical Society, Anaheim, California, USA, 22-24/3/99.
- ~ Theoretical Study on Complex Formation between Hydroxybutanoic Acid and Dimeric Hydroxybutanoic Acid with Cyclodextrins, USA-Latin American-Canada-Caribbean Workshop on Molecular and Materials Sciences: Theoretical and Computational Aspects, UNAM, Cuernavaca, México, 24-26/2/99.
- ~ QSPR Study of Boiling Points of Alkyl Alcohols via Improved Polynomial Relationships, Molecular Modelling 99, Bardou Conference Center, Brisbane, Queensland, Australia, 22-25 September, 1999.
- ~ The Scientific Mysticism, Working Conference VI On the Relationships Between the Sciences and Humanities, July 2-7, 2000, Universidad de Oriente, Cumaná, Venezuela, 2-7/7/00.
- ~ El Papel de las Sociedades sin Fines de Lucro en el Desarrollo Actual de la Química, XXIII Congreso Argentino de Química, Universidad Nacional del Nordeste, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, Corrientes, 11-13/9/00.
- ~ El Desarrollo de la Química en América Latina, XXIV Congreso Latinoamericano de Química y XXI Congreso Peruano de Química, Lima, Perú, 14-19/10/00.
- ~ Panelista de la mesa Redonda "La Química al Servicio de la Humanidad", Facultad de

- Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Belgrano, Buenos Aires, 18/5/01.
- ~ Panelista de la Mesa Redonda “Experiencias que Consideran a la Lectura y/o Escritura como Asignatura Incluida en el Plan de Estudios”, Jornadas de Intercambio de Experiencias “La Lectura y la Escritura como Prácticas Académicas Universitarias, UNLuján, 20-22/6/01, Luján, Buenos Aires.
 - ~ El Uso de los Mapas Temáticos en el Proceso de Enseñanza-Aprendizaje, CEQUINOR, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 12/4/02.
 - ~ La Aplicación de los Mapas Temáticos en la Enseñanza Polimodal, Jornadas de Perfeccionamiento Docente, NES Polimodal, Bernal, Bs. As., 2/7/02.
 - ~ Química: Carrera con Futuro?, Fundación Josefina Prats, Rosario, 18/10/02.
 - ~ La Mística Científica, Fundación CAFH, Delegación La Plata, La Plata, 14/9/02.
 - ~ El Aporte Innovador de la Química en la Constitución de una Sociedad Tecnológico Productiva, I Jornadas Nacionales de Producción, Ciencia y Tecnología para la Reindustrialización de Argentina, Grupo Buenos Aires, Hotel Savoy, 28-29/11/02.
 - ~ El Uso de los Descriptores Flexibles en la Teoría QSAR/QSPR, Departamento de Química Orgánica, FCEN, 2/4/03.
 - ~ La Empresa Virtual, Reunión sobre El Desarrollo de Tecnologías para la Valoración de los Desechos Agroindustriales, Subprograma Biomasa como Fuente de Productos Químicos y Energía, Subprograma IV-Red IV.F, CYTED, Buenos Aires, 28/3/03.
 - ~ Análisis del Chemistry Preprint Server, CEQUINOR, Fac. Cs. Exactas, UNLP, 5/6/03.
 - ~ Introducción a la Programación Neurolingüística, Fundación CAFH, Filial La Plata, La Plata, 24/5/03.
 - ~ La Carrera Ingeniería Industrial y el Proceso de Industrialización de la Argentina, Ponente de la Mesa Redonda organizada por el Centro de Estudiantes de Ingeniería, Facultad de Ingeniería, UNLP, 23/5/03.
 - ~ Aprender Juntos en el Hogar, en la Escuela y en la Vida, Colegio Polimodal NES, Bernal, 6/6/03.
 - ~ La Programación Neurolingüística, Academia Belgraniana de la República Argentina, Club Libanés, Buenos Aires, 7/7/03 (Introducción) y 4/8/03 (Taller).
 - ~ Aplicaciones de Simulaciones Computacionales al Estudio de Fenómenos Físicoquímicos XXV Congreso Argentino de Química, Universidad del Centro de la Provincia de Buenos Aires, 22-24 de Septiembre de 2004.
 - ~ Utilización de Algunos Métodos y Modelos Químico-Teóricos de Interés Físicoquímico, INIFTA, 6/5/04.
 - ~ En Busca de la Excelencia a Través de la Programación Neurolingüística, Colegio Nacional de La Plata, Universidad Nacional de La Plata, 26/5/04.
 - ~ El Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), II Jornadas de Ciencia y Técnica de la Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 1-3/9/04.
 - ~ Existir o no Existir?: Esa es la Cuestión Vinculada a los Orbitales, IV Jornadas Internacionales para la Enseñanza Preuniversitaria y Universitaria de la Química, Mérida, Yucatán, México, 15-18/11/05.
 - ~ Los Orbitales Moleculares: Realidad o Ficción?, Seminario de CEQUINOR, Fac. Cs. Exactas, UNLP, 6/6/05.
 - ~ Participante de la Mesa Redonda y Debate sobre “Investigación Científica”, en la Jornada de Reflexión sobre Ciencia y Tecnología, Universidad Nacional de La Plata, 11/8/05.
 - ~ Expositor en la Mesa Redonda sobre el tema “La Evaluación Científica” en la Reunión

- Anual de la AFA 2005, 29/9/05, Departamento de Física, UNLP, La Plata.
- ~ El Ceremonial y el Orden Natural, Ciclo de Conferencias Magistrales “Manuel Belgrano, sus Ideas y su Tiempo, Tradiciones, Doctrina y Crónicas”, Club Libanés, Buenos Aires, 2/11/05.
 - ~ Leadership and Literature in the Knowledge Age, The VIII Working Conference on the Relations Between the Humanities and Science, October 17-21, 2005, Mexico City, Mexico, The OMETECA Institute and Universidad Autónoma Metropolitana.
 - ~ El Estado Actual de la Química en la Argentina, XXVII Congreso Latinoamericano de Química (XVII CLAQ), La Habana, Cuba, 2006.
 - ~ El Liderazgo: Arte y Ciencia del Comportamiento Humano, Academia Belgraniana de la República Argentina, 6/6/06, Círculo de Oficiales de las Fuerzas Armadas, Buenos Aires.
 - ~ Técnicas de Comunicación en Ciencia y Tecnología. El Problema del Nerviosismo en la Comunicación Oral, Facultad de Farmacia y Bioquímica, Universidad de Buenos Aires, 14/6/06.
 - ~ La Incorporación de Estudiantes del Nivel Secundario de Educación a los Equipos de Investigación, Reunión Internacional ICUC-PIEQ XV de Educación Química para el Desarrollo Sustentable, Universidad Nacional de San Luis, San Luis, Argentina, 26-28/10/06.
 - ~ Fútbol y Ciencia, IV Semana Nacional de Ciencia y Tecnología, SECyT-CONICET, Club Atlético River Plate, Buenos Aires, 12/6/06.
 - ~ La Importancia de la Comunicación Oral y Escrita en el Desempeño Profesional del Ingeniero, Centro de Ingenieros, La Plata, 28/9/06.
 - ~ El logro de la excelencia en el desempeño personal. Utopía inalcanzable o posibilidad cierta? Una breve introducción a la Programación Neurolingüística, INIFTA, 2007.
 - ~ CONICET en el Sistema Científico Argentino. Estrategias, Políticas y Cambio de Cultura Institucional, E. A. Castro, INIFTA, 13/4/07.
 - ~ ¿Qué es lo que le da vigencia a las ideas perdurables?, Ciclo de Conferencias Magistrales “Historia de las Ideas. Ceremonial y Honores”, Academia Belgraniana de la República Argentina, Centro de Oficiales de las Fuerzas Armadas (COFA), Salón San Martín, 31/8/07.
 - ~ El Desempeño del CONICET en el Ámbito de la Ciencia y la Técnica de la Argentina, I Congreso de Ingeniería Industrial, Universidad Nacional de La Matanza, La Matanza, Buenos Aires, 1-2/11/07.
 - ~ El Quehacer del CONICET en el Sistema Científico Argentino, Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis, San Luis, 3/10/07.
 - ~ Encuentro con hombre y mujeres notables, Asociación Química Argentina, 9/11/07.
 - ~ Hacia una cultura evaluativa organizacional, grupal e individual. El sistema de evaluación en Educación y en Ciencia y Técnica, INIFTA, 11/04/08.
 - ~ El CONICET en el Sistema Científico y Educativo Argentino. Estrategias, Políticas y Cambios Actuales de Cultura Institucional, E. A. Castro, Olavarría, 21/05/08.
 - ~ Algunos Métodos post-Hartree-Fock de Cálculo de Estructuras Electrónicas Moleculares, V Encuentro Nacional de Investigadores en Temáticas Relacionadas con Sustancias Peroxídicas (5° ENISP), Facultad de Ingeniería, UNCPBA, Olavarría, Buenos Aires, 23-24/10/08).
 - ~ El empleo de la Teoría del Ordenamiento Parcial en los estudios QSAR-QSPR, V Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (V QUITEL), San Andrés, Colombia, 18-22/09/09.

- ~ A personal perspective on scientific research, Chemistry Department, West University of Timisoara, Timisoara, Romania, 10/06/09.
- ~ From virial theorems to food chemistry: A long scientific journey along 40 years, II Mathematical Chemistry Workshop of the Americas, Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia, 19-24/07/10.
- ~ La Oratoria como disciplina de convergencia, XI Conference/Working Session: Relations between the Humanities and the Sciences in the Hispanic World, University of Wyoming, Laramie, WY 82071-3603, 36-30 July, 2010.
- ~ De los teoremas hiperviriales a la Química de los Alimentos: Una larga jornada de más de 50 años, Actualidad en Física de Partículas, Cosmología y Mecánica Cuántica, Homenaje a Héctor Vucetich, Fac. Cs. Astronómicas y Geofísicas de La Plata, 1-3/11/10.

MIEMBRO DE SOCIEDADES CIENTÍFICAS

- Socio Fundador de la Sociedad Argentina de Investigación Fisicoquímica, 1978.
- Miembro de la Comisión Directiva de la Sociedad Argentina de Investigación Fisicoquímica en el cargo de Secretario, 1978-1982.
- Socio de la Sociedad Científica Argentina.
- Miembro de la Comisión Directiva de la Asociación Química Argentina, desde 1984 y continúa. Entre los años 1996 y 1998 se desempeñó como Secretario y en 31/10/00 fue electo Presidente. Re-electo el 31/10/02 por otros dos períodos de dos años.
- Miembro de la Sociedad Internacional de Química Física Teórica (ISTCP).
- Componente de las Divisiones de Fisicoquímica, Química Teórica, Informática, del Interior y Enseñanza de la Asociación Química Argentina.
- International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) Affiliate Membership.
- Miembro de la Comisión Directiva de la Filial La Plata de la Asociación Química Argentina en el cargo de Secretario.
- Miembro de la Comisión Promotora para formular un Anteproyecto de Reglamento de la Asociación Nacional de Docentes en Química, 1983.
- Regular Fellow de la American Physics Society a partir de 1993.
- Miembro de la International Society for Mathematical Chemistry.
- Miembro de la World Association of Theoretical Organic Chemists (WATOC).
- Miembro de la Junta Directiva de la Sociedad Científica Argentina desde 1987 hasta 2000 y desde el año 2007, continuando hasta el presente. Entre el 1/5/95 al 30/4/96 se desempeñó como Secretario de la misma. A partir de ese año se desempeña como Vice-Presidente Segundo hasta el 2000. A partir del año 2009 es designado Vicepresidente Primero.
- Miembro de la Asociación de Químicos Teóricos de Expresión Latina.
- Miembro de la Asociación de Profesores-Investigadores en Didáctica de las Ciencias Experimentales, Granada, España, a partir de 1998.
- Miembro de la División of Chemical Education de la American Chemical Society, USA.
- Miembro de la American Association for the Advancement of Science (AAAS), Washington, U. S. A., a partir de 1997.
- Miembro de la American Association of Physics Teachers, U. S. A.
- Miembro de la New York Academy of Sciences, New York, U. S. A., a partir de 1997.
- Miembro de la European Science Education Research Association, England.

- Miembro de la Asociación de Educadores en la Química de la República Argentina a partir del año 1996.
- Honorary Member del International Biographical Centre, Advisory Council, desde el 23/7/99.
- Miembro de la American Educational Research Association (AERA), a partir de 1998.
- Miembro de la American Chemical Society, a partir del 1/2/99.
- Miembro del Consejo Argentino de Artes, Ciencias y Letras (AERA), Asociación de los Premios Nacionales de Artes, Ciencias y Letras, a partir del 1/5/99.
- Miembro de la QSAR and Modelling Society, USA, a partir del año 1999.
- Miembro del Centro de Estudios y Actividades para una Cultura de la Paz, Universidad Nacional de Río Cuarto, Córdoba, a partir del 1-11-99.
- Fellow de la Indian Chemical Society, Calcutta, India, a partir del año 2000.
- Académico de Número de la Academia Belgraniana de la República Argentina, a partir del 22/7/02.
- Honorary Member of the International Biographical Centre, Research Council, Theoretical Chemistry Area, International Biographical Centre, Cambridge, UK, desde marzo 2003.
- Vicepresidente Segundo de la Academia Belgraniana de la República Argentina, 2004-2005.
- Full Member de la European Society of Computational Methods in Sciences and Engineering (ESCMSE), Athens, Greece, a partir del año 2004.
- Miembro del Advisory Committee Members de la IUPAC, a partir del año 2000.
- Miembro Fundador de la Academia Internacional del Ceremonial, Buenos Aires, 6/8/05.
- Socio Adherente de la Asociación Argentina de Energía Eólica, Integrante de la WWEA World Wind Energy Association, a partir del 1/2/06.
- IUPAC Fellow a partir del 23/2/06.
- Miembro del WSEAS Working Group on Computers (www.wseas.org) a partir del 1/5/06.
- Member of the International Digital Organization for Scientific Information (IDOSI- www.idosi.org), a partir del 27/7/06.
- Miembro de la Mesa Directiva de la Academia Belgraniana de la República Argentina, con el cargo de Pro-tesorero, a partir del 1/3/05.
- Member of the American-Eurasian Network for Scientific Information, a partir del 27/07/07.
- Member of the Insciences, <http://insciences.org> online community, a partir del 01/12/08.
- Socio fundador del Instituto de Energía Renovables y Ambiente (IERA), Sociedad Científica Argentina, Agosto 2009.
- Socio Fundador de la Red de Sociedades Científicas Argentinas (RESCA) y designado Presidente del Consejo Directivo de la misma a partir del 22/09/09.
- Miembro del Consejo Directivo del Instituto Petroquímico Argentino (IPA), a partir del 15/12/09 y continúa.
- Miembro del Proyecto Study of Open Access Publishing (Project SOAP), a partir del 13/5/10.
- Member of the Research Cooperative for Researchers, Science Writers, Research Editors, Translators and Publishers, http://cooperative.ning.com/profile/EduardoAlbertoCASTRO?xg_source=profiles_featuresList, desde el 1/12/2009.

CARGOS TÉCNICOS EN LA ACTIVIDAD PRIVADA

- Químico Analista, Compañía Química, 1960 - 1961.
- Químico Analista, Duperial, 1961 – 1962.
- Químico Analista, Cristalux S.A., 1965.

ASESORÍAS CIENTÍFICAS Y EDUCATIVAS

- Miembro de la Comisión Asesora de Ciencias Químicas de la Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires, 1984-1987.
- Asesor Científico del Área de Ciencias Físicas y Matemáticas de la Comisión Asesora de Investigación Científica y Técnica (CAICYT) del Ministerio de Educación y Ciencias, Madrid, España, desde 1984.
- Asesor Científico para evaluar Proyectos de Investigación de la SUBCYT, CIC y CONICET, Argentina.
- Asesor Científico para evaluar Proyectos de Investigación de la Pontificia Universidad Católica de Chile, Dirección de Investigación, Santiago, Chile.
- Coordinating Officer entre las Escuelas Latinoamericanas de Química Teórica y el Florida-Latin American Exchange Project, University of Florida, USA.
- Miembro de Comisiones Asesoras como miembro titular y suplente de varias Universidades Nacionales de la República Argentina para concursos de personal docente.
- Miembro del Advisory Latin American Committee for the Florida-Latin American Exchange Project in the Quantum Sciences, University of Florida, USA.
- Asesor Científico de la Dirección General Académica y Estudiantil, Departamento de Investigación y Biblioteca, Universidad de Chile, Santiago, Chile.
- Asesor Científico del Fondo Nacional de Desarrollo Científico y Tecnológico, Consejos Superiores, Santiago, Chile.
- Miembro del Consejo Directivo Regional Provisorio del Proyecto PNUD-IUPAC-UNESCO.
- Miembro de la Comisión de Enlace del Seminario sobre "Metodología, Actualización y Perfeccionamiento para Profesores de Química", IUPAC-AQA.
- Representante del Departamento de Química de la Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, en la Comisión de Investigaciones Científicas.
- Miembro de la Comisión de Trabajo del Proyecto de Cooperación Petroleum Research Fund American Chemical Society-Asociación Química Argentina para diseñar un programa de Becas Externas, AQA, 1988.
- Representante del Departamento de Química de la Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, en la Comisión de Biblioteca, 1988, 1995.
- Coordinador de la Experiencia Piloto de Orientación Académica, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 1988.
- Miembro del Comité Científico del XIX Congreso Latinoamericano de Química, Buenos Aires, 1990.
- Coordinador del Régimen de Tutorías del Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, durante el ciclo lectivo 1990.
- Miembro de la Comisión de Biblioteca del INIFTA, La Plata, entre 1975 y 1992.
- Coordinador de la Comisión de Biblioteca del INIFTA, por designación del Consejo

- Científico Asesor de dicho instituto, 1989-1992.
- Evaluador de la Vicerrectoría de Investigación de la Universidad de Costa Rica, Unidad de Estudios, San José, Costa Rica.
 - Miembro del Comité de Honor del XIX Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Roma, Italia, 1990.
 - Miembro del Jurado para discernir el Premio Dr. Rafael Labriola 1991 de la Asociación Química Argentina. Idem 1993 y 1995.
 - Evaluador Científico de la Secretaría de Ciencia y Tecnología de la Universidad de Buenos Aires. Idem Universidad Nacional de Mar del Plata.
 - Asesor Científico de la Universidad Nacional de Colombia (COLCIENCIAS) para evaluar Proyectos de Investigación Química.
 - Miembro del Comité de Honor del XX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Mérida, Venezuela, 1992.
 - Miembro de la Comisión Calificadora del Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas (IVIC) para evaluar y promover al personal científico de esta institución dentro del escalafón previsto en el Reglamento del Personal, Caracas, Venezuela.
 - Miembro del Jurado para discernir el Premio Herrero Ducloux 1992 de la Asociación Química Argentina. Idem 1996. Idem 1998.
 - Asesor Científico de la Fundación ANTORCHAS, Buenos Aires, Argentina.
 - Asesor Científico del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Tecnológicas (CONICIT) de Venezuela, para evaluar proyectos presentados al Programa de Nuevas Tecnologías, 1993.
 - Asesor Científico de la Secretaría de Ciencia y Tecnología, Universidad Nacional de Catamarca, para evaluar Proyectos de Investigación y Desarrollo.
 - Miembro de la Comisión Especial Asesora del Premio Bunge & Born 1994 - Química, Fundación Bunge & Born, Buenos Aires.
 - Asesor Científico de la International Science Foundation, Washington, D.C., USA, para evaluar Programas de Apoyo a las Ciencias Básicas en la ex-Unión Soviética y Estados Bálticos, por el período 1993-1994.
 - Miembro del Comité de Honor del XXI Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Grenoble, Francia, 1993.
 - Seleccionado como Juez-Experto para evaluar Proyectos de Investigación presentados ante la Secretaría de Ciencia y Técnica de la Universidad Nacional de San Luis para participar del Programa de Incentivos a la Investigación en las Universidades Nacionales Argentina, según lo dispuesto por el Ministerio de Educación de la Nación.
 - Participante del Science-By-Mail Program, Museum of Science, Science Park, Boston, Massachusetts, USA, en carácter de Volunteer Scientist and Tracking Scientist, entre 1993 y 1998.
 - Miembro del Jurado designado para discernir el otorgamiento de las Becas ANTORCHAS para las Ciencias y las Humanidades entre 1993 y 1997.
 - Miembro del Grupo de Especialistas Universitarios en la Enseñanza de la Química, División Enseñanza de la Química, Asociación Química Argentina, a partir de 1994 y continúa.
 - Participante de la Reunión de Trabajo del Ente Coordinador de Unidades Académicas de Farmacia y Bioquímica (ECUAFYB) destinada a redactar los Contenidos Mínimos Recomendados para la sub-área de la Química dentro de las Carreras de Farmacia y Bioquímica, Facultad de Farmacia y Bioquímica, Universidad de Buenos Aires, 27-

29/4/95.

- Presidente de la Comisión de Publicaciones de la Sociedad Científica Argentina, entre 1993 y 2000.
- Asesor Científico de la Secretaría General de Ciencia y Técnica de la Universidad Nacional del Nordeste, Corrientes, Argentina, para evaluar académicamente proyectos de investigación científica en el área de las Ciencias Químicas.
- Miembro del Jurado para discernir el Premio Sociedad Científica Argentina, Año 1995, Especialidad Astronomía.
- Participante en carácter de Member Volunteer del programa ACS Public Outreach, American Chemical Society, Washington, USA, 1995.
- Asesor científico-académico de la Comisión Central de Evaluación Académica de la Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile, 1995.
- Coordinador del Proyecto de Tutorías 1996, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata.
- Juez-Experto para evaluar proyectos de investigación de la Universidad Nacional de La Plata, Secretaría de Ciencia y Técnica, UNLP, 1995.
- Asesor científico-académico del Ministerio de Educación de la Nación (Argentina) para evaluar proyectos de acreditación de programas de post-gradados universitarios.
- Miembro del Consejo Científico del Centro QUINOR (CEQUINOR) como representante del claustro de profesores e investigadores, entre el 1/3/96 y el 30/9/96.
- Miembro del Comité de Honor del XXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Cáceres, España, 16-20/9/96.
- Director del Ateneo de Química, Asociación Química Argentina, 1996.
- Asesor del Consejo de Investigación de la Universidad Nacional de Salta para evaluar Proyectos de Investigación, Año 1996.
- Asesor Científico de la Universidad de Belgrano, Buenos Aires, Argentina, a partir del año 1996.
- Representante de la Asociación Química Argentina en la Firma del Convenio Constitutivo del Centro de Investigación y Desarrollo en Química y Petroquímica (CEQUIPE), Instituto Nacional de Tecnología Industrial, Buenos Aires, 25 de agosto de 1997.
- Miembro de la Comisión de Promoción de la Química, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, a partir del 16/9/97.
- Secretario del Jurado Académico para discernir el otorgamiento del Premio Sociedad Científica Argentina, Especialidad Química, Año 1997.
- Presidente de la Junta Comicial de la Asociación Química Argentina en el Acto Eleccionario Regular del año 1997, Buenos Aires, 31/10/97.
- Miembro del Jurado encargado de discernir los Premios de Estímulo al Estudio e Investigación Científica, Especialidad Química, otorgado por la Sociedad Científica Argentina, 1998.
- Evaluador de Proyectos de Investigación de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT), Secretaría de Ciencia y Técnica, Buenos Aires, a partir del año 1998, en las áreas de Química, Tecnología y Ciencias Biológicas.
- Evaluador de Antecedentes Académicos y Proyectos de Investigación presentados a la John Simon Guggenheim Memorial Foundation, New York, U.S.A., 1998.
- Integrante del Banco de Evaluadores del Programa de Incentivos, Comisión Nacional de Categorizaciones Consejo Inter-universitario Nacional, Ministerio de Educación, Argentina, 1998.

- Miembro Asesor Internacional de la Comisión Permanente de Investigación en la Propia Práctica Docente, Facultad de Ciencias Humanas, Universidad Nacional de San Luis, a partir del 27/2/98.
- Representante argentino al QUITEL 98 (Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina Año 1998, como miembro del Comité Científico, Puebla, México, 20-25/9/98.
- Miembro del International Biographical Centre Advisory Council, Cambridge, England, a partir del mes de junio de 1999.
- Director de la Biblioteca de la Sociedad Científica Argentina, entre el 17/8/99 y 1/5/00.
- Director de la Comisión de Cursos y de la Comisión de Premios y Reconocimientos de la Sociedad Científica Argentina, 1999-2001.
- Miembro Individual Fundador del Consejo Académico de Etica en Medicina de la Academia Nacional de Medicina, Buenos Aires, a partir del 5/11/99.
- Evaluador FONCYT, Secretaría de Ciencia y Tecnología, Ministerio de Educación de la Nación, Área de Ciencias Biológicas, 1999-2000.
- Representante argentino designado por la Asociación Química Argentina a la ACS Pan-American Conference, San Juan, Puerto Rico, June 29 - July 3, 2000.
- Presidente de la Asociación Química Argentina, entre el 31/10/00 y el 30/10/06.
- Autoridad Titular en la Elección de Consejeros representantes del Claustro de Profesores, Facultad de Ingeniería, UNLP, 29/11/00.
- Miembro Titular como Presidente de la AQA de todos los Jurados que entienden en el otorgamiento de Premios de esa asociación desde Octubre 2000 al 31/10/07.
- Designado Evaluador Extra-Regional de las Jornadas Regionales del NOA para la Evaluación de Informes del Programa de Incentivos, Horco-Molle, Tucumán, 25-26/4/01.
- Evaluador Científico del Ministerio de Educación de Brasil, Brasilia, Junio de 2001.
- Miembro del Comité de Selección de la Beca Interna EGD Dr. César Ambrosio Tognoni, Rotary Club de Buenos Aires, 18/7/01.
- Presidente de la Comisión Asesora “ad-hoc” del CONICET para evaluar los pedidos de ingresos a la Carrera del Investigador Científico y Tecnológico, 2001.
- Miembro del The Science Advisory Board, a partir del 1/4/02.
- Presidente de la Comisión Asesora de Ciencias Químicas del CONICET, entre el 15/7/02 y el 30/6/03, por Resolución D No 1025.
- Miembro Titular de la Comisión Asesora de Gran Área del Conocimiento de Ciencias Exactas y Naturales, CONICET, Resolución D No. 1249 del 16/8/02.
- Miembro del Jurado designado para discernir en el Concurso de Becas para la Realización de Pasantías convocado por la Red Latinoamericana de Química (RELACQ), 2002.
- Miembro del Banco de Evaluadores de la Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis, a partir del mes de agosto de 2002 y continúa.
- Miembro del Banco de Evaluadores de la Comisión Nacional de Evaluación y Acreditación Universitaria (CONEAU), Ministerio de Educación, Argentina, a partir de 1998.
- Member of the Research Council of the International Biographical Centre, Cambridge, England from December 2002.
- Evaluador de Proyectos de Investigación, Programación UBACYT 2001-2002, Secretaría de Ciencia y Técnica, Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires.
- Miembro de la Comisión Ad-Hoc Superior del CONICET, designado por Resol. D N° 2147 del Directorio del CONICET, 13/12/02.

- Evaluador de Proyectos de Investigación, Dirección de Programas y Proyectos, Secretaría de Ciencia y Técnica, Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco, desde 2002 y continúa.
- Presidente de la Comisión de Ciencia de la Academia Belgraniana de la República Argentina, designado el 5/5/03 y continúa.
- Miembro Titular de la Comisión Asesora por Disciplina de Ciencias Químicas, por el período julio 2003-junio 2004 según Resolución D No. 960/03.
- Asesor Científico del CONICYT, Secretaría de Ciencia y Tecnología, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay, Octubre 2003.
- Evaluador de Proyectos de Investigación de las áreas 10. Tecnología Energética y Minera y 12. Tecnología Mecánica y de Materiales del Fondo para la Investigación Científica y Tecnológica (FONCyT) de la República Argentina, Octubre 2003.
- Revisor de trabajos de investigación presentados en The Seventh International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry, 2003.
- Miembro del The Science Advisory Board para estudiar versiones impresas de catálogos de Ciencias de la Vida.
- Asesor Legislativo del Parlamento Nacional, Buenos Aires, a partir del 1/4/03.
- Miembro de las Comisiones Ad-Hoc para evaluar las promociones a Investigador Superior del CONICET como Asesor del Gran Área de Ciencias Exactas, Mayo 2004. Ídem Septiembre 2009.
- Miembro del Banco de Evaluadores de la Fundación Argentina para la Evaluación y Acreditación Universitaria (FAPEYAU), a partir del mes de noviembre de 2004.
- Evaluador de Proyectos de Investigación de la Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Resistencia, 2004.
- Coordinador de Autoevaluación de Ingeniería Industrial, Departamento de Ingeniería de la Producción, Facultad de Ingeniería, UNLP, designado el 9/6/05.
- Member of the Advisory Board of the Department of Chemistry, St. Berchmans' College, Mahatma Gandhi University, Changanacherry 686101, Kerala, India, a partir del año 2005.
- Director de Carrera de Ingeniería Industrial, Facultad de Ingeniería, UNLP, entre 1/6/05 y 15/07/10.
- Miembro de la Comisión Central de Seguimiento, Evaluación y Adecuación Curricular de la Facultad de Ingeniería, UNLP, a partir del 1/6/05 y continúa.
- Evaluador de Proyectos de Investigación y Vinculación Tecnológica de la Universidad Argentina John F. Kennedy, a partir del 28/9/05 y continúa.
- Evaluador de comunicaciones científicas presentadas en el Workshop on Computational Chemistry and its Applications, 2006.
- Miembro Titular de la Comisión Interdisciplinaria Especial Ad-Hoc, en representación del Gran Área de Ciencias Exactas y Naturales del CONICET, por Resolución D No. 1574, 25/7/06. Designado Coordinador de esta Comisión. Ídem año 2007, Resolución D. No. 954 (2-2-06), Anexo I. Ídem año 2009.
- Evaluador de Proyectos de Investigación del Departamento de Química, de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad Nacional de Catamarca, en el Área de la Historia y Epistemología de la Química, Septiembre de 2006.
- Miembro Titular de la Junta de Calificaciones del CONICET, a partir del 1/1/07.
- Miembro de la Comisión Ad-Hoc de Superior, CONICET, Resolución D No.2 del 4/1/07.
- Miembro de la Comisión Asesora de Gran Área del Conocimiento de Ciencias Exactas y

Naturales del CONICET, desempeñando el cargo de Coordinador de la misma, Resolución D No. 1310 del 08/06/07. Ídem año 2008 y 2009 (Resolución D No. 648 del 06/04/09).

- Miembro del Jurado para discernir el otorgamiento del Premio APTA (Asociación de Prensa y Técnica Especializada) Rizzuto 2007, en representación de la SCA, 13/09/07. Ídem 2008, 30/10/08.
- Evaluador de la Programación UBACYT 2008-2010, Secretaría de Ciencia y Técnica de la UBA.
- Designado Coordinador Alternativo de la Junta de Calificaciones del CONICET durante el año 2008.
- Designado Coordinador de la Junta de Calificaciones del CONICET, año 2009.
- Evaluador de Proyectos de Investigación de la Universidad Nacional de Colombia, Vicerrectoría de Investigación, Dirección de Investigación Sede Bogotá, 22/02/08.
- Miembro de la Comisión de Autoevaluación para el Proceso de Acreditación de las Carreras de Ingeniería, Facultad de Ingeniería, UNLP, XI Sesión Ordinaria del HCA, 20/06/08.
- Participación en la etapa de trabajo de campo del proyecto “LA PARTICIPACIÓN DE PARES ACADÉMICOS EN EL SISTEMA NACIONAL DE EVALUACIÓN Y ACREDITACIÓN UNIVERSITARIA EN ARGENTINA” llevado a cabo por la Universidad Nacional de General Sarmiento, 2007.
- Evaluador de Proyectos de Investigación y Desarrollo del Programa CYTED, DNRRII – MINCYT, 2009 y 2010.
- Miembro de la Comisión de Autoevaluación de Ingeniería en Agrimensura, designado el 29/04/09 por el HCA de la Facultad de Ingeniería, UNLP, La Plata, Argentina.
- Miembro de la Comisión Directiva con el cargo de Vocal Titular del Instituto de Energías Renovables y Ambiente (IERA) a partir del mes de agosto de 2009 y continúa.
- Evaluador de Proyectos de Investigación subsidiados por la Secretaría de Ciencia y Técnica de la Universidad Nacional de Río Cuarto, 2009.
- Miembro de la Comisión Especial de Preparación Docente, Área Departamental Producción, Facultad de Ingeniería, UNP, Resolución No. 18, 2009, del HCA, para tratar el caso del Ing. J. L. San Martín.
- Miembro de la Comisión Ad-Hoc de Superior del CONICET, Resolución D N° 2652/09 de fecha 9/9/09.
- Miembro de las Comisiones Evaluadoras de Categorización en la IV Convocatoria de Categorización del Programa de Incentivos a los Docentes-Investigadores de la Regional Sur, Universidad Nacional de la Patagonia Austral, El Calafate, Santa Cruz, 31/5 al 4/6/10.
- Miembro de la Research Cooperative (researchers, editors, translators, illustrators, and publishers), Kyoto, Japan, a partir del 1/2/10, research.co-op@medlist.co.uk.
- Evaluador Experto Externo de proyectos de investigación presentados en la Universidad Nacional del Chaco Austral, a partir del 11/03/10.
- Director del Instituto de Cursos y Conferencias, Sociedad Científica Argentina, a partir del 1-10-2009.
- Evaluador del Programa IASTE, Dirección de Relaciones Internacionales, MINCYT. 2009.
- Miembro de jurados de concursos docentes en la Universidad Nacional de Río Negro, Patagonia, Argentina, año 2010.

- Evaluador de trabajos presentados en el Encuentro Binacional de Jóvenes Investigadores, 2010, Secretaría de Ciencia y Técnica, Universidad Nacional de la Patagonia Austral.
- Miembro del Comité Evaluador de la V European Conference on Innovation and Entrepreneurship (ECIE 2010), ídem ECIE 2011, Robert Gordon University, Aberdeen, Scotland, UK, 15-16 September 2011.
- Evaluador de las propuestas elevadas al CYTED, Convocatoria 2011.
- Miembro Titular del Banco de Evaluadores Externos e Internos de la Universidad Nacional de Quilmes
- Member of the Programme Committee of the International Conference on Innovation and Entrepreneurship, Hashemite University of Amman, Jordan, 4-5 March 2013.

REPRESENTACIONES

- # Representante para América del Sur de los Químicos Teóricos de Expresión Latina, mediante la designación en el Comité Editorial de la Folia Chimica Theoretica Latina.
- # Representante Oficial de la Asociación Química Argentina al Congreso Iberoamericano de Química, Lima, Perú, 1983.
- # Representante Oficial de la Asociación Química Argentina a la III Reunión Nacional de Enseñanza de la Química, Universidad Nacional de San Luis, 1985.
- # Representante argentino por la UNLP en el Florida-Latin American Workshop in Quantum Chemistry, University of Florida, Gainesville, Florida, USA, 1986.
- # Miembro del Comité Asesor en carácter de representante argentino del Florida Quantum Theory Project-Latin American Exchange Project, Universidad de Florida, Gainesville, Florida, USA, 1986.
- # Representante de la Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires ante el Comité Editorial de la Revista Industria y Química de la Asociación Química Argentina.
- # Representante de la UNLP en el Latin American Workshop in Quantum Chemistry, University of Florida, Gainesville, Florida, USA, 1987.
- # Representante de la Asociación Química Argentina en el Proyecto PNUD/UNESCO/IUPAC, XVII Congreso Latinoamericano de Química, Bogotá, Colombia, 1986.
- # Representante de la Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, al ciclo de Conferencias Regionales de Defensa Nacional, Facultad de Humanidades, UNLP, 1981.
- # Coordinador del Proyecto “Cuidemos Nuestro Mundo”, Resolución #373/88/-CD de la Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis, 1988.
- # Miembro del Consejo Asesor Internacional en representación de la República Argentina del Proyecto Integral de Educación Química (PIEQ), Resolución #781-R de la Universidad Nacional de San Luis, San Luis, 1988.
- # National Representative of the World Association of Theoretical Organic Chemists, 1989.
- # Presidente de la Comisión del Interior de la Asociación Química Argentina, 1991 a 1996.
- # Coordinador de la Biblioteca de los Departamentos de Ciencias Biológicas y Químicas, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 1992 a 1994.
- # Director de Publicaciones de la Sociedad Científica Argentina, designado por la Junta Directiva a partir del 18/5/93 hasta el año 2000.
- # Representante del Departamento de Química de la Facultad de Ciencias Exactas, UNLP,

para formar parte de la Junta Electoral para las elecciones al Claustro de Graduados 1994 (28 y 29/4/94), según Expediente #700-42255/94.

- # Representante del Departamento de Química en la Comisión de Biblioteca, 1995-1996.
- # Coordinador del Programa Nacional de Formación y Capacitación Docente (PNFCD) del Ministerio de Cultura y Educación en el Área Química y Fisicoquímica del Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 1944-1995.
- # Representante del Dep. de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, a las Jornadas sobre formación docente, Fac. de Humanidades y C. de la Educación, UNLP, 7-8/3/95.
- # Representante del Departamento de Química en las reuniones informativas destinadas a Alumnos Secundarios y organizadas por la Secretaria de Asuntos Estudiantiles, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 23/10/95.
- # Miembro de la Comisión de Actividades Científicas y de Premios de la Sociedad Científica Argentina.
- # Organizador del Instituto Universitario de la Sociedad Científica Argentina, 1998.
- # Director del Programa de Cursos de la Asociación Química Argentina, 1998-1999.
- # Presidente de la Comisión de Actividades Científicas y Premios de la Sociedad Científica Argentina, a partir de Mayo de 1999.
- # Representante Nacional como Presidente de la AQA al ACS National Spring Meeting, San Diego, California, USA, April 2-4, 2001.
- # Miembro del Comité de Honor de las VI Jornadas Nacionales y III Internacionales de Enseñanza Universitaria de la Química, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, Septiembre 2003.
- # Representante argentino en el área de Ciencias Químicas al Seminario Internacional sobre el Intercambio Académico en áreas prioritarias en Brasil y Argentina, Canela, RS, Brasil, 18-19/4/02.
- # Miembro titular y Coordinador de la Comisión de Grados Académicos del Dpto. de Química, Fac. Cs. Exactas, UNLP, 2002-2005.
- # Miembro titular de la Comisión de Grados Académicos de la Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 2002-2005.
- # Miembro suplente del Consejo Asesor del Dpto. de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, períodos 2003-2004, 2004-2005 y 2006-2007.
- # Miembro Titular de la Comisión de las Unidades de Investigación de la Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, a partir del año 2003 y hasta el año 2005.
- # Miembro Titular de la Comisión Asesora Técnica del Departamento de Química de la Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, a partir de septiembre de 2004 y hasta 2006.
- # Miembro de la Comisión Especial de la Academia Belgraniana de la República Argentina fundadora del Instituto Superior de Ceremonial "Manuel Belgrano", 6/8/05.
- # Miembro de la Comisión Instructora de Juicio Académico de la Facultad de Ingeniería de la UNLP, como representante del claustro de Profesores, a partir del 20/07/07. Resolución No. 750 del 10/08/07.
- # Miembro de la Comisión Central de Seguimiento, Evaluación y Adecuación Curricular, Facultad de Ingeniería, UNLP, Resolución 552, como Comisión Especial del Honorable Consejo Académico, desde el 11/07/08 hasta el 31/03/09.
- # Miembro Coordinador de la Comisión Asesora de Estudios del Área La Plata del CCT-LP, a partir del 1-6-09 y hasta el 17/12/09.
- # Miembro de la Comisión Especial de Preparación Docente, Área Departamental

Producción, Facultad de Ingeniería, UNP, Resolución No. 18, 2009, del HCA, para tratar el caso del Ing. J. L. Sanmartín.

- # Prórroga a partir del 1 de setiembre de 2009 y por el término de un año la designación como Director de Carrera de Ingeniería Industrial perteneciente al Área Departamental Producción, Facultad de Ingeniería, UNLP, Resolución No.824 del 19/10/09.

VI - PUBLICACIONES

Incluido en el registro de los químicos más citados en el mundo durante el período 1981 – Junio de 1997 (10.858 científicos citados al menos 500 veces en este período en publicaciones internacionales con referato científico) dónde figuran sólo 9 químicos argentinos residentes en el país. La fuente de esta información es el Institute of Scientific Information (ISI), Philadelphia, MA, USA y este registro se puede consultar en las dos siguientes direcciones web: <http://www.cristyal.org/cit.html> (USA) y <http://fluo.univ-lemans.fr:8001/cit/html> (Francia).

Varios trabajos han sido incluidos en los rubros **20 Most Discussed Articles in Physical Chemistry** y **20 Most Viewed Articles in Physical Chemistry** del *Chemistry Preprint Server*.

Trabajos presentados en congresos

- 1) Propiedades de Convergencia del Método Omega-Beta-Variable, E. A. Castro, XII Congreso Latinoamericano de Química, Ecuador, 1976.
- 2) Método Iterativo Basado en el Teorema No-Diagonal del Hipervirial para Calcular Autofunciones y Autovalores, E. A. Castro, I Reunión Argentina de Fisicoquímica, La Plata, 1978, Actas p.283.
- 3) Cálculo Teórico de la Descomposición Unimolecular del Hipofluorito de Trifluorometilo, E. A. Castro, A. H. Jubert, XIII Congreso Latinoamericano de Química, Lima, Perú, 1978.
- 4) Derivación Tensorial del Operador Momento Angular, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem.
- 5) Análisis del Método Iterativo Basado en el Teorema No-Diagonal del Hipervirial para Calcular Autofunciones y Autovalores Asociados, F. M. Fernández, E. A. Castro, Reunión Nacional de Física, Córdoba, 1979, Actas p.32.
- 6) Método de Cálculo de Estructuras Electrónicas Moleculares de Hidrocarburos Saturados Mediante la Aplicación de la Propiedad de Transferibilidad de los Elementos de Matriz de Fock, E. A. Castro, F. M. Fernández, II Congreso Argentino de Fisicoquímica, Córdoba, 1980, Comunicación #97.
- 7) Escuela Latinoamericana de Química Teórica, INIFTA, La Plata, Argentina, 1981, E. A. Castro, J. Marañón, XIV Congreso Latinoamericano de Química, San José, Costa Rica, 1981.
- 8) Aplicación Variacional del Grupo de Transformaciones, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem.
- 9) El Empleo de la Computadora en la Enseñanza de la Química Teórica, E. A. Castro, F. M. Fernández, II Congreso Sobre Medios No Convencionales de Enseñanza, Universidad de Belgrano, Buenos Aires, 1980, Actas p.21.

- 10) Análisis Hipervirial de Sistemas Mecano-Cuánticos Acotados. I- Condiciones de Contorno de Dirichlet, F. M. Fernández, E. A. Castro, Reunión Nacional de Física 1980, Bariloche, Actas p. 67.
- 11) Análisis Hipervirial de Sistemas Mecano-Cuántico Acotados. II- Condiciones de Contorno de von Neumann y Potenciales Periódicos, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem, Actas p. 67.
- 12) Una Técnica Omega Biparamétrica para Cálculos con Orbitales Moleculares. III - Aromaticidad de Hidrocarburos Semibencenoides y No-Bencenoides, E. A. Castro, F. M. Fernández, II Congreso Argentino de Físicoquímica Orgánica, Villa Giardino, Córdoba, 1981, Actas p.9.
- 13) Estudio Teórico de la Formación y Descomposición de Radicales Aniones por Medio de los Métodos CNDO/2 e INDO, H. O. Villar, E. A. Castro, R. A. Rossi, ídem, Actas p.24.
- 14) Tratamiento Hipervirial de Osciladores Isotrópicos Multidimensionales Acotados, F. M. Fernández, E. A. Castro, Reunión Nacional de Física 1981, San Luis, Actas p.7.
- 15) Teoría de Perturbaciones Generalizada sin Función de Onda (GPTWWF), G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem, Actas p.7.
- 16) Expresiones Analíticas para los Autovalores de Sistemas Cuánticos Acotados, S. Maluendes, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem, Actas p.7.
- 17) Aplicación de la Técnica Omega Biparamétrica al Cálculo de Momentos Dipolares y Longitudes de Unión, D. J. Barbiric, E. A. Castro, F. M. Fernández, XVI Congreso Argentino de Química, Córdoba, 1982.
- 18) Cálculo de la Energía Electrónica de la Molécula H_2 a Partir de una Parametrización Obtenida para la Molécula-Ion Hidrógeno, O. G. Stradella, G. A. Arteca, E. A. Castro, ídem.
- 19) Cálculo de Susceptibilidades Diamagnéticas Atómicas por Medio del Método Estadístico de Thomas-Fermi-Amaldi, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem.
- 20) Un Test Extensivo de una Nueva Fórmula Aproximativa para la Determinación de Energías Electrónicas Moleculares, E. E. Ottavianelli, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem.
- 21) Análisis Numérico de las Propiedades de Convergencia de la Técnica Omega para el Cálculo de Orbitales Moleculares, D. J. Barbiric, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem.
- 22) Comparación de Energías Atómicas Totales por Ecuaciones del Tipo Thomas-Fermi, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, F. M. Fernández, XV Congreso Latinoamericano de Química, Puerto Rico, 1982.
- 23) Estudio Teórico de Algunos Aspectos de las Reacciones Químicas Donde Intervienen Radicales Aniones, H. O. Villar, E. A. Castro, R. A. Rossi, XVI Congreso Argentino de Química, Córdoba, 1982.
- 24) Utilización del Formalismo de la Segunda Cuantificación en la Enseñanza de la Química Cuántica, S. A. Maluendes, G. A. Arteca, E. A. Castro, F. M. Fernández, XVI Congreso Argentino de Química, Córdoba, 1982..
- 25) Empleo de Modelos Unidimensionales en la Enseñanza de la Química Cuántica, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem.
- 26) Hypervirial Theorems for Some Simple Quantum Chemistry Systems, F. M. Fernández, E. A. Castro, IV International Congress in Quantum Chemistry,

- Uppsala, Sweden, 1982.
- 27) La Noción de Complementariedad en la Enseñanza de la Química, E. A. Castro, E. Canestro, IV Congreso Sobre Medios No Convencionales de Enseñanza, Universidad de Belgrano, Buenos Aires, 1982.
 - 28) Cálculo de la Energía de Átomos Hidrogenoides en Campos Magnéticos Uniformes, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, Reunión Nacional de Física 1982, La Plata, Comunicación F8.5.
 - 29) Distribución de Cargas Electrónicas en Alcanos Simples, D. J. Barbiric, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem, Comunicación M15.2
 - 30) Introducción de la Variación de Z en el Cálculo de Energías y Susceptibilidades Diamagnéticas Atómicas por Medio de los Métodos de los Funcionales de la Densidad, M. C. Donnamaría, M. D. Glossman, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem, Comunicación A11.3.
 - 31) Determinación de Autovalores de Osciladores Anarmónicos Mediante un Procedimiento Variacional Sencillo, F. M. Fernández, G. A. Arteca, E. A. Castro, ídem, Comunicación F9.4.
 - 32) Tratamiento Perturbativo Hipervirial de Sistemas Periódicos Sometidos a Campos Externos, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem, Comunicación F8.4.
 - 33) Cálculo de los Autovalores y Autofunciones Asociados al Potencial de Interacción $x^2 + sx^2/(1+gx^2)$, A. M. Mesón, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem, Comunicación F9.3.
 - 34) Dos Fórmulas Analíticas Aproximativas para la Función de Partición del Oscilador de Morse, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem, Comunicación M14.3.
 - 35) Barreras Rotacionales y Constantes de Fuerza en el Formiato de Metilo y sus Derivados Fluorados. Un Estudio por el Método Semiempírico MNDO, A. H. Jubert, H. O. Villar, E. A. Castro, E. L. Varetti, ídem, Comunicación M13.2.
 - 36) El Método Perturbativo Hipervirial, F. M. Fernández, E. A. Castro, VII Congreso de Investigación Científica, San Juan, Puerto Rico, 1983.
 - 37) Una Prueba Numérica Extensiva para una Nueva Teoría de Thomas-Fermi, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem.
 - 38) Discusión Comparativa de Varias Aproximaciones Teóricas para Definir Radios Atómicos, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem.
 - 39) Análisis del Potencial Electroestático Nuclear y la Interacción Interelectrónica en Átomos e Iones, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem.
 - 40) The Chemist as a Writer of Science, E. A. Castro, F. M. Fernández, VII International Conference on Chemical Education, Montpellier, France, 1983.
 - 41) Curso de Actualización para Profesores de Enseñanza Media de la CIC. Algunas Nociones Fundamentales sobre la Naturaleza del Enlace Químico, E. A. Castro, C. M. Marschoff, I Reunión Nacional de Profesores de Metodología y Práctica de la Enseñanza de la Química (REMPEQ I), La Falda, Córdoba, 1983, Actas p.20.
 - 42) Estructura de un Curso Introductorio de Química Teórica, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem, Actas p.21.
 - 43) Estudio de la Teoría Cuántica de la Valencia y del Grado de Ligadura, J. A. Medrano, E. A. Castro, III Congreso Argentino de Fisicoquímica, INIFTA, La Plata, 1983.
 - 44) Estudio Conformacional por Métodos Semiempíricos y Ab-Initio de las Formas

- Isoméricas del N_2O_3 , A. H. Jubert, E. L. Varetti, H. O. Villar, E. A. Castro, ídem.
- 45) Aplicación de un Modelo Semiclásico a las Reacciones de Clivaje de Radicales Aniones Aromáticos, H. O. Villar, E. A. Castro, R. A. Rossi, ídem.
 - 46) Un Estudio de Campo de Reacciones Autoconsistente Sobre Mapas de Isopotencial Electroestático, H. O. Villar, E. A. Castro, ídem.
 - 47) Una Técnica Omega Biparamétrica Mejorada para el Cálculo de Orbitales Moleculares Considerando el Campo de Reacción, R. E. Cachau, H. O. Villar, E. A. Castro, ídem.
 - 48) Teoría de Perturbaciones sin Función de Onda para Sistemas Multidimensionales, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem.
 - 49) Autovalores de un Átomo de Hidrógeno en un Campo Magnético, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, III Congreso Argentino de Fisicoq., INIFTA, La Plata, 1983.
 - 50) Efecto Stark de un Rotor Rígido Dipolar, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem.
 - 51) Introducción de la Variación de Z en los Métodos Estadísticos de TF, TFA, TFD y TFDA para Iones, M. D. Glossman, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem.
 - 52) Energías de Interacción para Átomos de Gases Nobles Utilizando Funcionales de la Densidad, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem.
 - 53) Modelo de Cargas Efectivas para el Cálculo de Constantes de Fuerza de Valencia. Un Test Adicional, D. J. Barbiric, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem.
 - 54) Método de Coordenada Compleja Modificada para el Cálculo de Resonancias, A. M. Mesón, F. M. Fernández, E. A. Castro, A. Maltz, R. Rodríguez, ídem.
 - 55) Análisis Teórico de la Estructura de Anillos Sulfonitrogenados de Tres Miembros, O. G. Stradella, H. O. Villar, E. A. Castro, ídem.
 - 56) El Método Perturbativo Hipervirial (HPM) y las Condiciones de Aplicabilidad, F.M. Fernández, E. A. Castro, Congreso Iberoamericano de Ciencias Químicas, Lima, Perú, 1983, Actas p.25.
 - 57) Un Curso Sobre Preparación y Presentación de Manuscritos Científicos, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem, Actas p.132.
 - 58) Introducción de la Teoría de los Funcionales de la Densidad en los Cursos de Química Teórica, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem, Actas p.133.
 - 59) Análisis Teórico de la Estructura Electrónica de Anillos Sulfosforados de Tres Miembros, O. G. Stradella, H. O. Villar, E. A. Castro, ídem, Actas p.34.
 - 60) Las Escuelas Latinoamericanas de Química Teórica, E. A. Castro, ídem.
 - 61) Sobre la Transferibilidad de los Elementos de Matriz de Fock en el Método MNDO, D. J. Barbiric, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem, Actas p.19.
 - 62) Determinación de las Propiedades Termodinámicas a Partir de dos Nuevas Formulaciones Analíticas para la Función de Partición del Oscilador de Morse, M. D. Glossman, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem, Actas p.27.
 - 63) Aplicación de las Correcciones de Auto-Repulsión e Intercambio de una Nueva Solución de la Ecuación Variacional de Thomas-Fermi, M. D. Glossman, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem, Actas p.28.
 - 64) Un Nuevo Método Variacional Aplicado al Oscilador Anarmónico Cuártico, M. D. Glossman, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem, Actas p.30.
 - 65) Las Escuelas de Verano de Química Teórica en INIFTA, E. A. Castro, II Reunión

- Nacional de Educación en la Química (REMPEQ II), San Juan, 1984, Actas p.69.
- 66) La División Enseñanza de la Química de la Asociación Química Argentina, L. C. de Torre, E. A. Castro, ídem, Actas p.69.
 - 67) Aplicación de un Test Cognoscitivo para Alumnos Universitarios Avanzados, E. A. Castro, O. G. Stradella, ídem, Actas p.68.
 - 68) La Enseñanza de Orbitales Moleculares a Nivel Secundario, E. A. Castro, ídem, Actas p.68.
 - 69) Estudio Teórico de la Descomposición Térmica del S-Tetraoxociclohexano, H. O. Villar, E. A. Castro, XVI Congreso Latinoamericano de Química, Río de Janeiro, Brasil, 1984, Actas p.277.
 - 70) Análisis Teórico de la Estructura del S-Tetraoxociclohexano y S-Tetratiociclohexano, O. G. Stradella, H. O. Villar, E. A. Castro, ídem, Actas p.268.
 - 71) Potenciales Heteroatómicos y Funcionales de la Densidad, M. D. Glossman, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem, Actas p.204.
 - 72) Resolución Iterativa de la Ecuación de Schrödinger, F. M. Fernández, A. M. Mesón, E. A. Castro, ídem, Actas p.232.
 - 73) Estudio Teórico del Espectro Electrónico del Anhídrido Perfluoroacético, A. H. Jubert, P. J. Aymonino, H. O. Villar, E. A. Castro, ídem, Actas p.242.
 - 74) Representación de Curvas de Energía Potencial para Moléculas Diatómicas, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem, Actas p.221.
 - 75) Cruces de Niveles de Energía de una Molécula Rígida Diatómica Dipolar en un Campo Eléctrico Uniforme, F. M. Fernández, E. A. Castro, 69a. Reunión de la Asociación Física Argentina, Departamento de Física, FCEN, Núñez, Buenos Aires, 1984, Actas p.48.
 - 76) Una Aproximación Perturbativa Electroestática para Interacciones Intermoleculares, R. E. Cachau, H. O. Villar, E. A. Castro, ídem, Actas p.79.
 - 77) Niveles de Energía para los Modelos con Potenciales de Confinamiento, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem, Actas p.62.
 - 78) Desarrollo Perturbativo Convergente para los Niveles Rotacionales de una Molécula Rígida Diatómica Dipolar en un Campo Eléctrico Uniforme, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem, Actas p.48.
 - 79) Programas de Uso en Análisis de Estructuras Electrónicas, O. G. Stradella, H. O. Villar, E. A. Castro, II Jornadas Argentinas de Informática en la Ciencias Químicas, Asociación Química Argentina, Buenos Aires, 1984, Comunicación A11.
 - 80) Estudio de la Transferibilidad de la Matriz de Fock Mediante el Método MINDO/3, D. J. Barbiric, E. A. Castro, F. M. Fernández, XVI Congreso Latinoamericano de Química, Río de Janeiro, Brasil, 1984, Actas p.223.
 - 81) Una Introducción Elemental a la Teoría de los Funcionales de la Densidad, E. A. Castro, M. C. Donnamaría, III Reunión Nacional de Educación en la Química (REQ III), San Luis, 1985, Actas p.1.
 - 82) An Approximate Analytical Expression for the Energies of the Light-Bound States of the Zeeman Effect in Hydrogen, G. A. Arteca, F. M. Fernandez, E. A. Castro, V International Congress on Quantum Chemistry, Montreal, Canada, 1985, Actas p.98, Comunicacion 10-C.
 - 83) The Structural Development Beyond Formal Operations, E. A. Castro, F. M. Fernández, VIII International Conference on Chemical Education, Tokyo, Japan,

- 1985, Actas p.18, Comunicación 4C 134 fp.
- 84) Adaptación del Índice de Complejidad-Densidad al Idioma Español, G. A. Arteca, E. A. Castro, F. M. Fernández, I Congreso Internacional Sobre Investigación en la Didáctica de las Ciencias y de las Matemáticas, Barcelona, España, 1985.
 - 85) Convergent Perturbation Series for Coupled Oscillators, F. M. Fernández, A. M. Mesón, E. A. Castro, International Symposium on Applications of Mathematical Concepts to Chemistry, Dubrovnik, Croatia, Yugoslavia, 1985.
 - 86) Interacciones Repulsivas entre Átomos Distintos de Gases Nobles Utilizando Funcionales de la Densidad, M. C. Donnamaría, M. D. Glossman, E.A. Castro, IV Congreso Argentino de Fisicoquímica, Río Cuarto, 1985, Actasp.G-8.
 - 87) Estudio Teórico sobre la Isomería de Enlace entre Fluoruro de Magnesio y Monóxido de Carbono, A. H. Jubert, S. A. Maluendes, E. A. Castro, ídem, Actas p.G-7.
 - 88) Estudio Teórico de las Propiedades Electrónicas y Espectroscópicas del SNO, SN₂O₂ y sus Isómeros, O. G. Stradella, A. H. Jubert, E. A. Castro, ídem, Actas p.F-12.
 - 89) Estudio Teórico de la Ciclo-Adición 2 + 1 de Etileno al Radical Cation Cetena, H. O. Villar, O. G. Stradella, E. A. Castro, ídem, Actas p.G-6.
 - 90) Estudio Teórico del Agua en el Campo del Ion Ca⁺², R. E. Cachau, H. O. Villar, E. A. Castro, ídem, Actas p.G-5.
 - 91) Expresiones Analíticas Sencillas para el Parámetro Crítico de Potenciales Coulómicos Apantallados, G. A. Arteca, G. I. Frydman, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem, Actas p.G-3.
 - 92) Estudio de Singularidades en Autovalores Mediante Series Perturbacionales: Aplicación a Átomos Bielectrónicos, G.A. Arteca, F.M. Fernández, E.A. Castro, ídem, Actas p.G-1.
 - 93) Cálculo de Energías Electrónicas Totales de Moléculas Poliatómicas en Base a Condiciones de Homogeneidad, E. Ottavianelli, E. A. Castro, F. M. Fernández, XVII Congreso Argentino de Química, Bahía Blanca, 1985, Actas p.2.1-2.
 - 94) Análisis Teórico de la Isomerización del Tiocianato de Fluorocarbonilo, A. H. Jubert, H. O. Villar, E. A. Castro, ídem, Actas p.2.1-3.
 - 95) Un Curso Introductorio de Psicología Cognoscitiva a la Enseñanza de la Química, E. A. Castro, ídem, Actas p.9-7.
 - 96) Llenado de la Tabla Periódica Mediante Funcionales de la Densidad, M. C. Donnamaría, M. D. Glossman, E. A. Castro, ídem, Actas p.9-13.
 - 97) Función de Wu Modificada para el Cálculo de Algunas Propiedades Atómicas, M. D. Glossman, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, ídem, Actas p.2.1-4.
 - 98) La Noción de Complementariedad y las Operaciones Post-Formales en la Enseñanza de la Química, E. A. Castro, I Congreso Panamericano de Química, San Juan, Puerto Rico, 1985.
 - 99) Energías Electrónicas Totales y Orbitales en Sistemas con Capas Abiertas, O. G. Stradella, H. O. Villar, E. A. Castro, ídem.
 - 100) Sobre la Definición de Valencia Atómica en Términos de la Matriz Densidad de un Sistema Molecular, O. G. Stradella, H. O. Villar, E. A. Castro, ídem.
 - 101) Momentos Dipolares Moleculares Calculados a partir de una Nueva Escala de Electronegatividades, O. G. Stradella, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem.
 - 102) Una Función de Prueba para la Descripción de Propiedades Atómicas Mediante

- Funcionales de la Densidad, M. D. Glossman, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, ídem.
- 103) Reconstrucción de Curvas de Energía Potencial Vibracional a partir de Resultados Experimentales, J. L. Villaveces, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem.
 - 104) Suma de Series Divergentes para los Autovalores Stark de un Rotor Rígido, F. M. Fernández, S. A. Maluendes, E. A. Castro, Reunión Nacional de Física 1985, Rosario, Actas p.17, Comunicación Do 1.7.
 - 105) Determinación de Parámetros Críticos a partir de Desarrollos en Serie de Potencias, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem, Actas p.17, Comunicación Do 1.6.
 - 106) Teoría de Perturbaciones sin Función de Onda Para Sistemas Multidimensionales, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem, Actas p.31, Comunicación Do 2.2.
 - 107) Estudio Relativo a la Transferibilidad de los Elementos de Matriz de Fock. Método CNDO/S, D. A. Barbiric, E. A. Castro, III Simposio Brasileño de Química Teórica, São Carlos, San Pablo, Brasil, 1985, Actas p.25.
 - 108) Abstracción de Hidrógeno por el Radical Cation Formaldehído, H. O. Villar, E. A. Castro, ídem, Actas p.26.
 - 109) Cálculo MNDO Conformacional de algunos Haluros de Sulfonilo, O. G. Stradella, H. O. Villar, E. A. Castro, ídem, Actas p.13.
 - 110) Un Nuevo Principio Variacional para la Obtención de Soluciones Analíticas de la Ecuación de Thomas-Fermi para Átomos en Campos Magnéticos Intensos, M. D. Glossman, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, ídem, Actas p.39.
 - 111) Cation Influence on the Structure of Water in $\text{Me}^{+n}.\text{OH}_2$ Complexes, R. E. Cachau, H. O. Villar, E. A. Castro, ídem, Actas p.40.
 - 112) Método del Cociente Modificado, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem, Actas p.40.
 - 113) Un Nuevo Método de Análisis de Singularidades de Punto Crítico a partir del Desarrollo en Serie de Potencias, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem, Actas p.13.
 - 114) On the Basis Set Dependence of Population Analysis, O. G. Stradella, H. O. Villar, E. A. Castro, Symposium on Computational and Mathematical Chemistry, 1986, Saskatoon, Saskatchewan, Canada, 1986, Actas p.198, Comunicación PH-F1-12.
 - 115) On Calculation of Critical Parameters from Power Series Expansions, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem, Actas p.176, Comunicación PH-DP-1.
 - 116) Critical Parameters from Power Series Expansions, F. M. Fernández, G. A. Arteca, E. A. Castro, Sanibel Symposia, II International Symposium on Atomic, Molecular and Solid State Theory, Scattering Problems, Many-Body Phenomena, and Computational Methods, Marineland, Florida, USA, 1986.
 - 117) Calculation of Atomic Polarizabilities with Density Functionals, M. C. Donnamaría, R. E. Cachau, M. D. Glossman, E. A. Castro, XVIe Congrès des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine, Lyon, France, 1986.
 - 118) Semiclassical Model for the Zeeman Resonances in Hydrogen at the Zero-Field Ionization Threshold, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem.
 - 119) Aplicación de la Teoría del Aprendizaje Significativo al Estudio Teórico de Sistemas Materiales, E. A. Castro, I Congreso Argentino y Latinoamericano de Educación en la Química (CEQ I), Cosquín, Córdoba, 1986, Comunicación E 71.
 - 120) Un Programa Tipo SOMAR para Computadoras Personales, R. E. Cachau, E. A. Castro, III Jornadas Argentinas de Informática en las Ciencias Químicas, Asociación

- Química Argentina, Buenos Aires, 1986, Comunicación A1.
- 121) Los Proyectos de Integración Latinoamericana como un Medio de Superación de la Migración de Científicos, Simposio Internacional Sobre la Migración de Científicos en los Países del Cono Sur: Determinaciones Económicas y Políticas, E. A. Castro, Sociedad Científica Argentina, Buenos Aires, 1986, Actas p.5.
 - 122) Solución Analítica Aproximada de la Ecuación de Thomas-Fermi para Iones Positivos en Campos Magnéticos Fuertes, M. D. Glossman, E. A. Castro, XVII Congreso Latinoamericano de Química y VI Congreso Colombiano de Química, Bogotá, Colombia, 1986.
 - 123) Validez del Nuevo Principio Variacional para el Modelos de Thomas-Fermi para Átomos en Campos Magnéticos Fuertes, M. D. Glossman, E. A. Castro, ídem.
 - 124) Las Operaciones Post-Formales en el Desarrollo Intelectual y su Relevancia en la Enseñanza de la Química, E. A. Castro, ídem.
 - 125) La Mecánica Cuántica es Aplicable a un Sistema o a un Conjunto de Sistemas? Una Perspectiva Alternativa, E. A. Castro, ídem.
 - 126) Expresiones Analíticas Aproximadas para los Autovalores de Sistemas Cuánticos Acotados, D. A. Estrín, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem.
 - 127) Estudio Crítico de las Aplicaciones Usuales de las Técnicas Omega. Técnica Omega Generalizada, R. E. Cachau, G. L. Estiú, E. A. Castro, ídem.
 - 128) Estudio Teórico del Espectro Electrónico y Propiedades Moleculares del Perfluoroacetaldehído, E. E. Ottavianelli, A. H. Jubert, E. A. Castro, ídem
 - 129) On the Linearly Driven Parametric Oscillator, F. M. Fernández, E. A. Castro, Colloque Franco Latinoamericain de Physique, Buenos Aires, 1986.
 - 130) Estudio Químico-Cuántico de Fármacos. Relaciones entre la Estructura Estudiada por Métodos Semiempíricos y la Actividad Biológica, G. L. Estiú, R. E. Cachau, E. A. Castro, L. B. Blanch, III Reunión Latinoamericana de Ciencias Farmacéuticas, Montevideo, Uruguay, 1986.
 - 131) Desarrollos Semiclásicos $1/N$ y su Aplicación a Potenciales Esféricamente Simétricos, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, E. A. Castro, 71^a. Reunión de la Asociación Física Argentina, Córdoba, 1986.
 - 132) Integración Numérica de la Ecuación de Schrödinger Unidimensional, C. G. Díaz, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem.
 - 133) Invariantes Cuánticos para Osciladores Dependientes del Tiempo, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem.
 - 134) On the Semiclassical Model For Molecular Collisions, F. M. Fernández, E. A. Castro, Xth International Conference on Molecular Energy Transfer, Emmetten, Switzerland, 1987.
 - 135) Aplicaciones Novedosas de los Funcionales de la Densidad, M. C. Donnamaría, R. E. Cachau, E. A. Castro, V Escuela Latinoamericana de Química Teórica, La Habana, Cuba, 1986, Actas p.3.
 - 136) Resultados Recientes en el Estudio de la Existencia de Canales Iónicos, R. E. Cachau, E. A. Castro, ídem, Actas p.1.
 - 137) The Multidimensional Driven Harmonic Oscillator, F. M. Fernández, E. A. Castro, 1987 Sanibel Symposium on Quantum Chemistry and Solid State Theory, Marineland, Florida, USA, 1987.
 - 138) Modified Large-N Expansion, F. M. Fernández, S. A. Maluendes, E. A. Castro, ídem.

- 139) The Use of Readability Indexes to Improve Chemistry Skills, E. A. Castro, IX International Conference on Chemical Education, São Paulo, Brasil, 1987, Actas p.278.
- 140) Estudio Semiempírico de la Reacción de Reducción de Agua sobre un Electrodo Cristalino. Influencia de las Caras Expuestas y del Potencial Aplicado, G. L. Estiú, S. A. Maluendes, E. A. Castro, V Congreso Argentino de Fisicoquímica, Mar del Plata, 1987, Comunicación K1.
- 141) Estudio Semiempírico de la Reacción Catódica de Reducción de Agua sobre un Electrodo de Pt(111), G. L. Estiú, S. A. Maluendes, E. A. Castro, ídem, Comunicación K2.
- 142) Una Técnica SOMAR Mejorada para el Estudio de Interacciones Entre Especies Iónicas con Campo de Reacción, R. E. Cachau, E. Bidacovich, E. A. Castro, ídem, Comunicación C3.
- 143) Un Procedimiento para el Estudio del Error por Superposición de Bases Intramoleculares (IBSSE), R. E. Cachau, O. G. Stradella, E. A. Castro, ídem, Comunicación B7.
- 144) Singularidades de los Autovalores del Oscilador Armónico con Condiciones de Contorno de von Neumann, G. I. Frydman, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem, Comunicación B3.
- 145) Generalización del Método del Determinante de Hill, D. A. Estrín, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem, Comunicación B2.
- 146) Estudio Teórico de la Estructura y Espectro Vibracional del SNO, SNONO y ONSNO, O. G. Stradella, S. A. Maluendes, E. A. Castro, A. H. Jubert, ídem, Comunicación A11.
- 147) Propiedades Topológicas de la Densidad Electrónica de los Aductos CO-MgF₂ y OC-MgF₂, O. G. Stradella, S. A. Maluendes, E. A. Castro, A. H. Jubert, ídem, Comunicación B8.
- 148) Transferencia de Carga Intramolecular en Compuestos Fluoroxicarbonados, E. E. Ottavianelli, E. A. Castro, A. H. Jubert, ídem, Comunicación A13.
- 149) Funcionales de la Densidad en la Evaluación de Polarizabilidades para Especies Iónicas, M. C. Donnamaría, R. E. Cachau, E. A. Castro, ídem, Comunicación A12.
- 150) Dependencia de los Análisis Poblacionales con el Conjunto de Funciones de Base, O. G. Stradella, H. O. Villar, E. A. Castro, ídem, Comunicación B4.
- 151) Aplicación de la Teoría de Thomas-Fermi-Dirac-Weizsäcker al Cálculo de Propiedades Atómicas, M. D. Glossman, E. A. Castro, ídem, Comunicación B6.
- 152) La Corrección por Intercambio Estadístico en el Modelo de Thomas-Fermi para Átomos en Campos Magnéticos Fuertes, M. D. Glossman, E. A. Castro, ídem, Comunicación B5.
- 153) Estudio Sobre la Capacidad de los Científicos para Emplear Inferencias Condicionales, E. A. Castro, II Congreso Internacional de Investigación Didáctica, ICE Universitat Autònoma, Bellaterra, Barcelona, España.
- 156) Posible Influencia de Efectos Cuánticos de Transferencia de Carga sobre la Movilidad Iónica, S. H. Almaleck, R. E. Cachau, E. A. Castro, C. M. Marschoff, V Congreso Argentino de Fisicoquímica, Mar del Plata, 1987, Comunicación D2.
- 157) Niveles de Energía Rotovibracionales de Moléculas Diatómicas a Partir del Método del Determinante de Hill, D. A. Estrín, F. M. Fernández, E. A. Castro, XVII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Peñíscola,

- Castellón, España, 1987, Actas p.134.
- 158) Algunas Reglas de Combinación Mejoradas para Coeficientes de Van der Waals para Dos Cuerpos, E. Bidacovich, E. Ottavianelli, E. A. Castro, XVIII Congreso Argentino de Química, Universidad Nacional del Nordeste, Facultad de Ciencias Exactas, Naturales y Agrimensura, Corrientes, 1987.
 - 159) Una Introducción Elemental a la Teoría de los Funcionales de la Densidad. II - Aplicaciones al Estudio de Átomos, M. D. Glossman, E. A. Castro, ídem.
 - 160) Suma de Desarrollos Semiclásicos $1/N$ Asintóticos Divergentes, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, E. A. Castro, IV Simposio Brasileiro de Química Teórica, Caxambú, Minas Gerais, Brasil, 1987.
 - 161) Cálculo Semiempírico de la Interacción H-H₂O sobre Superficies Monocristalinas de Pt(100) y Pt(111), G. L. Estiú, S. A. Maluendes, E. A. Castro, A. J. Arvia, ídem.
 - 162) Atomic Properties Through Extended Thomas-Fermi-Weizsäcker Theory, M. D. Glossman, E. A. Castro, ídem.
 - 163) On the Semiclassical Approximation to Molecular Collisions, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem.
 - 164) Estudio de la Descomposición Fotoquímica del Anhídrido Perfluorosuccínico, E. E. Ottavianelli, A. H. Jubert, E. A. Castro, ídem.

 - 165) Topología de la Densidad Electrónica en la Interacción entre Agua y Cationes Metálicos, O. G. Stradella, R. E. Cachau, E. A. Castro, ídem.
 - 166) Estudio del Espectro Electrónico y Estados Excitados del CF₃C(O)Cl y CF₃OOCl, E. Ottavianelli, S. A. Maluendes, A. H. Jubert, E. A. Castro, ídem.
 - 167) Aplicación del Método del Determinante de Hill a la Construcción de Curvas de Energía Potencial de Moléculas Diatómicas, D. A. Estrín, F. M. Fernández, E. A. Castro, Reunión Nacional de Física 1987, Centro Atómico Bariloche, San Carlos de Bariloche, 1987, Actas Dm1.3, p.13.
 - 168) Desarrollos $1/k$ y su Aplicación al Cálculo de Energías Atómicas, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem, Actas Am5.1, p.8.
 - 169) Estudio Semiempírico de la Influencia de Escalones Superficiales en la Actividad Catalítica de Superficies Metálicas, G. L. Estiú, S. A. Maluendes, E. A. Castro, A. J. Arvia, ídem, Actas Im1.3, p.49.
 - 170) Estudio Teórico del Primer Estado Excitado del CF₃C(O)F, E. Ottavianelli, A. H. Jubert, E. A. Castro, ídem, Actas Dm1.2, p.13.
 - 171) Estructuras Cristalinas y Funcionales de la Densidad, M. D. Glossman, E. A. Castro, ídem, Actas Do.1, p.56.
 - 172) New Developments on the $1/N$ Expansion Theory, E. A. Castro, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, Global Conference on Mathematical Physics, Einstein Foundation International, 1987.
 - 173) Influencia del H₂O en los Mecanismos de Desorción Electroquímica del CO/CO₂. Estudio Semiempírico de las Interacciones Cooperativas que Condicionan su Cinética, G. L. Estiú, S. A. Maluendes, E. A. Castro, A. J. Arvia, XI Simposio Iberoamericano de Catálisis, Guanajuato, México, 1988, Comunicación 099.
 - 174) Para que Sirve la Química Teórica?, E. A. Castro, IV Jornadas Bonaerenses de Química, Consejo Profesional de Química de la Provincia de Buenos Aires, La Plata, 1987.
 - 175) La Instancia Relativística en el Pensamiento Post-formal, E. A. Castro, REQ IV,

- Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Jujuy, San Salvador de Jujuy, Argentina, 1988.
- 176) Transferencia de Carga en el Sistema $M(H_2O)^{n+z}$ y su Posible Relación con el Comportamiento de Iones Pequeños en Solución Acuosa, C. M. Marschoff, S. H. Almaleck, R. E. Cachau, E. A. Castro, XVIII Congreso Latinoamericano de Química y XVII Jornadas Chilenas de Química, Santiago, Chile, 1988, Actas p.245.
 - 177) Tight Upper and Lower Bounds to the Schrödinger Equation Eigenvalues, F. M. Fernández, E. A. Castro, VI International Congress on Quantum Chemistry, Jerusalem, Israel, 1988.
 - 178) Los Químicos y las Implicaciones Lógicas, E. A. Castro, G. I. Frydman, D. A. Estrín, A. H. Jubert, I International-Argentine Meeting on Methodology in the Teaching of Chemistry, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis, 1988, Actas p.3.
 - 179) Un Algoritmo Sencillo para Integrar Numericamente la Ecuación de Schrodinger Unidimensional, C. G. Díaz, F. M. Fernández, E. A. Castro, VI Escuela Latinoamericana de Química Teórica, Río de Janeiro, Brasil, 1988.
 - 180) Relación Entre las Expansiones $1/Z$ y Z de la Energía Total de Átomos Isoelectrónicos y la Teoría de Muchos Electrones de Sinanoglú, M. B. López, E. A. Castro, ídem.
 - 181) Estudio Teórico de la Fotodescomposición del Fluoruro de Perfluoroacetilo, E. Ottavianelli, A. H. Jubert, E. A. Castro, ídem.
 - 182) Estudio Semiempírico de la Influencia de la Topografía Superficial en Mecanismos de Corrosión, G. L. Estiú, S. A. Maluendes, E. A. Castro, A. J. Arvia, ídem.
 - 183) Estudio Semiempírico del Mecanismo de Electrodesorción de H desde Electrodos de Pt, G. L. Estiú, S. A. Maluendes, E. A. Castro, A. J. Arvia, VIII Reunión Latinoamericana de Electroquímica y Corrosión, Córdoba, Argentina, 1988.
 - 184) Estudio Semiempírico del Mecanismo de Electrooxidación de CO sobre Electrodos de Pt, G. L. Estiú, S. A. Maluendes, E. A. Castro, A. J. Arvia, ídem.
 - 185) Estudio Semiempírico de la Interacción de H_2O , CO, ClH, H, OH y H_2S sobre un Electrodo de Ni, M. B. López, S. A. Maluendes, E. A. Castro, Reunión Nacional de la Asociación Física Argentina, Mar del Plata, 1988.
 - 186) Extended Hückel Calculation of Core-Valence Electron Repulsion Energy for the Interaction of Pt with H, C, O and Cl Atoms. Influence of Simulated Applied Surface Potentials, G. L. Estiú, S. A. Maluendes, E. A. Castro, VI Escuela Latinoamericana de Química Teórica, Río de Janeiro, Brasil, 1988.
 - 187) Transferencia de Energía Traslacional-Vibracional en Colisiones Moleculares. Aproximación Semiclásica, J. Echave, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem, Comunicación B-4.
 - 188) A Topological View of Markovnikov's Rule, O. G. Stradella, E. A. Castro, 1989 Sanibel Symposia, St. Augustine, Florida, USA, 1989.
 - 189) Desarrollos $1/k$ Generalizados. Aplicación al Efecto de Zeeman en el Átomo de Hidrógeno, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, E. A. Castro, VI Congreso Argentino de Fisicoquímica, Río Hondo, Santiago del Estero, 1989, Comunicación B-6.
 - 190) Estudio Ab-Initio de las Propiedades Electrónicas y Vibracionales de ONNOO y ONNSO, S. A. Maluendes, A. H. Jubert, E. A. Castro, ídem, Comunicación B-7.
 - 191) Estudio Teórico de las Transiciones Electrónicas de CF_3OOX ($X = H, F, Cl$), E. E. Ottavianelli, S. A. Maluendes, A. H. Jubert, E. A. Castro, ídem, Comunicación B-8.

- 192) Análisis Teórico de la Fotoquímica del Fluoruro de Perfluoroacetilo, E. E. Ottavianelli, A. H. Jubert, E. A. Castro, ídem.
- 193) Un Tratamiento Alternativo Para Sistemas Cuánticos Rotacionales, D. A. Estrín, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem, Comunicación B-5.
- 194) Topología Cuántica de la Densidad de Espín Electrónico, O. G. Stradella, E. A. Castro, ídem.
- 195) Estudio Teórico de Procesos de Coadsorción en Superficies de Metales Nobles, P. Paredes, E. A. Castro, A. J. Arvía, ídem, Comunicación A-25.
- 196) Influencia de un Substrato Extraño en la Reactividad de una Superficie Metálica. Estudio Teórico del Sistema Ni-Pt en Condiciones de Subpotencial, M. B. Lopez, E. A. Castro, A. J. Arvia, ídem, Comunicación D-24.
- 197) A Pictorial Intepretation of the "Great Orthogonality Theorem" of Group Theory, E. A. Castro, X International Conference on Chemical Education, Waterloo University, Waterloo, Ontario, Canada, 1989, Comunicación TP07.
- 198) Estudio de las Regularidades Sistemáticas de Energías Moleculares Determinadas Teóricamente por los Métodos del Campo Autoconsistente, E. A. Castro, I Congreso Paraguayo de Química-Expoquímica '89, Asunción, Paraguay, 1989.
- 199) Análisis de los Actuales Sistemas de Referatos de las Publicaciones Primarias en Química, E. A. Castro, ídem.
- 200) El Concepto de Fuerza en Química, E. A. Castro, I Congreso Provincial de Educadores en la Química de la Provincia de Buenos Aires, Mar del Plata.
- 201) Variational Principle for Obtaining Approximate Solutions of the Thomas-Fermi Equation for Atoms in a Strong Magnetic Field, M. D. Glossman, E. A. Castro, X Canadian Symposium on Theoretical Chemistry, Banff, Alberta, Canada, 1989.
- 202) Quantum Topological Study of Electronic Spin Density, O. G. Stradella, E. A. Castro, II World Association of Theoretical Organic Chemists, Toronto, Canadá, 1990.
- 203) A Quantum Topological Description of Aromatic Substitution Mechanisms, O. G. Stradella, E. A. Castro, ídem.
- 204) Transferencia de Energía Vibracional en Colisiones Moleculares, J. Echave, F.M. Fernández, E. A. Castro, D. A. Micha, VI Congreso Argentino de Fisicoquímica, Río Hondo, Santiago del Estero, 1989, Comunicación B-4.
- 205) El Modelado en la Enseñanza de la Química como Centro de Convergencia de las Disciplinas Científicas, E. A. Castro, Colloque International sur l'Enseignement Supérieur de Chimie dans les Langues Internationales d'Origine Latine, Lisbonne, Portugal, 1989.
- 206) Estudio Teórico de las Transiciones Single-Singlete de los Compuestos Perfluoroace- taldehído, Fluoruro de Perfluoroacetaldehído y Cloruro de Perfluoroacetaldehído, E. E. Ottavianelli, S. A. Maluendes, A. H. Jubert, E. A. Castro, XVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, La Plata, 1989.
- 207) Método Alternativo para Resolver la Ecuación de Schrödinger Independiente del Tiempo, C. G. Díaz, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem.
- 208) Expresiones Polinominales para Curvas R.K.R. de Moléculas Diatómicas Covalentes, E. Daza, J. L. Villaveces, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, ídem.
- 209) Reactividad Química de las Superficies Mixtas Pt-Ni Obtenidas por Deposición a

- Sub- potencial. Estudio Teórico, M. B. López, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, ídem.
- 210) Aplicación de Métodos Semiempíricos al Análisis de las Estructuras Energéticamente más Favorables por Deposición a Subpotencial de Ni Sobre Pt, M. B. López, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, ídem.
 - 211) Teoría de Orbitales Aplicada al Análisis Comparativo del Comportamiento Electroquímico de Rh(111) y Pt(111) frente a la Adsorción de CO, P. Paredes-Olivera, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, ídem.
 - 212) Aplicación de Métodos Semiempíricos de Cálculo a la Determinación del Mecanismo de Electrooxidación de CO en Electrodo de Rh(111) y Pt(111), P. Paredes-Olivera, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, ídem.
 - 213) Algunos Aportes de la Psicología de la Sumisión a la Enseñanza-Aprendizaje de las Ciencias, E. A. Castro, III Congreso Internacional en la Didáctica de las Ciencias y de las Matemáticas, Santiago de Compostela, España, 1989.
 - 214) Descripción Topológica de la Densidad Electrónica de las Moléculas ON-NO₂ y ON-NSO, O. G. Stradella, S. A. Maluendes, A. H. Jubert, E. A. Castro, XVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, La Plata, 1989.
 - 215) Estudio Semiempírico de la Cinética de Electrooxidación de CO sobre Electrodo de Metales Nobles Modificados por Deposición de Cu a Subpotencial M. B. López, P. Paredes-Olivera, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, V Simposio Brasileiro de Química Teórica, Brasilia, Brasil, 1989.
 - 216) Influencia de la Sobreabundancia Informativa en el Referato Científico, E. A. Castro, XIII Conferencia de Química, Universidad de Oriente y Universidad Estatal de Leningrado, Santiago de Cuba, Cuba, 1990.
 - 217) On the Hill Determinant Method, D. A. Estrin, F. M. Fernández, E. A. Castro, Sanibel Symposium, Ponce de Leon Convention Center, St. Augustine, Florida, USA, 1990.
 - 218) Are We Condemned to be Crushed by the Information Overload?, E. A. Castro, Technological Literacy Conference-Five, The National Association for Science, Technology and Society's Annual Meeting of the STS Community, Crystal City Marriott, Arlington, Virginia, USA, 1990.
 - 219) Estudio Teórico de la Influencia de Átomos de Cu Depositados a Subpotencial en la Cinética de Electrooxidación de CO sobre Electrodo de Metales Nobles, M. B. López, P. A. Paredes-Olivera, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, XII Simposio Ibero-Americano de Catálisis, Río de Janeiro, Brasil, 1990.
 - 220) On the Power Series Method for Eigenvalue Calculations, F. M. Fernández, E. A. Castro, 1988 Sanibel Symposium, Marineland, Florida, USA.
 - 221) Convergence of the Magnus Expansion, J. Echave, F. M. Fernández, E. A. Castro, XVIII Colloquium "Group Theoretical Methods in Physics", Nuclear Physics Department of the Academy of Sciences of the USSR and P. N. Lebedev Institute of Physics of the Academy of Sciences of the USSR, Moscow, USSR, 1990.
 - 222) Análisis de la Solución de Scheidemann-Dreizler de la Ecuación de Thomas-Fermi-Dirac-Weizsäcker, M. D. Glossman, E. A. Castro, III Congreso Boliviano de Química, Universidad Mayor de San Andrés, Facultad de Ciencias Puras y Naturales, La Paz, Bolivia, 1990, Memorias p.129.
 - 223) Some Applications of Scheidemann-Dreizler's Solution of the TFDW Equation, M. D. Glossman, E. A. Castro, Ohio Supercomputer Center Workshop on Theory and

Applications of Density Functional Approaches to Chemistry, Ohio Supercomputer Center, Ohio, USA, 1990.

- 224) Estudio Semiempírico de las Estructuras Involucradas en las Distintas Etapas de la Electrooxidación de CO_2 Reducido, P. Paredes-Olivera, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, XIX Congreso Latinoamericano de Química, Asociación Química Argentina, Buenos Aires, 1990, Actas p.1111.
- 225) Modificación de Superficies Pt(111) y Pt(100) por Deposición a Subpotencial de Átomos de Ag. Estudio Teórico, M. B. López, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, ídem, Actas p.1110.
- 226) Influencia de la Deposición de Cu a Subpotencial en la Cinética de Electrooxidación de CO Sobre Electrodos de Rh(111). Estudio Teórico, M. B. López, P. Paredes-Olivera, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, ídem, Actas 1109.
- 227) Adaptación del SMOG Index de Legibilidad a la Lecto-Escritura en Idioma Español de Textos de Química, E. A. Castro, ídem, Actas p. OR 21.
- 228) Effective Nuclear Charges Through the Fitting of Atomic Polarizabilities with Density Functionals, M. C. Donnamaría, R. E. Cachau, E. A. Castro, XVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, La Plata, 1989.
- 229) Use and Abuse of Models on Chemical Education, E. A. Castro, XI International Conference on Chemical Education, University of York, York, England, 1991.
- 230) Propiedades Electrónicas, Vibracionales y Rotacionales de CF_3OOX (X = H, E, F, Cl), E. Ottavianelli, E. A. Castro, A. H. Jubert, XIX Congreso Latinoamericano de Química, Asociación Química Argentina, Buenos Aires, 1990, Actas p.1614.
- 231) Estudio Teórico de la Estructura Formada por Deposición de Átomos de Cu Sobre Electrodos de Pt(111) y Pt(100), M. B. López, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, IX Congreso Iberoamericano de Electroquímica, Tenerife, Islas Canarias, España, 1990, Actas p.541-543.
- 232) Influencia de la Naturaleza y Topología Superficial en la Cinética de Electrooxidación de Co en Electrodos de Metales Nobles. Estudio Semiempírico, P. Paredes Olivera, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, ídem, Actas p.538-540.
- 233) Propiedades Vibracionales y Rotacionales de CF_3COX (X = H, F, Cl), E. Ottavianelli, S. A. Maluendes, E. A. Castro, A. H. Jubert, XIX Congresso dei Chimici Teorici de Paesi di Espressione Latina, Istituto Superiore di Sanità, Roma, Italia, 1990, Abstract # 134.
- 234) Aproximación Semiempírica a una Adecuada Definición de la Interfase Electroquímica, P. Paredes-Olivera, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, ídem, Abstract # 160.
- 235) Teoría de Orbitales Moleculares Aplicada a la Interpretación de Reordenamientos Superficiales en Interfase Metal-Metal, M. B. López, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, ídem, Abstract # 163.
- 236) El Oscilador Armónico Cuántico con una Frecuencia Dependiente del Tiempo, F. M. Fernández, E. A. Castro, 75^a Reunión de la Asociación Física Argentina, La Plata, 1990, Comunicación 5.12, p.54.
- 237) Análisis Estadístico de la Deposición de Metales Extraños sobre Electrodos de Pt en Condiciones de Subpotencial, M. B. López, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, ídem, Comunicación 1.6-18, p.25.
- 238) Estudio Teórico de Tiotidina y sus Análogos Rígidos, R. D. Enriz, E. A. Jáuregui, E. A. Castro, XIX Congresso dei Chimici Teorici dei Paessi di Espressione Latina,

- Istituto Superiore di Sanità, Roma, Italia, 1990, Abstract # 73.
- 239) Aproximación de Campo Autoconsistente Dependiente del Tiempo. Transferencia de Energía en Colisiones Moleculares, J. Echave, F. M. Fernández, E. A. Castro, XIX Latinoamericano de Química, Asociación Química Argentina, Buenos Aires, 1990, Actas p.1609.
- 240) Resultados Extendidos de Regularidades Sistemáticas en Energías Moleculares Autoconsistentes, E. A. Castro, VII Congreso Argentino de Fisicoquímica, Ciudad Universitaria, Córdoba, 1991.
- 241) Aplicación de Métodos Semiempíricos al Análisis de Estructuras Energéticamente más Favorables por Deposición de Pb sobre Pt, M. B. López, E. A. Castro, A. J. Arvia, ídem.
- 242) Estudio Teórico de la Difusión de Ag en Condiciones de Subpotencial en Superficies de Pt(111) y Pt(100), M. B. López, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, ídem.
- 243) Theoretical Study of the Surface Structures Growth by Underpotential Deposition of Ag Atoms on Pt(100) and Pt(111) Electrodes, M. B. López, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, International Symposia on Atomic, Molecular and Condensed Matter Theory, Computational Methods and Application of Fundamental Theory to Problems of Biology and Pharmacology, Ponce de Leon Resort and Convention Center, St. Augustine, Florida, USA, 1991.
- 244) Application of the Exponential Propagation Matrix Method to the Numerical Solution of the Schrödinger Equation, C. G. Díaz, F. M. Fernández, E. A. Castro, MATH/CHEM/COMP 1991, Dubrovnik, Croatia, Yugoslavia, 1991.
- 245) Total Hartree-Fock Energies from Improved $1/Z$ and $1/N^{1/3}$ Expansions, E. A. Castro, XXXIII IUPAC Congress, Budapest, Hungary, 1991.
- 246) Cálculo Semiempírico de las Frecuencias de Vibración de CO Adsorbido Sobre Superficies de Pt, P. Paredes-Olivera, E. P. M. Leiva, E. A. Castro, A. J. Arvia, VII Congreso Argentino de Fisicoquímica, Ciudad Universitaria, Córdoba, 1991.
- 247) Construction of Bound-State Potential Energy Curves of Diatomic Molecules from Spectroscopic Data, C. G. Díaz, F. M. Fernández, E. A. Castro, IV International Conference on Mathematical and Computational Chemistry, Bled, Yugoslavia, 1991.
- 248) Métodos Semiempíricos Aplicados a Procesos de Interés Electroquímico, M. B. López, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, Congreso Académico Tecnológico, CESPI, Universidad Nacional de La Plata, La Plata, 1991.
- 249) Una Síntesis Posible de los Mapas Conceptuales y los Mapas Mentales: Los Mapas Temáticos, E. A. Castro, II Encuentro Internacional sobre Metodología de la Enseñanza de la Química, Centro de Convenciones y Exposiciones Jiménez de Quesada, Bogotá, Colombia, 1991.
- 250) Cálculo Semiempírico del Proceso de Difusión de Ag sobre Electrodo de Pt(100) y Pt(111) en Condiciones de Subpotencial, M. B. López, A. J. Arvia, E. A. Castro, 76^a Reunión Nacional de Física 1991, Instituto de Física, FCETyT, Universidad Nacional de Tucumán, San Miguel de Tucumán, 1991.
- 251) Cálculo de Calores de Formación de Moleculas a Partir de un Esquema de Átomos Equivalentes, E. A. Castro, ídem.
- 252) Linear Variation Functions not Satisfying Boundary Conditions, E. A. Castro, XXXII Sanibel Symposia, Ponce de Leon Resort and Convention Center, St. Augustine, Florida, USA, 1992.
- 253) An Improved Calculation Procedure of Heats of Formation from a Method of Atoms

- Equivalentes, E. A. Castro, Anapa, USSR, 1992.
- 254) La Enseñanza de la Química a Través de los Mapas Temáticos, E. A. Castro, II Congreso Provincial de Educadores en la Química de la Provincia de Buenos Aires, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional de Avellaneda, Avellaneda, Provincia de Buenos Aires, 1991.
- 255) Algunas Paradojas Derivadas de la Sobreabundancia de Información en Relación a las Actividades Profesionales con Miras al Siglo XXI, E. A. Castro, Congreso Nacional Interdisciplinario "Diagnósticos y Perspectivas de las Actividades Profesionales con Miras al Siglo XX", Colegio de Abogados del Departamento Judicial de La Plata, La Plata, 1991.
- 256) Estudio Semiempírico de la Deposición de Metales Extraños Sobre Electrodo de Pt(111) en Condiciones de Subpotencial, M. B. López, E. A. Castro, A. J. Arvia, VI Simposio Brasileiro de Química Teórica, Caxambú, Minas Gerais, Brasil, 1991.
- 257) Bound-State Börn-Oppenheimer Potential Energy Curves of Diatomic Molecules From Spectroscopic Data, C. G. Díaz, F. M. Fernández, E. A. Castro, 1992 Sanibel Symposia on Atomic, Molecular and Condensed Matter Theory, Computational Methods, and the Applications of Fundamental Theory to Problems of Biology and Pharmacology, Colony's Ponce de Leon Resort and Convention Center, FL, USA, 1992.
- 258) Theoretical Approach to the Structure of upd Films on Pt(111) Electrodes, M. B. López, E. A. Castro, A. J. Arvia, IV International Symposium on Theoretical Approach to Catalysis at Interfaces, Krakow, Poland, 1992.
- 259) A Valuable Tool for Preparing and Delivering Speeches and Lectures: Thematic Maps, E. A. Castro, XII Biennial Conference on Chemical Education "Changing the Image of Chemistry", University of California at Davis, Davis, California, USA, 1992.
- 260) Further Remarks Concerning the Hartree-Fock Energies of N-electron Atomic Systems, E. A. Castro, M. Fraczak, XI Canadian Symposium on Theoretical Chemistry, Montréal, Québec, Canadá, 1992.
- 261) Estudio Semiempírico de la Electrodeposición de Ag sobre una Superficie Defectuosa de Pt(111), M. B. López, E. A. Castro, A. J. Arvia, X Congreso Iberoamericano de Electroquímica, Córdoba, Argentina, 1992.
- 262) Theoretical Approach to the Structure of upd Ag Films on Pt(211) Electrodes, M. B. López, E. A. Castro, A. J. Arvia, 43rd Meeting of the International Society of Electrochemistry, Córdoba, Argentina, 1992.
- 263) Algunas Extensiones y Generalizaciones del Método Variacional, E. A. Castro, VI Reunión Nacional de Educación en la Química, (REQ VI), Universidad Nacional de Tucumán, San Miguel de Tucumán, 1992.
- 264) Hypervirial Perturbative Method and Periodic Boundary Conditions, F. M. Fernández, E. A. Castro, XX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL XX), Mérida, Venezuela, 1992, Actas OR 13.
- 265) Teoría de Perturbación Exacta de Sistemas Mecano-Cuánticos Confinados, F. M. Fernández, E. A. Castro, Congreso Costarricense de Física, Universidad de Costa Rica, Escuela de Física, San José, Costa Rica, 1992.
- 266) Efecto Catalítico de las Superficies Defectuosas en la Electrodeposición de un Metal. Estudio Teórico, M. B. López, E. A. Castro, A. J. Arvia, XX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL XX), Mérida, Venezuela,

- 1992, Actas OR 11.
- 267) Exact Perturbation Theory of Quantum-Mechanical Systems Within Boxes, F. M. Fernández, E. A. Castro, V International Conference on Mathematical and Computational Chemistry, University of Missouri-Kansas City, Kansas City, Missouri, USA, Actas p.28.
- 268) Determinación de Calores de Formación Molecular por Medio de un Método de Átomos Equivalentes, E. A. Castro, II CLAFQO-Conferencia Latinoamericana de Fisicoquímica Orgánica, Huerta Grande, Córdoba, 1993, Comunicación SC6p.61.
- 269) Meaningful Learning Through Thematic Maps, E. A. Castro, III International Seminar on "Misconceptions and Educational Strategies in Science and Mathematics", Cornell University, Department of Education, College of Agriculture and Life Sciences, Ithaca, New York, USA, 1993.
- 270) Semiempirical Calculations About the Vibrational Frequency of CO Adsorbed on Pt and Rh Single Crystal Surfaces, P. A. Paredes-Olivera, E. P. M. Leiva, E. A. Castro, A. J. Arvia, 43rd Meeting of the International Society of Electrochemistry, Córdoba, Argentina, 1992, Actas 6-086.
- 271) On the Use of Legibility Indices to Improve Writing Skills, E. A. Castro, ChemEd 93, Butler University, Indianapolis, USA, 1993, Actas p.30.
- 272) A Factorization Method with Application to Perturbation Theory, F. M. Fernández, E. A. Castro, US-Latin American Workshop on Molecular and Material Sciences: Theoretical and Computational Aspects, University of Florida, Gainesville, FL, USA, 1993.
- 273) A New Implementation of Stationary Perturbation Theory for Separable Quantum Mechanical Problems, F. M. Fernández, E. A. Castro, XXXIII Sanibel Symposium, Ponce de Leon Resort and Convention Center, St. Augustine, Florida, USA, 1993, Actas p.30.
- 274) Myths and Facts Related to the Atomic and Molecular Orbital Concepts, E. A. Castro, 34th IUPAC Congress, Beijing, China, 1993.
- 275) El Uso de Mapas Temáticos en el Proceso de Enseñanza-Aprendizaje de la Química, IV Congreso Boliviano de Química, La Paz, Bolivia, 1993, Actas p.78
- 276) Conceptos y Desconceptos sobre Orbitales Atómicos y Orbitales Moleculares, E. A. Castro, VIII Reunión Nacional de Educación en la Física, 1993.
- 277) Estudio Teórico de la Electrodeposición de Ag sobre Pt(100), M. Allemand, M. B. López, E. A. Castro, A. J. Arvia, VII Congreso Nacional de Fisicoquímica, Universidad Nacional de Mar del Plata, Mar del Plata, 1993, Comunicación H28, p.228.
- 278) Iterative Bogoliubov Transformation and Anharmonic Oscillators, F. M. Fernández, E. A. Castro, MATH/CHEM/Comp'93, VIII International Course & Conference on the Interface Among Mathematics, Chemistry and Computer Sciences and The I Croatian Meeting on Fullerenes, Dubrovnik, Croatia, 1993.
- 279) Calculation of Enthalpies of Formation from a Scheme of Equivalent Atoms, E. A. Castro, III World Congress of Theoretical Organic Chemists, Toyohashi, Sichi-ken, Japan, 1993.
- 280) Effective Atomic Radii from a Trial Density Function, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, XXX Years of Density Functional Density Theory: Concepts and Applications, Cracow, Poland, 1994.
- 281) Cálculo de la Variación de la Función Trabajo de Metales de Transición Debido a la

- Adsorción de CO, P. Paredes-Olivera, E. P. M. Leiva, E. A. Castro, A. J. Arvia, VIII Congreso Argentino de Fisicoquímica, Universidad Nacional de Mar del Plata, Mar del Plata, 1993, Comunicación H27, p.228.
- 282) Comparación de Varios Métodos de Cálculo de Entalpías de Formación, E. A. Castro, XXI Congreso Latinoamericano de Química, Colegio Panameño de Química, El Dorado, Panamá, 1994.
- 283) Estudio Teórico del Proceso de Fotodescomposición Primario del Perfluoroacetaldehído, A. H. Jubert, E. A. Castro, E. E. Ottavianelli, R. E. Cachau, XXIe CHITEL, Grenoble, France, 1993, Actas P57b.
- 284) Una Sencilla Ejemplificación de dos Principios Fundamentales de la Química Cuántica, F. M. Fernández, E. A. Castro, III Congreso Provincial de Educadores en la Química de la Provincia de Buenos Aires, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional de Avellaneda, Avellaneda, 1993.
- 285) A Simplified Scheme for Relating Ab-Initio Energies to Heats of Formation, E. A. Castro, XXXIV Sanibel Symposium, Marriot at Sawgrass Resort, Ponte Vedra Beach, Florida, USA, 1994.
- 286) A Simple Theory to Explain the Dependence of the Oxygen Electroreduction Reaction on the Pt Electrode Topology, F. Zinola, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, ídem.
- 287) Estudio Semiempírico de la Interacción de Hidrógeno con Defectos Puntuales en una Red de Aluminio, M. B. López, E. A. Castro, XXI^o Congrès International des Chimistes Théoricien d'Expression Latine, Grenoble, France, 1993, Actas P.22a.
- 288) Estudio Semiempírico de la Estabilidad de Distintas Estructuras Firmadas por Electrodeposición de Átomos de Au Sobre Electrodo de Pt(100) y Pt(111), M. Allemand, M. B. López, E. A. Castro, A. J. Arvia, ídem, Actas P.22b.
- 289) Aproximación Semiempírica de las Estructuras Formadas por Átomos de Pb en Condiciones de upd en Clusters de Pt(100), E. R. Zalazar, M. B. López, E. A. Castro, A. J. Arvia, ídem, Actas P.22c.
- 290) Estudio Conformacional de las Moléculas de 1,2,4-Trioxazinas por Métodos Semiempíricos, N. Jorge, N. Peruchena, L. F. R. Cafferata, E. A. Castro, ídem, Actas P.56b.
- 291) El Reduccionismo en la Química, E. A. Castro, I Jornadas de Especialistas de Enseñanza de la Química, Universidad Nacional de Rosario, Facultad de Odontología, Rosario, Santa Fé, 1993.
- 292) Cálculo Simplificado de Propiedades Termodinámicas a Partir de Métodos Ab-Initio de Estructura Electrónica, E. A. Castro, Summer Workshop in Theoretical Chemistry, Cátedra de Química Cuántica, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay, 5-7/11/93.
- 293) A Simplified Theoretical Method to Calculate Enthalpies of Formation, E. A. Castro, 35th IUPAC Congress, Turkish Chemical Society, 14-19/8/95, Istanbul, Turkish.
- 294) El Reduccionismo Físico en la Química, E. A. Castro, II Simposio Nacional Sobre la Enseñanza de las Ciencias y la Tecnología, Servicio de Difusión Científica, Secretaria de Ciencia y Técnica, Centro Cultural General San Martín, Buenos Aires, 20-22/7/94.
- 295) Escribir Sobre Ciencia Para Aprender Ciencia, E. A. Castro, IV Congreso Internacional Sobre Investigación en la Didáctica de las Ciencias y de las Matemáticas, Institut de Ciencies de l'Educacio de la Universitat Autònoma de

- Barcelona, Vice-rectorat d'Investigacio de la Universitat de Valencia, 13-16/9/93, Actas p.4.
- 296) On the Alleged Parallels Between Physics and Eastern Mysticism, E. A. Castro, International Conference on "Science and Mathematics Education for the 21st Century: Towards Innovative Approaches", Universidad de Concepción, Facultad de Educación, Humanidades y Artes, Concepción, Chile, 26/9 al 1/10/94.
- 297) Some Common Misconceptions About Orbitals, E. A. Castro, XIII International Conference on Chemical Education, CHEMISTRY: The Key to the Future, Inter-American University of Puerto Rico, Metropolitan Campus, San Juan, Puerto Rico, August 8-12, 1994.
- 298) Chemistry and the Convergence of Sciences, Humanities and Arts, E. A. Castro, III International History, Philosophy and Science Teaching Conference, 29/10 al 2/11/95, Department of and Instruction, University of Minnesota, Minneapolis, MN 55455-0208, U. S. A.
- 299) El Programa de Ciencia por Correo del Museo de Ciencia de Boston, Massachusetts, USA, E. A. Castro, XX Congreso Argentino de Química, Córdoba, 14-18/11/94, Comun.OR 41, Actas p. 348.
- 300) Cálculo Teórico de Calores de Formación de Ácidos Carboxílicos y Ésteres, E. A. Castro, ídem, Comun. OR 27, Actas p.223.
- 301) Escribir Sobre Química para Aprender Química, E. A. Castro, II Jornadas en Enseñanza Universitaria de la Química, Facultad de Farmacia y Bioquímica, Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires, 27-29/4/95, Actas A-10.
- 302) Defectos Puntuales como Centros de Atrapamiento de Hidrógenos en Aluminio Metal. Estudio Teórico, M. B. López, E. A. Castro, III Congreso de la Asociación Latinoamericana de Metalurgia y Materiales, Chile, Agosto 1994.
- 303) Can Chemistry be Reduced to Physics?, E. A. Castro, ChemEd 95, Department of Chemistry and Biochemistry, Old Dominion University, Norfolk, Virginia, USA, August 5-10, 1995.
- 304) The Writing on Chemical Industries to Improve the Learning of Chemistry, E. A. Castro, Partners in Chemical Education, The Royal Society of Chemistry, The University of York, August 29-September 2, 1995, York, United Kingdom.
- 305) II Meeting on University Teaching of Chemistry, L. Álvarez Funes, L. E. Cascarini de Torre, E. A. Castro, M. M. Hermida Lucena, 3rd European Conference on Research in Chemical Education, Lublin-Kazimierz, Poland, September 25-29, 1995, Commun. P-25, Proceedings p. 89.
- 306) An Improved Scheme of Atom Equivalents to Relate Ab-Initio Energies to Enthalpies of Formation, C. Vericat, E. A. Castro, XXXVI Sanibel Symposium, Quantum Theory Project, University of Florida, Florida, USA, February 24 - March 2, 1996.
- 307) Cálculo de Entalpías de Formación de Hidrocarburos por Medio de un Esquema de Equivalentes Atómicos Optimizados, E. A. Castro, C. Vericat, X Simposio Nacional de Química Orgánica, Sociedad Argentina de Investigación en Química Orgánica, Los Cocos, Córdoba, 12-15/11/95.
- 308) Efectos Estereoelectrónicos Sobre la Estructura y Análisis Conformacional del 3,6-Dimetoxi-1,2,3,4-Tetroxano, N. Jorge, N. M. Peruchena, L. F. R. Cafferata, E. A. Castro, IX Congreso Argentino de Fisicoquímica, San Luis, Comunicación B39, Actas p.96, 21-25/11/94.

- 309) Una Experiencia Didáctica y Pedagógica en el Dictado de un Curso Avanzado de Fisicoquímica de la Licenciatura en Ciencias Químicas, E. A. Castro, A. Croce, M. E. Martins, F. M. Fernández, II Encuentro Docente, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 16/12/95.
- 310) Análisis Topológico de Puentes de Hidrógeno del Tipo C-H...O, G. L. Sosa, N. M. Peruchena, R. H. Contreras, E. A. Castro, XXI Congreso Argentino de Química, Universidad Nacional del Sur-AQA, Departamento de Química e Ingeniería Química, UNS, 18-20/9/96, Actas IV-17, p. 263.
- 311) Estudio Teórico del Puente de Hidrógeno del 1-Hidroepoxi-(1-p-nitrofenil) Etanol, A. H. Jubert, E. A. Castro, L. F. R. Cafferata, ídem, Actas IV-60, p. 306.
- 312) Cálculo Teórico de las Entalpías de Formación de Hidrocarburos Mediante Sencillas Relaciones Lineales y Cuadráticas que Involucran al Número de Átomos de Carbono e Hidrógeno y las Energías Electrónicas Totales, E. A. Castro, ídem, Actas IV-61, p. 307.
- 313) La Alfabetización Científica del Ciudadano Medio: ¿Mito o Realidad?, E. A. Castro, ídem, Actas XII-7, p. 533.
- 314) Donde los Extremos se Encuentran: El Programa de Ciencia por Correo, III Encuentro Docente de la Universidad Nacional de La Plata, Colegio Nacional "Rafael Hernández" Facultad de Ingeniería, 20-22/11/96, Actas Trabajo # 31.
- 315) Theoretical Study of Hydrogen Bonding and Vibrational Spectra of the 1-Hydroperoxy, 1-(p-nitrophenyl) Ethanol, A. H. Jubert, E. A. Castro, L. F. R. Cafferata, XXXVII Sanibel Symposium, University of Florida, Ponce de Leon, St. Augustine, Florida, USA, March 1-7, 1997.
- 316) Topological Analysis of C-H...O bonds, G. L. Sosa, N. Peruchena, R. H. Contreras, E. A. Castro, ídem.
- 317) Cyclodextrins and Catalysis: Theoretical Analysis of the Inclusion Complex in a Hydrolysis Reaction, D. J. Barbiric, R. H. de Rossi, E. A. Castro, US-Latin American Workshop on Molecular and Materials Science. Theoretical and Computational Aspects", University of Florida, February 27-28, 1997, Florida, U. S. A.
- 318) The Program Science-By-Mail, Museum of Science, Boston, Massachusset, First International Conference of the European Science Education Research Association (E.S.E.R.A.), Università degli Studi "Roma Tre", Dipartimento di Biologia, Consiglio Nazionale delle Ricerche, Roma, Italy, September 2-6, 1997.
- 319) Interacción de Ciclodextrina con Azobenceno: Aspectos Teóricos, D. Barbiric, R. H. de Rossi, E. A. Castro, X Congreso Argentino de Fisicoquímica, Universidad Nacional de Tucumán, Tucumán, 21-25/4/97. Actas B76, p. 120.
- 320) El Pensamiento Post-Formal en la Enseñanza-Aprendizaje de la Física, E. A. Castro, VI Inter-American Conference on Physics Education, Córdoba, Argentina, 30/6 al 4/7/97.
- 321) Algunos Conceptos Erróneos sobre Orbitales, E. A. Castro, V Congreso Internacional sobre Investigación en la Didáctica de las Ciencias, Murcia, 10-13/9/97.
- 322) Some Mistaken Argument against Objectivity and Truth in Science, E. A. Castro, Working Conference IV, OMETECA Institute, Rutgers, Institute, New Brunswick, New Jersey, 24-28/7/96.
- 323) Estudio Teórico Conformacional de la Molécula del 3,6-Difenil-1,2,4,5-Tetroxano,

- N. Jorge, L. F. R. Cafferata, E. A. Castro, M. E. Gómez-Vara, X Congreso Argentino de Fisicoquímica, Universidad Nacional de Tucumán, Tucumán, 21-25/4/97, Actas B28, p.96.
- 324) Estudio Topológico Ab-Initio de Interacciones Intermoleculares, G. L. Sosa, N. M. Peruchena, R. H. Contreras, E. A. Castro, ídem, Actas B103, p.134.
- 325) La Alfabetización Científica, E. A. Castro, V Congreso Provincial de Educadores en la Química de la Provincia de Buenos Aires y I Congreso Regional de Educadores en la Química, Facultad de Ciencias Veterinarias, Tandil, Universidad del Centro de la Provincia de Buenos Aires, 1-3/10/97.
- 326) Un Estudio Introductorio a la Capacidad de los Alumnos para Manejar Modelos Físicos y Químicos, E. A. Castro, A. H. Jubert, III Jornadas de la Enseñanza Universitaria de la Química, Complejo Vaquerías, Córdoba, 10-12/11/97, Actas p.106.
- 327) Un Nuevo Enfoque a la Enseñanza de la Unión Química, A. H. Jubert, E. A. Castro, E. J. Bottani, IV Encuentro Docente de la Universidad Nacional de La Plata, Facultad de Arquitectura, UNLP, 11-12/11/97.
- 328) Experimental and Theoretical Study of the Vibrational Spectra of 1,1,4,7,7-Hexamethyl Cyclononatriperoxane, A. H. Jubert, R. Pis Díez, E. A. Castro, A. I. Cañizo, L. F. R. Cafferata, XXXVIII Sanibel Symposium, Quantum Theory Project, University of Florida, St. Augustine, Florida, USA, 21-27 February, 1998.
- 329) Cálculo de las Temperaturas Normales de Ebullición de Hidrocarburos Mediante el Modelado de la Teoría QSAR, E. A. Castro, L. Gavernet, M. Firpo, A. A. Toropov, XXII Congreso Argentino de Química, La Plata, 23-25/9/98, Actas 4-107..
- 330) Cálculo Mejorado de las Energías de Disociación de Enlaces de Compuestos Orgánicos Basado en el Concepto de Energía de Estabilización, M. Firpo, L. Gavernet, E. A. Castro, ídem, Actas 4-108.
- 331) Predicción de los Calores de Formación de Diazoazoles y Azolilidenos Calculados por una Aproximación Mejorada de Equivalentes Atómicos, L. Gavernet, M. Firpo, E. A. Castro, ídem, Actas 4-109.
- 332) Una Evaluación de las Actitudes de los Estudiantes de Ingeniería Relacionadas con la Ciencia, M. C. Cardozo, M. B. Núñez, M. I. Aguado, N. B. Okulik, A. H. Jubert, E. A. Castro, ídem, Actas 9-41.
- 333) Espectroscopía UV de 1,2,4-Trioxanos Substituidos, L. V. Mogni, M. A. Defeis, A. H. Jubert, L. F. R. Cafferata, E. A. Castro, ídem, Actas 3-2..
- 334) Análisis Teórico Ab-Initio en Interacciones Débiles C-H...O, G. L. Sosa, N. M. Peruchena, E. A. Castro, R. H. Contreras, ídem, Actas 4-13.
- 335) Análisis de Interacciones Intra e Intermoleculares en H₂O/CH₃NH₂/H₂O, G. L. Sosa, N. M. Peruchena, E. A. Castro, R. H. Contreras, ídem, Actas 4-14.
- 336) Interpretación Teórica de la Interacción de los Isómeros *Cis-Trans* de Algunos Azo-bencenos con la β-Ciclodextrina, D. J. Barbiric, R. H. de Rossi, E. A. Castro, ídem, Actas 4-89.
- 337) Un Nuevo Curso Sobre la Comunicación Científica Oral y Escrita, E. A. Castro, V Encuentro Docente de la Universidad Nacional de La Plata, Facultad de Ciencias Agrarias y Forestales, UNLP, 25-26/11/98.
- 338) Interacciones Intra e Intermoleculares en Puentes de Hidrógeno Fuertes y Débiles, G. L. Sosa, N. M. Peruchena, R. H. Contreras, E. A. Castro, Jornadas Argentinas de Investigación en Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, 21-

22/9/98.

- 339) Interacción de Beta-Ciclodextrina con Azobencenos: Estudio Teórico (II), D. A. Barbiric, Rita H. de Rossi, E. A. Castro, Reunión Reencuentro INIFTA, INIFTA, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, La Plata, 19-20/10/98.
- 340) Complejos de Estequiometría 1:2 Entre β -Ciclodextrina y Azobencenos: Estudio Teórico, D. Barbiric, R. H. de Rossi, E. A. Castro, VII Congreso Argentino de Fisicoquímica y I del Mercosur, Abril 1999, Santa Fe, Argentina, Actas p.137, C26.
- 341) Estudio por QSAR de la Toxicidad de Alcoholes Saturados, G. P. Romanelli, L. F. R. Cafferata, E. A. Castro, idem, C28.
- 342) Equilibrio Tautomérico en Compuestos Amídicos. Evidencias Teóricas y Espectrales, P. E. Allegretti, E. A. Castro, J. J. P. Furlong, idem, C27.
- 343) Science-By-Mail in Argentina, E. A. Castro, International Conference on Science Education for the 21st Century, Szeged, Hungary, June 22-25, 1999.
- 344) Tautomeric Equilibrium of Amides and Related Compounds. Theoretical and Spectral Evidences, P. E. Allegretti, J. J. P. Furlong, E. A. Castro, 5th World Congress of Theoretically Oriented Chemists, Imperial College, London, UK, 1-6 August, 1999.
- 345) An Improved QSAR Study of Toxicity of Saturated Alcohols, G. P. Romanelli, E. A. Castro, ACS Meeting on "Bridging the Gap Between Chemical Modeling and Engineering", American Chemical Society, Anaheim, USA, 22-24/3/99.
- 346) Theoretical Study on Complex Formation Between Hydroxybutanoic Acid and Beta-cyclodextrin, E. A. Castro, A. H. Jubert, US-Latin American-Canada-Caribbean Workshop on Molecular and Materials Sciences: Theoretical and Computational Aspects, Cuernavaca, México, 24-26/2/99.
- 347) Theoretical and Experimental Study of the *cis*-6-Phenyl-5,6-(2-phenylpropylidene)-3,3-tetramethylen-1,2,4-trioxacyclohexane, A. H. Jubert, E. A. Castro, L. F. R. Cafferata, 1999 Sanibel Symposium on Atomic, Molecular and Condensed Matter Theory. Computational Methods and their Applications, Ponce de Leon Resort, St. Augustine, Florida, USA, Proceedings p.27, 27/2-5/3/99.
- 348) Una Propuesta de Cambio para los Trabajos Prácticos: Un Intento de Asemejarlos a Actividades de Investigación, M. V. Piaggio, E. A. Castro, IV Jornadas Nacionales y I Internacionales de Enseñanza Universitaria de la Química, UNL y AQA, Santa Fe, 26-28/5/99.
- 349) Concepciones Sobre Enlace Químico en Primer Año de la Facultad, M. I. Aguado, M. B. Núñez, N. B. Okulik, A. H. Jubert, E. A. Castro, idem.
- 350) Una Alternativa de Enseñanza de Conceptos Básicos de Química Cuántica, J. Frank, J. Marinich, M. B. Okulik, A. H. Jubert, E. A. Castro, idem.
- 351) An Improved QSAR Study of Toxicity of Saturated Alcohols, E. A. Castro, G. P. Romanelli, 6th Conference in Advanced Medicinal Chemistry, Aristotelian University of Thessaloniki, Greece, 28-29/5/99.
- 352) Estudio Teórico de la Acilación Directa de Hidrocarburos Aromáticos por Ácidos Benzoicos, P. E. Allegretti, A. H. Jubert, E. A. Castro R. D. Bravo, J. J. P. Furlong, XII SINAQO "Dr. Eduardo Guerreiro", Los Cocos, Córdoba, 14-17/11/99.
- 353) Evidencia Espectrométrica de la Presencia de Especies Tautoméricas para Cetonas y Tiocetonas, P. E. Allegretti, L. Gavernet, E. A. Castro, J. J. P. Furlong, idem.

- 354) QSPR Study of Boiling Points of Alkyl Alcohols via Improved Polynomial Relationships, M. Tueros, E. A. Castro, 4th Australian Molecular Modelling Workshop, Bardon Conference Centre, Brisbane, Australia, September 21-24, 1999.
- 355) Hydrocarbon Enthalpies of Formation from *ab initio* Calculations Improved Through Bond Parameters, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, Sixth Electronic Computational Chemistry Conference (ECCC6), November 1-30, 1999.
- 356) La Iniciación de los Estudiantes de Grado en Tareas de Investigación, E. A. Castro, VI Encuentro Docente de la Universidad Nacional de La Plata, Facultad de Ingeniería, 28-29/10/99, Actas Comunicación #44.
- 357) Calculation of Total Electronic Energies from Correlation Weighting of Local Graph Invariants, A. Mercader, E. A. Castro, A. A. Toropov, VIII Conference on Current Trends in Computational Chemistry, Vicksburg, Mississippi, USA, November 5-6, 1999.
- 358) Conservación de la Masa y Cálculos Estequiométricos. Resultados de Ciertos Cambios Metodológicos en su Enseñanza en Química General, M. I. Aguado, M. B. Núñez, N. B. Okulik, E. A. Castro, II Congreso Regional de Educadores en la Química, Vaquerías, Córdoba, 1-3/11/99, Actas, Comunicación 1, p.1.
- 359) Encuesta de Actitudes de los Ingresantes 1999 en Relación con la Química, ídem, Comunicación 87, p.105.
- 360) El Alumno Tutor como Mediador Entre los Contenidos Disciplinarios y los Alumnos, W. Frank, J. Marinich, M. B. Núñez, N. B. Okulik, A. H. Jubert, E. A. Castro, I Jornadas Científicas, Técnicas y de Extensión, UNNE, Facultad de Agroindustrias, 1999, Actas p.7.
- 361) Enseñando Enlace Químico Desde una Perspectiva Constructivista, M. B. Nuñez, M. I. Aguado, N. B. Okulik, A. H. Jubert, E. A. Castro, ídem, Actas p.13.
- 362) Detección de Problemas en el Aprendizaje de la Estructura Atómica y Molecular, F. Maguna, N. B. Okulik, E. A. Castro, ídem, p.15.
- 363) Reciclando Aluminio en una Experiencia de Química Inorgánica, M. B. Núñez, L. López Tévez, N. B. Okulik, A. H. Jubert, E. A. Castro, 10^a Reunión de Educadores en Química (X REQ), Universidad de Morón, Morón, Buenos Aires, Argentina, 17-21/9/00, Actas Comunicación TL56, página 82.
- 364) Desarrollo de Acciones para el Mejoramiento de la Enseñanza de Núcleos Conceptuales de Química Básica, F. Maguna, L. López Tévez, M. Núñez, M. Aguado, N. Okulik, E. A. Castro, II Congreso Iberoamericano de Educación en Ciencias Experimentales, Córdoba, 5-8 de Septiembre, 2000.
- 365) Mitos y Realidades Vinculados al Concepto de Orbitales, E. A. Castro, I. Gutman, Congreso Argentino de Química, Asociación Química Argentina y Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, UNNE, Corrientes, Septiembre de 2000, Actas Comunicación 1-19.
- 366) Estudio de la Solubilidad en Agua de Alcoholes Alifáticos por Medio de Descriptores Moleculares, G. P. Romanelli, C. M. Martino, E. A. Castro, Actas Comunicación 3-47, ídem.
- 367) Descriptores Moleculares Mejorados Basados en la Optimización de los Pesos de Correlación de los Grafos Locales, G. Krenkel, E. A. Castro, A. A. Toropov, Actas Comunicación 3-30, ídem.
- 368) Cálculo de la Polarizabilidad y la Solubilidad en Agua de Alcanos y Alcoholes, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, Actas Comunicación 3-13, ídem.

- 369) Estudio QSPR de los Puntos de Ebullición de Alcoholes Alquílicos por Medio de Relaciones Polinomiales Mejoradas, E. A. Castro, M. Tueros, Actas Comunicación 3-49, ídem.
- 370) Modelado por Medio de la Teoría QSPR de la Entalpía de Formación Molecular a Partir de sus Elementos Empleando los Pesos Corelacionados de los Invariantes Locales de los Grafos Moleculares y Atómicos, A. Mercader, E. A. Castro, A. A. Toropov, Actas Comunicación 3-59, ídem.
- 371) Efecto de Sustituyentes Sobre el Enlace C_{sp^3} -H en Interacciones C-H...O, L. Sosa, N. Peruchena, E. A. Castro, Actas Comunicación 3-67, ídem.
- 372) Estudio de los Ciclos $(NPX_2)_n$ ($n = 2, 3, 4$ y 5 ; $X = H, F$ y Cl) por Medio de los Métodos de la Mecánica Molecular, V. Mora, N. Rendtorff, E. A. Castro, Actas Comunicación 3-48, ídem.
- 373) Cálculo de los Valores de pK de Algunas Sales del Flavilium a Partir de los Invariantes de Grafos Locales Optimizados por los Pesos de Correlación, P. Peruzzo, D. Marino, E. A. Castro, A. A. Toropov, Actas Comunicación 3-14, ídem.
- 374) Estructura Atómica: Aprendizaje Según Dos Perspectivas de Enseñanza, N. Okulik, M. B. Núñez, M. I. Aguado, E. A. Castro, Actas, Comunicación 1-26, ídem.
- 375) Cálculo Empírico de las Entalpías de Vaporización a 298.15K de los Alcanos Normales desde C_{21} a C_{28} y C_{30} , M. Firpo, L. Gavernet, E. A. Castro, Actas Comunicación 3-15, ídem.
- 376) Análisis Conformacional del 1,2-Dioxano y sus Derivados Halogenados, Actas Comunicación 3-42, ídem.
- 377) Concepciones de los Alumnos Acerca de la Estructura de la Materia, F. P. Maguna, M. B. Núñez, L. López Tévez, N. B. Okulik, E. A. Castro, Actas Comun. 1-24, ídem.
- 378) Spectrometric Evidence of the Presence of Tautomeric Species in Ketones and Thioketones, E. A. Castro, P. E. Allegretti, J. J. P. Furlong, L. Gavernet, 2000 ACS Pan-American Conference, San Juan, Puerto Rico, June 29-July 3, 2000, Proceedings p.37, Paper #2.
- 379) Improved Molecular Descriptors Based on the Optimization of Correlation Weights of Local Graph Invariants, G. Krenkel, E. A. Castro, A. A. Toropov, The Harry Wiener International Memorial Conference on the Role of Topology in Chemistry, University of Georgia, Athens, Georgia, March 21-24, 2001.
- 380) Estudio Conformacional de Diboranos Cíclicos Simétricos y Asimétricos, N. Rendtorff, E. A. Castro, XII Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica, Universidad Nacional del Comahue, San Martín de los Andes, 23-27/4/01.
- 381) Inhibición de la Hidrólisis de la N-Fenilftalamida en Presencia de Beta-ciclodextrina. Tratamiento Teórico, D. J. Barbiric, A. Granados, R. H. de Rossi, E. A. Castro, ídem, Actas, Comunicación 55, página 134.
- 382) Estudio de la Actividad Estrogénica de Hidrocarburos Bifenílicos Policlorados por Medio de la Teoría QSAR, P. J. Peruzzo, D. J. Marino, E. A. Castro, ídem.
- 383) Análisis QSAR de la Toxicidad no Específica de los Alquilfenoles, P. J. Peruzzo, D. J. Marino, E. A. Castro, ídem.
- 384) Evidencia del Equilibrio Ceto-Enólico en Algunas Beta-Dicetonas Seleccionadas. Espectrometría de Masa y Cálculos Semiempíricos, P. E. Allegretti, L. Gavernet, J. J. P. Furlong, E. A. Castro, ídem, Actas Comunic. 45, página 129.
- 385) Análisis de la Ocurrencia de Estructuras Tautoméricas de 3(2H)-Isoquinolonas por

- Espectrometría de Masa. Correlación con Cálculos Semiempíricos, P. E. Allegretti, A. S. Cánepa, R. D. Bravo, J. J. P. Furlong, E. A. Castro, *ídem*, Comunic. 46, página 129.
- 386) Enseñanza de la Geometría Molecular con el Auxilio de Modelos, L. López-Tévez, E. Sánchez, M. B. Núñez, N. Okulik, E. A. Castro, VI Congreso Internacional en la Didáctica de las Ciencias, Barcelona, España, Septiembre 2001.
- 387) Modelo QSPR de Lipofilicidad Basado en los Invariantes de Grafos Locales Optimizados por los Pesos de Correlación, D. J. Marino, P. J. Perrazo, E. A. Castro, A. A. Toropov, Congreso de la SAIQO, Córdoba, 2001. Actas FQO8.
- 388) Evidencia del Equilibrio Ceto-Enólico en algunas β -Cetoamidas Seleccionadas. Espectrometría de Masa y Cálculos Teóricos, M. M. Schiavoni, H. E. Di Loreto, R. D. Bravo, E. A. Castro, P. E. Allegretti, J. J. P. Furlong, *ídem*. Actas E5.
- 389) Análisis de la Ocurrencia de Especies Tautoméricas en Compuestos Carbonílicos y α -Dicarbonílicos por Espectrometría de Masa, C. Lerner, C. Guzmán, V. Peroncini, E. A. Castro, P. E. Allegretti, J. J. P. Furlong, *ídem*. Actas E6.
- 390) Predicción de los Índices de Retención de Kóvats de 1-(2-hidroxi-3-arylpropane-1,3-dionas a partir de Descriptores Moleculares, G. P. Romanelli, J. Jios, J. C. Autino, L. F. R. Cafferata, E. A. Castro, Primeras Jornadas Nacionales de la Asociación Argentina de Químicos Analíticos, Universidad Nacional de Rosario, Rosario, Santa Fe, 6-7/12/01, Actas, Trabajo C4, p. 48.
- 391) Modelo QSPR para el Cálculo de Entalpías de Formación y Vaporización de Cetonas Alifáticas Mediante el Uso de Índices Electrotopológicos, D. Marino, P. Peruzzo, G. Krenkel, E. A. Castro, XXIV Congreso Argentino de Química, Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, UNL, Santa Fe, 7-9/8/02, Actas 3-32.
- 392) Influencia del Estado E en un Estudio QSAR sobre la Toxicidad de Ácidos Carboxílicos, F. P. Maguna, M. B. Núñez, N. B. Okulik, E. A. Castro, *ídem*, Actas 4-68.
- 393) Estudio Experimental y Teórico de la Entalpía de Formación de la Molécula de Diperóxido de Formaldehído, J. M. Romero, L. C. Leiva, N. L. Jorge, E. A. Castro, M. Gómez-Vara, *ídem*, Actas 4-95.
- 394) Estudio de una Variante al Cálculo del Índice de Wiener y su Aplicación en Modelos QSPR a Familias de Alquenos y Alcoholes, P. J. Peruzzo, D. J. G. Marino, E. A. Castro, *ídem*, Actas 3-31.
- 395) Cálculo Teórico de los Calores de Formación de Algunos Derivados Nitroaromáticos por Medio de un Esquema Sencillo de Equivalentes Atómicos y de Enlaces Químicos, P. Duchowicz, E. A. Castro, *ídem*, Actas 4-69.
- 396) Reconocimiento de Isómeros Geométricos, Enantiómeros e Hidrofobicidad en Complejos de Inclusión con β -Ciclodextrina. Cálculos Teóricos, D. A. Barbiric, E. A. Castro, *ídem*, Actas 1-40.
- 397) Evidencias de la Presencia de Especies Tautoméricas en Algunas Tiocetonas. Espectrometría de masa y Cálculos Teóricos, P. E. Allegretti, M. M. Schiavoni, M. S. Cortizo, E. A. Castro, J. J. P. Furlong, *ídem*, Actas 3-10.
- 398) Estudio de la Ocurrencia de Estructuras Tautométicas en Lactonas, Ésteres, Anhídridos y Compuestos Relacionados, P. E. Allegretti, M. S. Cortizo, C. Guzmán, V. Peroncini, E. A. Castro, J. J. P. Furlong, *ídem*, Actas 3-11.
- 399) The Hydrolysis of N-Phenylphtalamide and N-Adamantylphtalamide Inhibited by

- β -Cyclodextrin. Theoretical Analysis, D. A. Barbiric, A. M. Granados, R. H. de Rossi, E. A. Castro, Third International Conference on Supramolecular Science and Technology, Buenos Aires, Argentina, Actas p.42, 25-29/8/02.
- 400) Análisis Conformacional del 1,2,4,5-Tetroxano (PDF), XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QITEL XVIII), Montevideo, Uruguay, 1-8/9/02.
- 401) Influencia de las Concepciones Alternativas en el Aprendizaje de la Química, E. Masachs, M. C. Cardozo, E. A. Castro, Página Internet de la UNNE, Ciencia y Técnica, Comunicaciones 2001, Área Tecnología, Trabajo No. 62.
- 402) Laberinto de Acciones: Una Técnica Participativa Aplicada en un Contenido Matemático, M. C. Cardozo, A. Almirón, V. Carol, E. A. Castro, Página Internet de la UNNE, Comunicaciones Científicas y Tecnológicas 2002.
- 403) Estudio de Correlación Entre el Estado E y la Actividad Inhibitoria MAO de Santonas, M. B. Núñez, F. P. Magun, N. B. Okulik, E. A. Castro, XIII Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica, Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca, 6-10/4/02, Comunicación C42, p.174 Libro de Resúmenes.
- 404) La β -Ciclodextrina Sustituida como Selector Molecular y Enantiomérico. Cálculos Teóricos, D. J. Barbiric, E. A. Castro, ídem, Comunicación C8, p.157 Libro de Resúmenes.
- 405) Evaluación Estadística de los Resultados Obtenidos a Partir de la Aplicación de una Técnica Participativa en el Desarrollo de un Contenido Matemático, D. Leguiza P., M. C. Cardozo, A. Almirón, E. A. Castro, XVII Reunión Latinoamericana de Matemática Educativa (RELME 17), 21-25/7/03, Santiago, Chile, Código CB0105, Actas p.269.
- 406) Autoaprendizaje Aplicando Técnicas Participativas, ídem, Código CB0103, p.268.
- 407) El Proceso de Desarrollo Espiritual: Experiencia Científica o Fenomenología Exclusivamente Individual?, E. A. Castro, VII Working Sessions, OMETECA Institute, The Convergence of Science and Humanities, Pinamar, Buenos Aires, Argentina, 24-28/11/03.
- 408) La Detección, la Mensura y la Administración Empresarial del Conocimiento, E. A. Castro, III Encuentro de Reflexión sobre Liderazgo "Cómo Construir Liderazgo con Valores en Argentina", Instituto Universitario Naval, Sede del Departamento de Estudios Históricos Navales, Casa Amarilla, Buenos Aires, 24-25/10/03.
- 409) Métodos y Técnicas Participativas en el Proceso de Enseñanza-Aprendizaje de Química General en el Nivel Superior, Comunicación TG 03, Actas p.183, VI Jornadas Nacionales y III Internacionales de Enseñanza Universitaria de la Química, Facultad de Ingeniería y Colegio Nacional de la UNLP, La Plata, 28/9-1/10/03.
- 410) QSPR Modeling the Aqueous Solubility of Polychlorinated Biphenyls by Optimization of Correlation Weights of Local and Global Graph Invariants, E. A. Castro, A. A. Toropov, A. I. Nesterova, O. M. Nabiev, Internet Electronic Conference of Molecular Design 2003, IECMD 2003, November 23 – December 6, <http://www.biochempress.com>, Paper #42.
- 411) New Developments on Flexible Molecular Descriptors, IV Indo-US Workshop on Mathematical Chemistry, January 8-12, 2005, Pune, India.
- 412) QSPR Modeling of the Octanol/Water Partition Coefficient of Alcohols by Means of Optimization of Correlation Weights of Local Graph Invariants, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, A. A. Toropov, A. I. Nabiev, O. M. Nesterova,

- International Conference “Monitoring Systems and Novel Technologies for Detection/Removal of Pollutants in/from Ecosystems”, Hotel Crowne Plaza Panamericano, Buenos Aires, Argentina, 18-22/4/04.
- 413) Un Curso de Liderazgo en Instituciones Educativas y de Ciencia y Tecnología, IV Encuentro de Reflexión sobre Liderazgo, “Hacia una Cultura del Liderazgo con Valores en Argentina”, Instituto Universitario Naval, Casa Amarilla, Buenos Aires, 24-25/10/04.
- 414) Hidrólisis de Pesticidas Fosforados y Ésteres Análogos en Presencia de β -CD. Cálculos Semiempíricos, D. A. Barbiric, E. N. Coscarello, E. A. Castro, R. H. de Rossi, E. Buján, R. V. Vico, XXV Congreso Argentino de Química “Eduardo J. Bottani”, Fac. de Ingeniería, UNCPBA, Olavaria, Buenos Aires, 22-24/9/04, Libro de Actas Sección 4: Fisicoquímica, Comunicación 4-006.
- 415) Estudio QSPR de Momentos Dipolares de 35 Hidrocarburos, E. A. Castro, P. R. Duchowicz, ídem 4-007.
- 416) Predicción de Actividad Antimicrobiana de Terpenoides Mediante el Uso Teorías QSAR, F. Maguna, M. B. Núñez, N. B. Okulik, E. A. Castro, ídem 4-008.
- 417) Aplicaciones QSAR en Toxicidad de Mezclas Aromáticas, E. A. Castro, F. M. Fernández, P. R. Duchowicz, II Congreso Iberoamericano de Ambiente y Calidad de Vida y III Congreso de Ambiente y Calidad de Vida Catamarca 2004, Universidad Nacional de Catamarca, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Catamarca, 29-30/9/04.
- 418) QSPR Evaluation of Thermodynamic Properties of Acyclic and Aromatic Organic Compounds, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, F. M. Fernández, Internet Electronic Conference of Molecular Design 2004 (IECMD 2004), November 29-December 12, <http://www.biochempress.com>.
- 419) Isomerismo Geométrico y Protonación en Enaminonas de Cadena Abierta Seleccionadas por su Posible Actividad Antiepiléptica, J. C. Garro Martínez, G. N. Zamarbide, M. R. Estrada, E. A. Castro, XIV Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica, Termas de Río Hondo, Santiago del Estero, 2005, Comunicación A70.
- 420) Inhibición de la Hidrólisis de Pesticidas Fosforados en Presencia de Beta-Ciclodextrina. Cálculos Semiempíricos, D. A. Barbiric, E. N. Coscarello, E. A. Castro, Rita H. de Rossi, E. Buján, Raquel V. Vico, ídem, Comunicación A88.
- 421) Ordenamiento Parcial en QSPR de Propiedades Fisicoquímicas de Alcanos, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem, Comunicación A34.
- 422) Adsorción de Gases Simples sobre Materiales Carbonosos: Análisis de las Isotermas de Adsorción Experimentales y por Simulación, J. L. Vicente, A. Albesa, E. Fertitta, J. Llanos, E. A. Castro, L. Cascarini, ídem, Comunicación C128
- 423) Aplicación de los Pares de Átomos de Carhart en la Predicción de la Actividad de Compuestos Anticonvulsivantes Activos Frente al MET Test, A. Talevi, L. B. Blanch, E. A. Castro, I Workshop Argentino de Química Medicinal, División Química Medicinal, Asociación Química Argentina, Buenos Aires, 26-27/5/05.
- 424) QSAR de Inhibidores de la HIV-1 Transcriptasa Reversa, ídem.
- 425) QSAR para Activadores de Canales de Potasio, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem.
- 426) Complejación de Aluminio por Catecoles en Metanol y Etanol, M. I. Sancho, A. H. Jubert, S. E. Blanco, F. H. Ferretti, E. A. Castro, XIII ENQA y I CIAQA, Universida-

- de Federal de Fluminense, Niteroi, Río de Janeiro, Brasil, 12-16/9/05, Actas D075.
- 427) Algoritmo de Cuadrados Mínimos para la Búsqueda de Variables Óptimas, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, F. M. Fernández, Reunión Nacional de Física, AFA, La Plata, 2005.
- 428) Algunas Líneas de Investigación en Química Teórica y Física Molecular de la División Química del INIFTA, E. A. Castro, ídem.
- 429) Liderazgo y Literatura, Quinto Encuentro de “Liderazgo, Creatividad e Innovación en la Era del Conocimiento” Instituto Universitario Naval, Centro Naval Olivos, Buenos Aires, 10-11/11/05, 2005.
- 430) Construcción, Validación y Aplicación de un Modelo QSAR para la Búsqueda de Nuevos Agentes Antiepilépticos, A. Talevi, J. J. Prieto, L. E. Bruno-Blanch, E. A. Castro, XIII Jornadas de Jóvenes Investigadores de la AUGM, Asociación de Universidades Grupo Montevideo y Universidad Nacional de Tucumán, Centro Ing. Roberto Herrera, San Miguel de Tucumán, 31/8 al 2/9/05.
- 431) Análisis del Equilibrio Lactama-Lactima opr Espectrometría de Masa y Cálculos Teóricos, P. E. Allegretti, H. Saraví Cisneros, E. A. Castro, J. J. P. Furlong, XV Simposio Nacional de Química Orgánica, INIQO, Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca, Argentina, 6-8/11/05, Mar del Plata, Buenos Aires.
- 432) Simulación por dinámica molecular de una metalproteína azul de cobre, S. Fuentes, M. B. López, E. A. Castro, Actas P I-34, XXXI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 2005), Isla Margarita, Venezuela, 2-6/10/05.
- 433) Teoría del funcional de la densidad aplicada al estudio de la estabilidad de sistemas bimetalícos obtenidos en condiciones de subpotencial, M. B. López, E. A. Castro, A. J. Arvia, Actas Actas P I-33, ídem.
- 434) Estudio teórico de la deshidrogenación del ciclopenteno sobre la superficie de Ni(100) y Ni(111), N. C. Comelli, M. B. López, E. A. Castro, Actas P II-75, ídem.
- 435) Estudio estructural del complejo de Al(III) con 1,2-bencenodiol. Efectos de solvente, M. I. Sancho, A. H. Jubert, S. E. Blanco, F. H. Ferretti, E. A. Castro, ídem, Actas P II-31
- 436) Estudio teórico de la deposición de átomos de plomo sobre un electrodo cristalino de Pt(1000), M. B. López, E. A. Castro, A. J. Arvia, Congreso Binacional SAM/CONAMET 2005, Sociedad Chilena de Metalurgia y Materiales y Asociación Argentina de Materiales, Universidad Nacional de Mar del Plata, Facultad de Ingeniería, Mar del Plata, Buenos Aires, 2005.
- 437) Modelado QSAR para Predecir la Difusión Pasiva de Sustancias Químicas a través de la Barrera Hematoencefálica y la Neurotoxicidad de Drogas Anticonvulsivas, A. Talevi, J. J. Prieto, J. E. Elvira, E. A. Castro, L. E. Bruno-Blanch, First South American TIAFT Regional Meeting, La Plata, 24-26/10/05.
- 438) La Informática en el Diseño Curricular de Química en Ciencias Agrarias, O. Ocampo, L. E. Cascarini de Torre, Bienal de Ciencia y Tecnología. El Conocimiento en Acción, 8-10/11/05, Comisión de Investigaciones Científicas, Buenos Aires, Sede del Jockey Club, La Plata, Bs. As.
- 439) Aspergillus Níger y Micronutrientes: Reseña de los Resultados Obtenidos, O. Ocampo, G. Dal Bello, L. E. Cascarini de Torre, E. A. Castro, ídem.
- 440) Liderazgo y Literatura en la Era del Conocimiento, The VIII Working Conference on the Relations Between the Humanities and Science, October 17-21, 2005, Mexico City, Mexico, The OMETECA Institute and Universidad Autónoma Metropolitana.

- 441) Structural and Spectroscopic Study of 3,6-Dibutanoic-1,2,4,5-tetroxane, J. M. Romero, M. I. Profeta, N. L. Jorge, M. E. Gómez-Vara, E. A. Castro, A. J. Jubert, - International Conference on Computational Methods in Sciences and Engineering 2004 (ICCMSE-2004), Athens-Vouliagmeni, Greece, 19-23/11/2004.
- 442) Generation of a New QSAR Model for Anticonvulsant Activity and its Application in Virtual Screening, CSPS IX Annual International Symposium, "Current Scientific Regulatory Challenges in Drug Development and Safety", Canadian Society of Pharmaceutical Sciences, Crowne Plaza, Ottawa, Ontario, Canada, May 24-27, 2006.
- 443) Application of Molecular Topology in Descriptor-based Virtual Screening for the Discovery of new Anticonvulsant Agents, XIX International Symposium of Medicinal Chemistry, European Federation of Medicinal Chemistry, 29/8 al 2/9/06, Estambul, Turquía.
- 444) Adsorción de hidrógeno sobre nanoestructuras de Molibdeno. Estudio teórico, V. Ferraresi Curotto, S. Fuentes, L. B. López, R. Pis Díez, E. A. Castro, Congreso Binacional CONAMET/SAM-2006, Universidad de Chile, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Santiago, Chile.
- 445) Propiedades catalíticas de las superficies de Cu(100) y Ni(100) frente a la adsorción de etanol. Estudio teórico, N. C. Comelli, M. B. López, E. A. Castro, ídem.
- 446) Complejación de Zn(II) por catecol en solventes hidroxílicos, M. I. Sancho, A. H. Jubert, S. E. Blanco, F. H. Ferretti, E. A. Castro, XXVI Congreso Argentino de Química, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis, San Luis, Argentina, 13-15/9/06, Comunicación 4-073.
- 447) La enseñanza de las ciencias experimentales en la provincia de Catamarca. Primera etapa: Diagnóstico de situación, N. C. Comelli, M. B. López, E. A. Castro, ídem, Comunicación 10-046.
- 448) Estudio comparativo de los complejos entre beta-ciclodextrina modificada con L-triptofano y los isómeros 1- y 2-adamantol, E. N. Coscarello, D. A. Barbiric, E. A. Castro, ídem, Comunicación 4-027.
- 449) Análisis QSAR para una serie de quinolonas antimicrobianas, M. B. Núñez, F. P. Maguna, N. B. Okulik, E. A. Castro, ídem, Comunicación 4-108.
- 450) Estimación del efecto solubilizador de fósforo sobre plantas de tomate, por acción del *Aspergillus Niger*, O. Ocampo, G. Dal Bello, L. Cascarini de Torre, E. A. Castro, ídem, Comunicación 1-023.
- 451) La importancia del laboratorio en la enseñanza de la Química, O. Ocampo, L. Cascarini de Torre, E. A. Castro, ídem, Comunicación 10-043.
- 452) Estudio QSPR de puntos de ebullición para moléculas pequeñas $CH_wF_xCl_yBr_z$, P. R. Duchowicz, C. Franca, E. A. Castro, R. Pis Díez, Comunicación 4-091, ídem.
- 453) Aplicaciones QSPR sobre calores de combustión de ácidos orgánicos, P. R. Duchowicz, J. C. M. Garro, M. F. Andrada, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem, Comunicación 4-090.
- 454) Predicciones QSAR de la actividad antifungal para compuestos heterocíclicos, P. R. Duchowicz, M. G. Vitale, E. A. Castro, ídem, Comunicación 6-029.
- 455) Predicción de toxicidad de compuestos fenólicos mediante QSAR, P. R. Duchowicz, A. G. Mercader, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem, Comunicación 8-052.
- 456) Estudio experimental y teórico de la solvatación y propiedades ácido-base de 1,2-dihidroxibenceno, M. I. Sancho, F. H. Ferretti, E. A. Castro, ídem, Comunicación 4-094.

- 457) Estudio QSPR sobre solubilidades acuosas de sustancias orgánicas, P. R. Duchowicz, A. Talevi, C. Bellera, E. A. Castro, L. B. Blanch, ídem, Comunicación 6-031.
- 458) Mejora de un modelo QSAR aplicado a la actividad anti-HIV por medio de grafos locales invariantes optimizados por los pesos de correlación (Parte II), D. J. Marino, E. A. Castro, ídem, Comunicación 4-087.
- 459) Selección de nuevos agentes anticonvulsivos por aplicación combinada de screening virtual 2D y análisis estructural 3D, A. Talevi, L. Gavernet, C. Bellera, E. A. Castro, L. B. Blanch, ídem, Comunicación 6-035.
- 460) Espectrometría de masa de cetoésteres. Evidencias de su tautomerismo, P. E. Allegretti, E. A. Castro, J. J. P. Furlong, ídem, Comunicación 3-001.
- 461) Síntesis y espectroscopía IR del 3,6-dietanol-1,2,3,4-tetroxano, M. B. Reguera, J. Romero, N. L. Jorge, E. A. Castro, M. E. Gómez-Vara, ídem, Comunicación 4-115.
- 462) Estudios QSAR de peróxidos antimaláricos, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, IV Encuentro Nacional de Investigadores Relacionados con Sustancias Peroxídicas, INFIQC, Departamento de Físicoquímica, Universidad Nacional de Córdoba, Vaquerías, Valle Hermoso, Córdoba, 29-30/6 y 1/7/06.
- 463) Búsqueda de productos naturales con actividad antiepiléptica mediante metodologías combinadas QSAR 2D y 3D, A. Talevi, L. Gavernet, E. A. Castro, L. B. Blanch, XIV Jornadas de Jóvenes Investigadores, Universidades Estaduales de Campinas, Brasil, 13-15/9/06.
- 464) QSPR study on non-ionic organic pesticides, P. R. Duchowicz, M. P. González, M. Teixeira, A. M. Helguera, E. A. Castro, VIII J. J. Giambiagi Winter School Part A, "Clusters, Molecules, Biomolecules and Materials", 24-28/7/06, Departamento de Física, FCEyN, UBA, Ciudad Universitaria, Pabellón I, Buenos Aires, Abstract #3, p. 16. <http://www.giambiagi.df.uba.ar/2006A/>.
- 465) QSPR study on fluorophilicity, P. R. Duchowicz, A. G. Mercader, M. A. Sanservino, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem, Abstract #4, p. 16.
- 466) Density functional study of structures and electronic properties of small molybdenum clusters, A. S. Fuentes, V. Ferraresi Curotto, M. B. López, R. Pis Díez, E. A. Castro, ídem.
- 467) A density functional theory study on chemisorption of ethanol on Cu(100) and Ni(100) surfaces, N. C. Comelli, M. B. López, A. H. Jubert, E. A. Castro, ídem.
- 468) El proyecto OMETECA sobre la convergencia de las ciencias, E. A. Castro, II Jornadas Interdisciplinarias "Fuentes e Interdisciplina", Instituto Interdisciplinario de Historia y Ciencias Humanas, CONICET, Buenos Aires, 24-26/10/06.
- 469) Predicciones QSPR de constantes de Henry aire-agua en hidrocarburos, P. R. Duchowicz, J. C. M. Garro, E. A. Castro, III Congreso Iberoamericano de Ambiente y Calidad de Vida, Catamarca 2006.
- 470) Estudio QSAR de la hormona juvenil en mosquitos, P. R. Duchowicz, A. G. Mercader, M. A. Sanservino, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem.
- 471) A preliminary theoretical study of antiepileptic drugs, J. C. Garro-Martínez, M. F. Andrada, M. R. Estrada, E. A. Castro, G. N. Zamarbide, II International Szent-Györgyi Symposium. The Structure of Life. A Multidisciplinary THINKposium Aiming to Establish a Common Language for Mutual Understanding, University of Szeged, Hungary, 24-26/8/06.
- 472) Application of Molecular Topology in Descriptor-based Virtual Screening for the Discovery of new Anticonvulsant Agents, A. Talevi, C. L. Bellera, E. A. Castro, L. B.

- Blanch, XIX International Symposium of Medicinal Chemistry, Istanbul Turkey, 29/8 - 2/9/06, European Federation of Medicinal Chemistry and Turkish Association of Medicinal Chemistry, Drugs of the Future, Vol.31, Suppl. A, Abstracts, página 188.
- 473) Teoría del Funcional de la Densidad Aplicada al Estudio de las Propiedades Estructurales y Electrónicas de Clusters de Molibdeno, A. S. Fuentes, V. Ferraresi Curotto, M. B. López, R. Pis Díez, E. A. Castro, 91° Reunión Nacional de Física, Asociación Física Argentina, Filial San Luis, Merlo, San Luis, 25-29/9/06, Comunicación # 249, Libro de Resúmenes p. 98.
- 474) Aplicación de Algoritmos Matemáticos para el Estudio de la Distribución de Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos Asociado a Material Particulado en Aire, D. Marino, L. Massolo, A. Mueller, O. Herbarth, E. A. Castro, A. E. Ronco, I Simposio SETAC Ecotoxicología y Contaminación, Society of Environmental Toxicology & Chemistry, Hotel Los Cocos, Córdoba, Argentina, 30/11 al 1/12/06.
- 475) Estado de Transición en la Hidrólisis del Acetato de 3-metil, 4-nitrofenilo Mediada por la β -Ciclodextrina, E. N. Coscarello, D. A. Barbiric, E. A. Castro, P. Venuvanalingam, XV Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica, Comunicación H-41, Libro de Actas p.116.
- 476) Estudio del Efecto Solvente sobre el Equilibrio de Disociación Ácido-base de 4-(OH)-Benzofenona mediante RP-HPLC, M. I. Sancho, S. E. Blanco, E. A. Castro, F. H. Ferretti, ídem, Comunicación C-55, Libro de Actas, p.65.
- 477) Aplicación de Metodologías Mixtas para la Búsqueda de Compuestos con Acción Anticonvulsiva: Función Discriminante Topológica y 3D_QSAR, A. Talevi, L. Gavernet, E. A. Castro, L. B. Blanch, ídem, Comunicación H-4, Libro de Actas p.112.
- 478) Estudio QSPR de Constantes de Velocidad Bimoleculares, P. R. Duchowicz, C. J. Cobos, E. A. Castro, ídem, Comunicación H-45, Libro de Actas p.116.
- 479) Estudio QSPR de las Propiedades Termodinámicas de Compuestos Acíclicos y Aromáticos, C. Franca, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, ídem, Comunicación H-44, Libro de Actas p.116.
- 480) Estudio QSPR de constantes de desactivación física y química de oxígeno singlete por compuestos heterocíclicos, A. G. Mercader, F. M. Cabrerizo, P. R. Duchowicz, A. H. Thomas, E. A. Castro, F. M. Fernández, ídem, Comunicación H38, Libro de Actas, página 115.
- 481) Estudio Calorimétrico y Computacional del Diperóxido de Ciclohexanona, J. M. Romero, S. Bustillo, H. E. Ramírez Maisulsa, N. L. Jorge, M. E. Gómez-Vara, A. H. Jubert, E. A. Castro, ídem, Comunicación G-01, Libro de Actas p.108.
- 482) Un Estudio Teórico Preliminar para el Desarrollo de Drogas Antiepilépticas, J. C. Garro Martínez, M. F. Andrada, M. R. Estrada, E. A. Castro, G. N. Zamarbide, ídem, Comunicación H-33, Libro de Actas p.115.
- 483) Estudio Teórico de la Adsorción y Descomposición del Etanol en Superficies de Ni(100) y Ni(111), N. C. Comelli, M. B. López, A. H. Jubert, E. A. Castro, Comunicación H-8, Libro de Actas p.112.
- 484) Application of the replacement method as a novel variable selection strategy in QSAR. Morales A., Duchowicz P. R., Cabrera MAP, Castro E. A., Cordeiro MNDS, Pablo R. Eduardo A. González MP, poster presented at *encontro REQUIMTE-Rede de Química e Tecnologia*, Fátima, Portugal (2006).
- 485) A successful virtual screening application: Prediction of anticonvulsant activity of

- methyl paraben and propyl paraben, A. Talevi, E. A. Castro, L. Bruno-Blanch, I Reunión Latinoamericana de Química Medicinal (*LatQuiMed*), 22-25/4/07, Montevideo, Uruguay.
- 486) Introduction and progress in linear QSAR/QSPR modeling, A. G. Mercader, P. R. Duchowicz, F. M. Fernández, E. A. Castro, 2007 NSF Pan-American Advanced Studies Institute on Sustainability & Green Chemistry, American Chemical Society, Education Division and ACS Green Chemistry Institute, Universidad Iberoamericana, México D.F., México, 29/5 – 10/6/07.
- 487) SCIPCM Study of the solvent effect on the conformations and keto-enol tautomerism of dihydroresorcinol, M. I. Sancho, A. H. Jubert, S. Blanco, F. H. Ferretti, E. A. Castro, IXth Latin American Conference on Physical Organic Chemistry, September 30 – October 5, 2007, Los Cocos, Córdoba, Argentina.
- 488) Aplicación de descriptores derivados de la teoría de grafos en el desarrollo de modelos matemáticos para predecir neurotoxicidad y biodisponibilidad de fármacos anticonvulsivos a nivel del sistema nervioso central, A. Talevi, C. Bellera, E. A. Castro, L. E. Bruno-Blanch, XV Jornadas de Jóvenes Investigadores, Asociación de Universidades, Grupo Montevideo, “Investigación, Integración y Desarrollo”, 24-26/10/07, Campus de la UNA, Paraguay.
- 489) Aplicación de algoritmos matemáticos para el estudio de la distribución de hidrocarburos aromáticos policíclicos asociado a material particulado en aire. Parte II, D. Marino, L. Massolo, A. Mueller, O. Herbarth, E. A. Castro, A. E. Ronco, II Simposio SETAC Ecotoxicología y Contaminación, Society of Environmental Toxicology & Chemistry, 2007.
- 490) The squarographites: A lesson in the chemical topology of tessellations in 2- and 3-dimensions, M. J. Bucknum, E. A. Castro, WSEAS Conferences, Cairo, Egypt, 29-31/12/07.
- 491) Desarrollo de una técnica de cuantificación de hormonas de expresión sexual en peces mediante HPLC-MS, D. Marino, P. Carriquiriborde, E. A. Castro, A. Ronco, V Congreso Iberoamericano de Física y Química Ambiental.
- 492) Introducción y avances en las teorías QSAR/QSPR, A. G. Mercader, P. R. Duchowicz, F. M. Fernández, E. A. Castro, Semana de la Divulgación del Conocimiento Científico, Fac. Cs. Exactas, UNLP, 4-11/12/07.
- 493) Density Functional Study applied to the study of the reactivity of Pt surfaces modified by Ni nanoparticles, E. Valle-Ortiz, M. B. Lòpez, E. A. Castro, VIII J. J. Giambiagi Winter School Part A, “Clusters, Molecules, Biomolecules and Materials”, 24-28/7/06 Departamento de Física, FCEyN, UBA, Ciudad Universitaria, Pabellón I, Bs. As.
- 494) Reactivity of surfaces Pt(100) and Pt(111) modified by nanoparticles of Ni, E. V. Ortiz, M. B. Lòpez, E. A. Castro, *ibid.*
- 495) Estudio DFT de la reactividad de superficies de Pt modificadas por la adsorción de nanopartículas metálicas, E. V. Ortiz, M. B. Lòpez, E. A. Castro, 92 Reunión Nacional de Física, Salta, 24-28/9/07.
- 496) Reactividad de la superficie de Pt(100) modificada por agregados de Ni, Reunión Nacional de Física “Sólidos 2007”, Huerta Grande, Córdoba, 6-9/11/07.
- 497) Estudio QSPR del efecto contaminante de bifenilos policlorados, A. G. Mercader, P.R. Duchowicz, F. M. Fernández, E. A. Castro, V Congreso Iberoamericano de Física y Química Ambiental, Sociedad Iberoamericana de Física y Química Ambiental, Mar del Plata, 14/18-04-08, Libro de Resúmenes Código 019.

- 498) Las capacidades comunicacionales en el desempeño profesional del Ingeniero Industrial, E. A. Castro, X Congreso/sesión de trabajo sobre las relaciones entre las humanidades y la ciencia, OMETECA Institute, University of South Florida, Campus of Saint Petersburg, Florida, USA, 9-14/06/08.
- 499) QSAR Models based on lipophilicity for quinoxaline 1,4-di-N-oxides as antimycobacterial agents, E. Vicente, P. R. Duchowicz, A. G. Mercader, S. Pèrez-Silanes, I. Aldana, F. M. Fernández, A. Monge, E. A. Castro, - XXth International Symposium on Medicinal Chemistry, EFMC-ISMIC 2008, August 31, September 4, Vienna, Austria.
- 500) QSAR Analysis of 3-arylquinoxaline-2-carbonitrile 1,4-di-N-oxide derivatives as antiplasmodia agents, E. Vicente, P. R. Duchowicz, A. Burguete, B. Solano, R. Villar, S. Pèrez-Silane, I. Aldana, E. A. Castro, L. Vivas, A. Monge, *ibid.*
- 501) Actividad anticonvulsiva en enamionas anilladas. Un estudio QSAR, J. C. Garro Martínez, P. R. Duchowicz, M. R. Estrada, G. N. Zamarbide, E. A. Castro, XXVII Congreso Argentino de Química, 17-19/9/08, San Miguel de Tucumán, Comunicación 6-020.
- 502) Estudio QSAR de la actividad anti-mitótica en derivados de combretastina, P. R. Duchowicz, C. Franca, R. Pis Díez, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Ibíd.*, Comunicación 4-123.
- 503) Nuevo modelo QSPR para la predicción de solubilidad acuosa de compuestos drug-like, P. R. Duchowicz, A. Talevi, L. E. Bruno-Blanch, E. A. Castro, *ibid.*, Comunicación 6-033.
- 504) Aplicación del análisis discriminante en el modelado de actividad anticonvulsiva en el ensayo scPTZ, A. L. Buzzi, A. Talevi, C. L. Bellera, E. A. Castro, L. Bruno-Blanch, *Ibíd.*, Comunicación 6-028.
- 505) Avances en la determinación del perfil farmacológico del conservante antibacteriano propilparabeno: Actividad anticonvulsiva en ensayos MES y scPTZ, A. Talevi, A. Enrique, A. Gregorini, R. Greco, E. A. Castro, L. Bruno-Blanch, *ibid.*, Comunicación 6-008.
- 506) Complejos de beta-ciclodextrina y gamma-ciclodextrina con rojo nilo. Análisis teórico semiempírico, R. Hojvat, D. A. Barbiric, E. A. Castro, *ibid.*
- 507) Estudio QSAR de la actividad anti-alimentaria de flavonoides frente a *Spodoptera litura*, G. P. Romanelli, M. A. Ocsachoque, J. C. Autino, D. O. Bennardi, D. M. Ruiz, E. A. Castro, *ibid.*, Comunicación 4-008.
- 508) Relaciones estructura-propiedades espectroscópicas (QSPR) para derivados de 1,2,5-tiadiazol 1,1-dióxido, P. R. Duchowicz, M. F. Rozas, M. V. Mirífico, F. M. Fernández, E. A. Castro, *ibid.*, Comunicación 4-040.
- 509) Estudio QSPR del efecto del solvente en la desactivación de la emisión 5D0→7F2 del Eu(6,6,7,7,8,8,8-heptafluoro-2,2-dimetil-3,5-octadionato)3, A. G. Mercader, P. R. Duchowicz, F. M. Fernández, E. A. Castro, E. Wolcan, *Ibíd.*, Comunicación 4-009.
- 510) Caracterización teórica de las propiedades estructurales y de reactividad química de amidas derivadas del ácido valproico con actividad antiepiléptica, N. C. Comelli, P. Fuentealba, A. H. Jubert, E. A. Castro, *Ibíd.*, Comunicación 6-032.
- 511) Isotermas de adsorción de 4-X-benzofenonas sobre una columna de ODS. Efecto de la composición de la fase móvil, M. I. Sancho, S. E. blanco, F. H. Ferretti, E. A. Castro, *ibid.*, Comunicación 4-021.
- 512) Adsorción de hidrógeno sobre una superficie de Pt(100) modificada por nano-

- partículas de Ni, E. del Valle Ortiz, M. B. López, E. A. Castro, II Encuentro de Jóvenes Investigadores en Ciencia y Técnica de Materiales, Asociación Argentina de Materiales, Posadas, Misiones, 16-17/10/08.
- 513) Análisis QSPR de densidades de mezclas líquidas binarias, P. R. Duchowicz, M. A. Ocsachoque, M. G. Vitale, E. A. Castro, IV Congreso Iberoamericano de Ambiente y Calidad de Vida, Universidad Nacional de Catamarca, 2008, Actas, p.35.
- 514) Estudio QSPR de índices de retención cromatográficos en hidrocarburos aromáticos policíclicos, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, ídem, Actas, p. 213.
- 515) Estudios QSAR de di-N-óxidos de quinoxalinas en el tratamiento de la malaria, P. R. Duchowicz, E. Vicente, A. Burguete, B. Solano, R. –Villar, S. Pérez-Silanes, I. Aldana, E. A. Castro, L. Vivas, A. Monge, III Workshop Argentino de Química Medicinal, División Química Medicinal, AQA, Los Cocos, Córdoba, 10-11/11/2008.
- 516) Estudios QSAR sobre la lipofilicidad de di-N-óxidos de quinoxalinas en el tratamiento de tuberculosis, P. R. Duchowicz, E. Vicente, A. G. Mercader, S. Pérez-Silanes, I. Aldana, F. M. Fernández, E. A. Castro, A. Monge, íbid.
- 517) Spectroscopic properties of the amide group in valpromide and derivatives with antiepileptic activity, N. C. Comelli, N. E. Massa, A. H. Jubert, E. A. Castro, Shedding Light on Disease: Optical Diagnosis for the New Millennium, SPC 2008 Conference, Technological Park, Universidade do Vale do Paraiba, Sao José dos Campos, Sao Paul, Brasil, 25-29/10/08.
- 518) Reactivity of Pt(100) surface modified by Ni nanoclusters, E. V. Ortiz, M. B. López, E. A. Castro, XIX Latin American Symposium on Solid State Physics, Puerto Iguazú, 5-9/10/08.
- 519) Algunos métodos post-Hartree-Fock de cálculo de estructuras electrónicas moleculares, V Encuentro Nacional de Investigadores en Temas Relacionados con Sustancias Peroxídicas (5° ENISP), Facultad de Ingeniería, UNCPBA, Olavarría, Buenos Aires, 23-24/10/08), Actas p.24.
- 520) Reactividad de nanocluster de Ni soportado sobre superficies Pt(100) y Pt(111), E. I. V. Ortiz, M. B. López, E. A. Castro, IV Jornadas de Ciencia y Tecnología de Facultades de Ingeniería del NOA, Santiago del Estero, Diciembre 2008.
- 521) Topological molecular computer design (TOMOCOMD), a promising approach for computer aided molecular design: Theoretical assessment of a novel method for virtual screening of anthelmintic drugs, Y Marrero, F. Torrens, E. A. Castro, O. Olazabal, H. S. Serrano, E. J. Rodríguez, A. del Valle, A. M. Sánchez, V. Romero, Cuba Farmacia 2004, VI Encuentro Iberoamericano sobre las Ciencias Farmacéuticas y Alimentarias.
- 522) Protein quadratic indices of the “Macromolecular pseudograph’s α -carbon atom adjacency matrix”. Prediction of ARC repressor alanine mutant’s stability, Y. Marrero Ponce, R. M. Marrero, E. A. Castro, R. R. de Armas, H. G. Díaz, V. R. Zaldívar, F. Torrens, íbid.
- 523) Protein linear indices in bioinformatic studies. I- Prediction of protein stability effects of a complete set of alanine substitutions in arc repressor, J. A. C. Garit, Y. M. Ponce, R. M. Marrero, V. R. Zaldívar, F. Torrens, E. A. Castro, VI Congreso Cubano de Farmacología y Terapéutica, Habana, Cuba, 12/10/05. J. Health Professional and Technicians in Santiago, Cuba, MEDISAN 9(4) (2005).
- 524) Application of linear indices to predict antibacterian activity and physical and Chemical properties of organic compounds, J. A. C. Garitz, Y. M. Ponce, F. Torrens,

- V. R. Zaldívar, E. A. Castro, *ibid.*
- 525) Adsorción de etanol sobre un cluster de aleación de bajo contenido ambiental, G. B. Díaz, M. B. López, E. A. Castro, IV Congreso Iberoamericano de Ambiente y Calidad de Vida, Universidad Nacional de Catamarca, 2008, Actas p.8.
- 526) Adsorción y reactividad de hidrocarburos sobre una aleación de nanopartículas de Pt.Ni, E. –Valle Ortiz, M. B. López, E. A. Castro, IV Congreso Iberoamericano de Ambiente y Calidad de Vida, Universidad Nacional de Catamarca, 2008, Actas p. 9.
- 527) Caracterización de una superficie de aleación Pt.Ni a través de descriptores de reactividad. Efectos de un campo eléctrico, M. B. López, E. A. Castro, A. J. Arvia, IV Congreso Iberoamericano de Ambiente y Calidad de Vida, Universidad Nacional de Catamarca, 2008, Actas p.90.
- 528) El colorante rojo nilo en complejos con beta y gamma-ciclodextrina. II- Análisis mecanocuántico, R. Hojvat, D. J. Barbiric, E. A. Castro, Comunicación I39, XVI Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica, Asoc. Arg, de Inv. Fisicoquímica y Universidad Nacional de Salta, Salta, 18-21/05/09.
- 529) Estudio teórico de las propiedades estructurales y de reactividad de las formas conformacionales más estables del ácido valproico y sus derivados funcionales, N. C. Comelli, P. Fuentealba, A. H. Jubert, E. A. Castro, Comunicación I20, *ibid.*
- 530) Teoría del Funcional de la Densidad aplicada al estudio de nanoaleaciones binarias Pt-Ag, E. del Valle Ortiz, M. B. López, E. A. Castro, *ibid.*, Comunicación D27, *ibid.*
- 531) Estudio teórico de derivados de 1,4-di-N-óxidos de quinoxalinas, P. R. Duchowicz, M. G. Vitale, E. Vicente, R. Pis-Díez, A. Monge, E. A. Castro, Comunicación I27, *ibid.*
- 532) Estudio QSPR de puntos de ebullición normales de compuestos orgánicos, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, Comunicación I28, *ídem.*
- 533) Estudio teórico del efecto solvente en las reacciones de oxidación de alilmetildisulfuro, un componente del ajo, M. Andrada, J. C. Garro Martínez, G. Zamarbide, M. E. Estrada, I. Csizmadia, E. A. Castro, *ibid.*, Comunicación I3.
- 534) Estudio QSAR de actividad anticonvulsiva aplicado a enaminonas de cadena abierta, J. C. Garro Martínez, P. R. Duchowicz, M. R. Estrada, G. Zamarbide, E. A. Castro, Comunicación I36, *íbid.*
- 535) Estudio QSPR de las constantes de disociación de compuestos reactivos para el uso farmacológico, A. G. Mercader, M. Goodarzi, P. R. Duchowicz, F. M. Fernández, E. A. Castro, Comunicación I51, *ibid.*
- 536) Estudio teórico de la adsorción de metanol sobre una nanoaleación Ni-Cu, G. B. Díaz, M. B. López, E. A. Castro, Comunicación I83, *ibid.*
- 537) Respuesta metabólica global en bilis de *O. bonaerensis (pises)* expuestos al piretroide cipermetrina, analizadas mediante HPLC-MS, D. J. Marino, A. E. Ronco, E. A. Castro, P. Carriquiriborde, II Simposio SETAC Ecotoxicología y Contaminación, Society of Environmental Toxicology & Chemistry, Lima, Perú, 05/10/09, Poster 7-12.
- 538) Predicción de mutagénesis en muestras de material particulado por optimización de modelos QSAR sensibles a concentración, D. J. Marino, L. Massolo, E. A. Castro, A. E. Ronco, *Ibid.*, Poster 6-15.
- 539) QSAR Models for quinoxaline 1,4-N-oxide derivatives as antitrypanosomal agents, E. Vicente, P. R. Duchowicz, S. Pérez-Silanes, I. Aldana, E. A. Castro, H. Cerecetto, M. González, A. Monge, *Frontiers in Medicinal Chemistry – Emerging*

- Targets, Novel Candidates and Innovative Strategies, European Federation for Medicinal Chemistry and Sociedad Española de Química Terapéutica, Barcelona, October 4-6, 2009, ID Communication 102, panel number: 95.
- 540) Estudio teórico de nanoaleaciones binarias Ag-Pt, E. del Valle Ortiz, M. B. López, E. A. Castro, Congreso COM/CONAMET 2009, Buenos Aires, 19-23/09/2009.
- 541) Estudios QSAR de naftoquinonas en el tratamiento del cáncer, E. L. Bonifazi, P. R. Duchowicz, L. G. León, M. C. Vega-Hernández, J. M. Padrón, G. Burton, E. A. Castro, R. I. Misico, XVII Simposio Nacional de Química Orgánica, SAIQO, Mendoza, 15-18/11/09.
- 542) Cómo estimar la capacidad predictiva de un modelo químico-matemático: Un problema de muestreo, A. Talevi, C. L. Bellera, E. A. Castro, L. Bruno-Blanch, XVII Jornadas de Jóvenes Investigadores, Facultad de Ciencias de la Administración y Facultad de Ciencias de la Alimentación, UNER, Concordia, Entre Ríos, 27-29/09/09.
- 543) Actividad anticonvulsiva en enamionas anilladas, J. C. Garro, G. N. Zamarbide, E. A. Castro, P. R. Duchowicz, M. R. Estrada, XXXV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL), San Andrés, Colombia, 18-22/09/2009, Libro de Resúmenes p. 58, Stand 8.
- 544) Teoría del Funcional de la Densidad de espín polarizado aplicado al estudio de clusters bimetalicos, E. V. Ortiz, M. B. López, E. A. Castro, *ibid.*, p. 71, Stand 37.
- 545) Estudio QSAR sobre inhibidores de enzimas perjudiciales para la salud, J. García, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, - IV Jornadas de Ciencia y Técnica, 2009, Facultad de Cs. Exactas, UNLP.
- 546) Teoría del funcional de la densidad aplicada al estudio de nanoaleaciones binarias Pt-Ag, E. V. Ortiz, M. B. López, E. A. Castro, XVI Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica, 18-21/05/09, Salta.
- 547) Determinación de indicadores de reactividad de sistemas binarios Ag-Pt, E. V. Ortiz, M. B. López, E. A. Castro, 94° Reunión Anual de Física, AFA, 14-18/09/09, Rosario, Santa Fe.
- 548) Caracterización mediante indicadores de reactividad de nanoaleaciones binarias Pt_xAg_{10-x} , E. V. Ortiz, M. B. López, E. A. Castro, Congreso Regional Norte Grande de Ciencia y Tecnología, 7-9/10/09, Catamarca.
- 549) La deslocalización electrónica en ácido valproico y nuevos derivados antiepilépticos, N. C. Comelli, R. Lovaina, A. H. Jubert, E. A. Castro, Segundas Jornadas Universitarias de Ciencias Exactas y Naturales (JUCEN) – Química, 2009, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, San Fernando del Valle de Catamarca, 10-11/12/2009, Resolución F.C.E. y N. No. 267/09.
- 550) Identificación *in silico* de metabolitos biliares en pejerreyes expuestos a cipermetrina a partir de datos generados por HPLC-DAD-MS, D. J. Marino, P. Carriquiriborde, A. E. Ronco, E. A. Castro, III Congreso Argentino de la Sociedad de Toxicología y Química Ambiental (III SETAC), 12-14/05/10, Santa Fe, Argentina
- 551) A theoretical study of a family of 2-benzyl-3-methylquinoxaline 1,4-di-N-oxide derivatives, E. Vicente, P. R. Duchowicz, M. G. Vitale, S. Pérez-Silanés, I. Aldana, E. A. Castro, R. Pis-Díez, A. Monge, Poster Communication PC.212, EFMC-ISMC 2010, XXIst International Symposium on Medicinal Chemistry.
- 552) Filosofía mea, Cercul Stiintific Studentesc, “Cercul Principiilor”, Universitatea de Vestdin Timisoara, Facultatea de Chimie-Biologie-Geografie, 11 Noiembrie 2009.
- 553) Reactividad de nanoclusters de oro soportados sobre óxido de magnesio, E. Valle

- Ortiz, M. B. López, E. A. Castro, Ingeniería 2010, Argentina, Buenos Aires, 17-20/10/10, Capítulo Tecnologías de Información y Comunicación (TICs).
- 554) Estudio QSAR sobre inhibidores de enzimas perjudiciales para la salud, J. García, P. R. Duchowicz, F. M. Fernández y E. A. Castro, Sección Química Teórica y Computacional, Comunicación 015, XVIII Congreso Argentino de Química y IV Workshop de Química Medicinal, AQA y Universidad Nacional de Lanús, Lanús, Buenos Aires, 13-16/9/10.
- 555) Estudio QSPR del ácido valproico y derivados funcionales, N. C. Comelli, P. R. Duchowicz, A. H. Jubert y Eduardo A. Castro, Sección Química Física, Comunicación 038, *ibid.*
- 556) Adsorción de benzofenonas sustituidas: Efecto de la composición de la fase móvil sobre la constante de Henry, M. I. Sancho, S. E. Blanco, E. A. Castro, Sección Química Física, Comunicación 034, *ibid.*
- 557) Análisis experimental y teórico del complejo de inclusión entre 2-Cl-benzofenona y alfa-ciclodextrina, M. I. Sancho, E. I. Gasull, S. E. Blanco y E. A. Castro, Sección Química Física, Comunicación 036, *ibid.*
- 558) Complejos de calixarenos analizados mediante Dinámica Molecular, R. Hojvat, D. A. Barbiric, A. S. de Araujo, A. Danil de Namor y E. A. Castro, Sección Química Física, Comunicación 026, *ibid.*
- 559) Estequiometría y constante aparente de formación del complejo entre la 2-Cl-benzofenona y la alfa-ciclodextrina por RP HPLC, M. I. Sancho, E. I. Casull, S. E. Blanco, E. A. Castro, Sección Química Física, Comunicación 035, *ibid.*
- 560) Predicción de la actividad antimalárica de la familia de la artemisina con la aproximación QSAR, J. Camino, P. R. Duchowicz, F. M. Fernández y E. A. Castro, Sección Química Medicinal, Comunicación 005, *ibid.*
- 561) Predicción de la permeabilidad intestinal de fármacos mediante métodos QSPR lineales y no lineales, A. Talevi, M. Goodarzi, E. V. Ortiz, P. R. Duchowicz, C. L. Bellera, G. Pesce, E. A. Castro y L. Bruno-Blanch, Sección Química Medicinal, Comunicación 058, *ibid.*
- 562) Aplicaciones QSPR en aminogramas de jugos cítricos naturales y concentrados, P. R. Duchowicz, M. Giraud, E. A. Castro y A. B. Pomilio, Sección Química Alimentaria, Comunicación 038, *ibid.*
- 563) Agua, salud y educación, O. Ocampo y E. A. Castro, V Congreso Iberoamericano de Ambiente y Calidad de Vida y VI Congreso de Ambiente y Calidad de Vida, Fac. Cs. Exactas, UNCatamarca, 27-29/9/10.
- 564) Educación ambiental para la participación ciudadana, O. Ocampo y E. A. Castro, *ibid.*
- 565) Complejos de Ciclodextrinas y Rojo Nilo: Oclusión versus Inclusión, R. Hojvat-Tendler, D. A. Barbiric, E. A. Castro, XVII Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica, Córdoba, 3-6/05/11.
- 566) Reactividad de agregados de oro soportados sobre óxido de magnesio, E. Valle Ortiz, M. B. López, E. A. Castro, VI Jornadas de Ciencia y Tecnología de Facultades de Ingeniería del NOA, Universidad Nacional de Jujuy, Facultad de Ingeniería, 4,5/11/10.

Publicaciones Impresas:

Incluido en el registro de los químicos más citados en el mundo durante el período 1981 – Junio de 1997 (10.858 científicos citados al menos 500 veces en este período en publicaciones internacionales con referato científico) donde figuran sólo 9 químicos argentinos residentes en el país. La fuente de esta información es el Institute of Scientific Information

(ISI), Philadelphia, MA, USA y este registro se puede consultar en las dos siguientes direcciones web: <http://www.cristyal.org/cit.html> (USA) y <http://fluo.univ-lemans.fr:8001/cit/html> (Francia).

Varios trabajos han sido incluidos en los rubros 20 Most Discussed Articles in Physical Chemistry y 20 Most Viewed Articles in Physical Chemistry del *Chemistry Preprint Server*.

Datos del ISI Web of Science, Agosto de 2007

Trabajos registrados en Química 155, Citas 1104 y Citas por trabajo 7,12

Trabajos registrados en todos los campos 176, Citas 1199 y Citas por trabajo 6,81

Datos de la base SCOPUS

Fecha: 08/11/07

Período 2005-2007, índice h = 20 y descontando autocitas índice h = 16.

Fecha: 10/10/08

Período 2006-2008, índice h = 23 y descontando autocitas índice h = 19.

Fecha: 31/12/08

Período 2006-2008, índice h = 24 y descontando autocitas índice h = 20

Fecha: 02/05/09

Período 2007-2009, índice h = 25 y descontando autocitas índice h = 21

a) Publicaciones Impresas

- 1) Comparaison des Méthodes Semi-Empiriques dans le Calcul des Orbitales Moléculaires du Beta-Carotene, E. A. Castro, O. M. Sorarrain, *J. Chim. Phys.* **3** (1972) 513.
- 2) Further Developments about the Pi-electronic Structure and Absorption Spectra of Beta-Carotene, E. A. Castro, O. M. Sorarrain, *Z. Phys. Chem. (Leipzig)* **250**(3-4) (1972) 230.
- 3) Electronic Structure of BF₃-Benzaldehyde, E. A. Castro, O. M. Sorarrain, *Theor. Chim. Acta* **28** (1973) 209.
- 4) Some Remarks About Nucleic Bases, O. M. Sorarrain, E. A. Castro, *Chem. Phys. Lett.* **19** (1973) 422.
- 5) Structure and Reactivity of Aryl-Cyanohydrins, E. A. Castro, O. M. Sorarrain, *Z. Naturforschung*, **29b** (1974) 209.
- 6) The Geometry of 21 Valence Electron Radicals, E. J. Vasini, E. A. Castro, *J. Mol. Struct.* **22** (1974) 415.

- 7) A Simple Computer Program for the Hydrogen Molecule Ion Calculation E. A. Castro, C. Ferro, V. Amorebieta, *Am. J. Phys.* **42** (1974) 612-613, *DOI*: 10.1119/1.1987791.
- 8) Convergence Properties of the Omega-Beta Variable Method, E. A. Castro, *Can. J. Chem.* **54** (1976) 3242.
- 9) A Simplification for Obtaining Russell-Saunders Term Symbols, E. A. Castro, *J. Chem. Educ.* **54** (1977) 367.
- 10) The Optimum Scaling in a Monte Carlo Method, E. A. Castro, *Int. J. Quantum Chem.* **13** (1978) 455.
- 11) An Iterative Hypervirial-Scaling Method for Obtaining Wave-Functions and Eigenvalues, E. A. Castro, *Int. J. Quantum Chem.* **14** (1978) 231.
- 12) The Virial Theorem and the Hydrogen Molecule Ion Bonding, E. A. Castro, V. Amorebieta, *Am. J. Phys.* **46** (1978) 291.
- 13) Construction of Correlation Diagrams Between States of a Reacting System Using HMO Theory, R. Moré, E. A. Castro, *J. Chem. Educ.* **55** (1978) 368.
- 14) Theoretical Calculation of the Unimolecular Decomposition of the Fluor-Fluorosulfonate Molecule, E. A. Castro, A. H. Jubert, *React. Kin. Catal. Letters*, **9** (1978) 53.
- 15) Análisis del Método Omega-Beta Variable con Inclusión del Solapamiento, E. A. Castro, *Anal. Asoc. Quim. Arg.* **64** (1976) 299.
- 16) Some Remarks about a Trial Wave-Function for the Ground State of Two-Electron Atoms, E. A. Castro, *Rev. Bras. Física* **9** (1979) 705.
- 17) Calculation of the Total Molecular Energy Applying an Approximate Relation between SCF Orbital Energies and Total SCF Energy, E. A. Castro, *Int. J. Quantum Chem.* **15** (1979) 355.
- 18) Cálculo de Integrales en la Teoría Cuántica de Átomos y Moléculas por el Método de Monte-Carlo. I- Integrales de Solapamiento entre Orbitales Atómicos de Slater, E. A. Castro, *Anal. Asoc. Quim. Arg.* **67** (1979) 167.
- 19) Cálculo de Integrales en la Teoría Cuántica de Átomos y Moléculas por el Método de Monte-Carlo. II- Integrales de Solapamiento entre Orbitales Atómicos Híbridos de Slater, E. A. Castro, *Anal. Asoc. Quim. Arg.* **66** (1978) 31.
- 20) Cálculo Aproximado de Energías Moleculares Totales, E. A. Castro, *Anal. Asoc. Quim. Arg.* **66** (1978) 173.
- 21) Domain and Range of an Operator, E. A. Castro, F. M. Fernández, A. Croce, *Amer. J. Phys.* **47** (1979) 740.
- 22) A Generalized Omega Technique for MO Calculations, F. M. Fernández and E. A. Castro, *Z. Naturforschung* **34a** (1979) 1365.
- 23) A Simple Parametric Procedure for Saturated Hydrocarbons Based on the Transferability of Fock Matrix Elements, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Rev. Roum. Chim.* **25** (1980) 455.
- 24) Further Analysis of the Iterative Hypervirial-Scaling Method, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Int. J. Quantum Chem.* **17** (1980) 609.
- 25) Una Rápida y Sencilla Derivación del Operador Momento Angular en Coordenadas Curvilíneas, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Rev. Bras. Física* **10**(3) (1980) 673.
- 26) Application of an Approximate Calculation for the Total Energy of the Hydrogen Molecule Ion, E. A. Castro, *Rev. Roum. Chim.* **25** (1980) 41.

- 27) RRKM Calculation of the Unimolecular Decomposition of the CF₃OF, E. A. Castro, A. H. Jubert, *Rev. Roum. Chim.* **25** (1980) 75.
- 28) Coordinadas en Vibraciones Moleculares, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim.(Perú)* **XLV** (1979) 139.
- 29) An Improved Two-Parameter Omega-Technique (ITPOT) for MO Calculations. I- The ITPOT Method, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Rev. Roum. Chim.* **25** (1980) 635.
- 30) An Improved Two-Parameter Omega-Technique for MO Calculations. II- Polyenes, E. A. Castro, *Rev. Roum. Chim.* **25** (1980) 643.
- 31) Hypervirial Theorems and Coordinate Transformations in Quantum Mechanics, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Lett. Nuovo Cim.* **28** (1980) 484.
- 32) Variational Applications of the Group of Transformations, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Rev. Bras. Física* **11** (1981) 145.
- 33) Un Análisis Pedagógico Alternativo para Estudiar Interacción de Configuraciones, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Rev. Soc. Quim. México* **24** (1980) 87.
- 34) Comment on the Off-Diagonal Hellmann-Feynman Formula, E. A. Castro, F. M. Fernández, *J. Chem. Phys.* **73** (1980) 4711.
- 35) Comments About Simultaneous Hypervirial Relationships, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Lett. Nuovo Cim.* **29**(15) (1980) 509.
- 36) The Total Hartree-Fock Energy Eigenvalues Sum Relationships in Atoms and Ions, E. A. Castro, L. Villata, F. M. Fernández, *J. Chem. Phys.* **74** (1981) 592.
- 37) Hypervirial Analysis of Enclosed Quantum-Mechanical Systems. I- Dirichlet Boundary Conditions, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Int. J. Quantum Chem.* **19**(4) (1981) 521.
- 38) Hypervirial Analysis of Enclosed Quantum-Mechanical Systems. II- von Neumann Boundary Conditions, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Int. J. Quantum Chem.* **19**(4) (1981) 533.
- 39) Hypervirial Analysis of Enclosed Quantum-Mechanical Systems. III- Unsymmetrical Boundary Conditions, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Int. J. Quantum Chem.* **20**(3) (1981) 623.
- 40) Hypervirial Theorems and SCF Wave-Functions for Coupled Oscillators, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Chem. Phys.* **58**(10) (1981) 65.
- 41) Chemical Reactivity of Saturated Hydrocarbons through a Simple Parametric Procedure, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Acta sud Amer. Quim.* **1** (1981) 3.
- 42) Some Comments About the Effective Utilization of Off-Diagonal Hypervirial Relations Considering Diagonal Hypervirial Relations: Harmonic Oscillator Case, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Int. J. Quantum Chem.* **19**(5) (1981) 967.
- 43) An Improved Two-Parameter Omega Technique (ITPOT) for MO Calculations, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Z. Phys. Chem.* **262**(1) (1981) 83.
- 44) Hypervirial Theorems and Restrictions on Wavefunctions, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Theor. Chim. Acta*, **59**(1) (1981) 87.
- 45) Una Formulación Alternativa de una Técnica Omega Doble para Cálculos con Orbitales Moleculares, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Bol. Soc. Quim (Perú)* **XLV**(4) (1981) 341.
- 46) Hypervirial Relations and Orthogonal Conditions, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Math. Phys.* **22**(4) (1981) 754.
- 47) Estudio Analítico de Sistemas Confinados por Medio de la Metodología Hipervirial,

- F. M. Fernández, E. A. Castro, *Fol. Chim. Theor. Lat.* **8**(3) (1980) 97.
- 48) El Teorema No-Diagonal del Hipervirial y el Problema del Escalado en el Cálculo Aproximado de Funciones de Onda y sus Autovalores Asociados, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **CCVI**(I-VI) (1980) 45.
- 49) Ionization Potentials from a Total Hartree-Fock Energy-Eigenvalue Sum Relationship for Atoms and Ions, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Chem Scr.* **18**(1) (1981) 47.
- 50) On the Systematic Behaviour of Total Hartree-Fock SCF Energy in Atoms and Ions, E. A. Castro, F. M. Fernández, J. Marañón, *J. Phys. B* **14**(15) (1981) 477.
- 51) Análisis, Discusión y Aplicación de las Relaciones entre Energías Electrónicas Totales y Energías Orbitales para Sistemas Atómicos y Moleculares, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Fol. Chim. Theor. Lat.* **IX**(1) (1981) 11-40.
- 52) The Virial Theorem for Systems Subjected to Sectionally Defined Potentials, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Chem. Phys.* **75** (1981) 2908.
- 53) Hypervirial Calculation of Energy Eigenvalues of a Bounded Centrally Located Harmonic Oscillator, F.M. Fernández, E. A. Castro, *J. Math. Phys.* **22**(8) (1981) 1669.
- 54) Generalized Perturbation Theory Without Wavefunction (GPTWWF), G. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Lett. A* **86** (1981) 133.
- 55) Degenerate States Perturbation Theory and Continued Fractions, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Chem. Phys. Lett.* **84**(3) (1981) 627.
- 56) Hypervirial Theorems and Enclosed Quantum Mechanical Systems, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Rev. A* **24** (1981) 2344.
- 57) A New Treatment of Enclosed Quantum Mechanical Systems, F.M. Fernández, E. A. Castro, *J. Phys. A* **14**(12) (1981) L485.
- 58) Ionization Energies from a Simple Polynomial Relationship, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Acta sud Amer. Quim.* **1**(2) (1981) 101.
- 59) Hypervirial Perturbative Method for Morse Oscillators, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Chem. Phys.* **76**(1) (1982) 525.
- 60) Hypervirial Treatment of Multidimensional Isotropic Bounded Oscillators (MIBO), F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Rev. A* **24**(6) (1981) 2883.
- 61) An Analytic Expression for the Eigenvalues of the Bounded Quartic Oscillator, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Lett. A* **88**(1) (1982) 4.
- 62) Numerical Comparison of Approximate Formulas for Atomic Total Energies. Ionization Energy Test. E. A. Castro, F. M. Fernández, *J. Chem. Phys.* **76** (1982) 1177.
- 63) Hypervirial Calculation of Integrals Involving Bessel Functions, F. M. Fernández, A. M. Mesón, E. A. Castro, *J. Math. Phys.* **23**(2) (1982) 254.
- 64) Trivial Off-Diagonal Hellmann-Feynman Formulas, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Int. J. Quantum Chem.* **21**(3) (1982) 671.
- 65) A New Basis Set for Anharmonically Coupled Oscillators, S. A. Maluendes, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Mol. Phys.* **45**(2) (1982) 511.
- 66) Hypervirial Perturbative Treatment of the Hydrogen Atom Inside Boxes with Parabolical Surfaces, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Chem. Phys.* **76**(5) (1982) 2506.
- 67) Virial Theorem and Boundary Conditions of Approximate Wavefunctions, F. M.

- Fernández, E. A. Castro, *Int. J. Quantum Chem.* **21**(4) (1982) 741.
- 68) Hypervirial Extension for Energies of Parameter Dependent Systems, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Int. J. Quantum Chem.* **21**(4) (1982) 673.
- 69) A Remark on the Constant Relating Total Molecular Energy to the Sum of Valence Eigenvalues, H. O. Villar, E. A. Castro, F. M. Fernández, *J. Chem. Phys.* **76** (1982) 3846.
- 70) Some Comments About Trivial Hypervirial Relationships, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Theor. Chim. Acta* **61**(1) (1982) 103.
- 71) Atomic Binding Energies from Approximate Relations Involving $1/r$ Average Values and the $1/Z$ Perturbation Expansions, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Gaz. Chim. Ital.* **112**(1-2) (1982) 39.
- 72) Hypervirial Analysis of Enclosed Quantum Mechanical Systems. IV - Further Comments, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Int. J. Quantum Chem.* **21**(5) (1982) 875.
- 73) Some Remarks About the Unimolecular Rate Constant, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. (Perú)* **XLVI**(3) (1980) 289.
- 74) Transition Moments for Linear Potentials, F. M. Fernández, G. A. Arteca, S. A. Maluendes, E. A. Castro, *J. Phys. A* **15** (1982) 2123.
- 75) Some Comments About Tensor Virial Theorem and Linear Transformations, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Int. J. Quantum Chem.* **21**(6) (1982) 1097.
- 76) Hypervirial Perturbational Treatment of a Particle in a Box in the Presence of an Electric Field, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Physica A* **111**(1-2) (1982) 334.
- 77) Hypervirial Perturbational Treatment of the Bounded Hydrogen Atom, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Math. Phys.* **23**(6) (1982) 1103.
- 78) Hypervirial Treatment of Perturbed Morse Oscillators, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Mol. Spect.* **94**(1) (1982) 28.
- 79) SCF and Adiabatic Approximations for Coupled Oscillators, F. M. Fernández, G. A. Arteca, S. A. Maluendes, H. O. Villar, E. A. Castro, *Rev. Bras. Fis.* **11**(4) (1981) 1053.
- 80) Some Comments About Tensor Virial Theorem and Orthogonal Transformations F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Math. Phys.* **23** (1982) 1769.
- 81) Calculation of Total Molecular Energies from an Approximate Relation Between SCF Orbital, Atomic Electronic Repulsion and Total SCF Energies. E. Donati, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Int. J. Quantum Chem.* **22** (1982) 429.
- 82) An Omission in a Comparative Study of the Structure and Properties of ClF_2 and Cl_3 Radicals by CNDO and INDO Methods, E. A. Castro, E. J. Vasini, *Int. J. Quantum Chem.* **22** (1982) 433.
- 83) Tratamiento Hipervirial de Sistemas Mecano-Cuántico Acotados, F. M. Fernández, E. A. Castro, *KINAM* **4**(2) (1982) 193.
- 84) Hypervirial Theorems for Systems Subjected to Sectionally Defined Potentials, F. M. Fernández, E. A. Castro, *KINAM* **4**(2) (1982) 183.
- 85) Variational Approximation to the Spectra of Systems with Confining Potentials, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Am. J. Phys.* **50** (1982) 921.
- 86) Comment on the Operator Method and Perturbation Solution of the Schrodinger Equation, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Lett. A* **91**(7) (1982) 339.
- 87) The Stark Effect for the Hydrogen Atom Inside Boxes with Paraboloidal Surfaces, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Z. Phys. A* **308** (1982) 115.
- 88) The Second Quantization in Quantum Chemistry. I- An Alternative Formulation of

- the Perturbation Theory, E. A. Castro, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, *Bol. Soc. Quim. (Perú)* **XLVII** (3) (1981) 144.
- 89) Calculation of Diamagnetic Susceptibilities from the Thomas-Fermi-Amaldi Theory for Ions, M. C. Donnamaria, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Int. J. Quantum Chem.* **22** (1982) 1005.
 - 90) Hypervirial-Perturbative Approximation to the SCF Eigenvalues of Coupled Oscillators, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Chem. Phys. Lett.* **92** (1982) 43.
 - 91) Semiempirical Prediction of Ionization Potentials, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Rev. Roum. Chim.* **27** (1982) 1025.
 - 92) Formation and Decomposition of Radical Anions. A Theoretical Study, H. O. Villar, E. A. Castro, R. A. Rossi, *Can. J. Chem.* **60** (1982) 2525.
 - 93) Cálculo de las Energías Electrónicas Moleculares y de las Desviaciones de la Fórmula de Ruedenberg a partir de las Energías Atómicas, E. Donati, E.A. Castro, F. M. Fernández, *Acta sud Amer. Quim.* **1** (1981) 175.
 - 94) Algunas Consideraciones Acerca de la Integral de Intercambio como Observable Cuántico, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Rev. Chil. Educ. Quim.* **7** (1982) 120.
 - 95) Un Test Adicional de un Método Paramétrico Sencillo para el Cálculo de las Estructuras Electrónicas de Hidrocarburos Saturados, D. J. Barbiric, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Bol. Soc. Quim. (Perú)* **XLVIII** (1982) 39.
 - 96) Teoría de Perturbaciones para Sistemas Mecano-Cuánticos con Estados Degenerados, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Rev. Mex. Física* **29** (1982) 129.
 - 97) On the Partition Function of the Morse Oscillator, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Chem. Phys. Lett.* **94** (1983) 388.
 - 98) Scaling-Variational Treatment of Anharmonic Oscillators, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Rev. A* **27** (1983) 663.
 - 99) Hypervirial-Perturbative Treatment of One-Dimensional Quantum Systems, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Nuovo Cim. B* **72** (1982) 246.
 - 100) Una Formulación Rigurosa del Método Variacional, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Rev. Colom. Quim.* **11** (1982) 29.
 - 101) Some Numerical Analysis of the Omega-Technique, D. J. Barbiric, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Rev. Colom. Quim.* **11** (1982) 39.
 - 102) Una Técnica Omega Biparametrica Mejorada para Cálculos con Orbitales Moleculares. IV- Momentos Dipolares de algunos Hidrocarburos No-Bencenoides, D. J. Barbiric, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Rev. Colom. Quim.* **12** (1983) 13.
 - 103) Prediction of Electron Affinities from Fundamental Theorems Involving the Electron Density, $\langle 1/r \rangle$ and the $1/Z$ Perturbation Expansion, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Rev. Colom. Quim.* **12** (1983) 25.
 - 104) Atomic Diamagnetic Susceptibilities from the Statistical TFA Theory, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Pramana* **19** (1982) 431.
 - 105) Análisis del Método de Uniones de Valencia en Base al Método de Funciones de Onda Localizadas Mínimamente Distorsionadas, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Bol. Soc. Quim. (Perú)* **XLVIII** (1982) 74.
 - 106) Análisis de las Fuerzas entre Electrones y Núcleos en las Moléculas, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Ciencia Divulgada* **2** (1983) 132.
 - 107) An Improved Approximate Energy Formula for Molecules in Terms of Corrected

- Free Atom Energies, E. A. Castro, F. M. Fernández, *J. Chem. Phys.* **78** (1983) 4782.
- 108) Hypervirial Theorems for Some Simple Quantum Chemistry Systems, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Int. J. Quantum Chem.* **23** (1983) 915.
- 109) Comments About Energies of Parameter-Dependent Systems, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Rev. A* **27** (1983) 2735.
- 110) Simple Approximate Analytical Expressions for the Eigenvalues of Anharmonic Oscillators and Confining Potential Models, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Chem. Phys.* **79** (1983) 321.
- 111) The Calculation of Diamagnetic Susceptibilities from the Thomas-Fermi-Amaldi Theory of Atoms, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, F. M. Fernández, *J. Chem. Phys.* **78** (1983) 5013.
- 112) An Improved Two-Parameter Omega Technique (ITPOT) for Molecular Orbital Calculations. VI- Calculations on Methyl Substituted Polycyclic Aromatic Hydrocarbons, H. O. Villar, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Chem. Scr.* **22** (1983) 49.
- 113) Complementary Tight Upper and Lower Bounds to Eigenvalues of the Schrödinger Equation, F. M. Fernández, A. M. Mesón, E. A. Castro, *KINAM* **5** (1983) 21.
- 114) Dirichlet and von Neumann Basis Sets for Quantum Mechanical Anharmonic Oscillators, A. M. Mesón, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Z. Naturforschung*, **38** (1983) 473.
- 115) Análisis de la Relación entre una Función de Onda Aproximada y la Autofunción Exacta, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Bol. Soc. Quim. (Perú)* **XLVIII** (1982) 179.
- 116) Un Nuevo Método para Sumar Series Divergentes, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Fol. Chim. Theor. Lat.* **X**(4) (1982) 153-175.
- 117) Charge Distributions and Chemical Effects in Simple Alkanes, D. J. Barbiric, E. A. Castro, F. M. Fernández, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **99** (1983) 319.
- 118) La Teoría de Perturbaciones Aplicada al Modelo de la Partícula en una Caja Unidimensional con Base Convexa, M. D. Glossman, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Ing. & Cienc. Quim.* **6**(3-4) (1982) 200.
- 119) The Particle in the One-Dimensional Champagne Bottle Revisited, E. A. Castro, F. M. Fernández, *J. Chem. Educ.* **60** (1983) 378.
- 120) Una Estructura para Fisicoquímica, E. A. Castro, F. M. Fernández, G. A. Arteca, *Cienc. Div.* **3** (1984) 5-7.
- 121) An Improved Two-Parameter Omega Technique (ITPOT) for Molecular Orbital Calculations. III- Aromaticity of some Semibenzenoid and Non-Benzenoid Hydrocarbons, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Rev. Roum. Chim.* **28** (1983) 339.
- 122) A Note About a Systematic Study of the Electronic Potential at the Nucleus and the Interelectronic Interaction in Atoms and Ions, E. A. Castro, F. M. Fernández, *J. Chem. Phys.* **79** (1983) 1548.
- 123) Discussion of Several Analytical Approximate Expressions for the Eigenvalues of Bounded Harmonic Oscillators and Hydrogen Atom, G. A. Arteca, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Int. J. Quantum Chem.* **24** (1983) 169.
- 124) Some Properties of the Solutions of the Schrödinger Equation with von Neumann Boundary Conditions, F. M. Fernández, E. A. Castro, *KINAM* **5** (1983) 179.
- 125) Introduction of the Z Variation in the Thomas-Fermi and Thomas-Fermi-Amaldi Energy Density Functions for Neutral Atoms, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Gaz. Chim. Ital.* **113**(3-4) (1983) 203.

- 126) Comments about a Theoretical Approach to the Relative Size of Atoms, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Bol. Soc. Quim. (Perú)* **XLIX**(1) (1983) 44-48.
- 127) Rotational Energies of Polar Symmetric-Top Molecules in High Electric Fields, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Mol. Spectr.* **100** (1983) 24.
- 128) Rotational Energy of the Hydrogen Molecule Ion in a Magnetic Field, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Rev A* **28** (1983) 2059.
- 129) Z-Variable Calculation with the Statistical TF, TFA, TFD and TFAD Methods for Ions, M. C. Donnamaría, M. D. Glossman, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Commun. Math. Chem. MATCH* **14** (1983) 247.
- 130) Accurate Calculation of the Eigenvalues of the $x^2 + \lambda^2/(1 + ax^2)$ Potential, F. M. Fernández, A. M. Mesón, E. A. Castro, *J. Comp. Phys.* **51**(3) (1983) 519-526.
- 131) A Simple Parametric Procedure for Hydrogen Abstraction from Saturated Hydrocarbons, D. J. Barbiric, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Anal. Quim. (España)* **79**(3) (1983) 459-460.
- 132) Calculation of H₂ by Means of a Parametrization Obtained From the Hydrogen Molecule Ion, O. G. Stradella, G. A. Arteca, E. A. Castro, F. M. Fernández, *J. Phys. Lett.* **44**(17) (1983) L741.
- 133) Tratamiento Matricial-Tensorial del Movimiento del Cuerpo Rígido, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Rev. Mex. Física* **29**(4) (1983) 593-608.
- 134) Summation of the Perturbation Series for the Energy Levels of a Hydrogen Atom in a Magnetic Field, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Chem. Phys. Lett.* **102**(4) (1983) 344.
- 135) Analytical Expressions for the Eigenvalues of Anharmonic Oscillators, F. M. Fernández, G. A. Arteca and E. A. Castro, *Physica A* **122** (1983) 37-49.
- 136) Autovalores Rotacionales de Moléculas Diatómicas Sometidas a un Campo Eléctrico Uniforme, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Fol. Chim. Theor. Lat.* **XI**(1) (1983) 23-39.
- 137) A Further Test on an Effective Nuclear Charge Model for the Prediction of Valence Force Constants, D. J. Barbiric, E. A. Castro, F. M. Fernández, *J. Chem. Phys.* **80**(1) (1983) 289.
- 138) Approximate Energy Levels of Central Field Bound Quantum Systems, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Am. J. Phys.* **51**(12) (1983) 1150.
- 139) Note on the TF and TFA Model Calculation of Atomic Polarizabilities, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Anal. Quim. (España)* **79**(3) (1983) 613.
- 140) A New Treatment of One-Dimensional Two-Electron Atoms, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Rev. Bras. Fis.* **12** (1982) 766-772.
- 141) Interaction Energies Between Noble Gas Atoms From a Trial Density Function in the TFAD Formulation, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, F. M. Fernández, *J. Chem. Phys.* **80**(3) (1983) 1179.
- 142) A Theoretical Study of the Relative Stability of the Isomeric Forms of N₂O₃, A. H. Jubert, E. L. Varetti, H. O. Villar, E. A. Castro, *Theor. Chim. Acta* **64** (1984) 313.
- 143) Comments on the Anharmonic Oscillator Model, G. A. Arteca, F. M. Fernández, A. M. Mesón, E. A. Castro, *Helv. Phys. Acta* **56** (1983) 1168-1174.
- 144) La Segunda Cuantificación en Mecánica Cuántica. II- Formulación, S. A. Maluendes, G. A. Arteca, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Rev. Chil. Educ. Quim.* **8**(3) (1983) 3-10.

- 145) A New Variational Approach to the Hydrogen Atom in Magnetic Fields, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Z. Phys. A* **315** (1984) 255.
- 146) Fragmentation Rates of Aromatic Radical Anions π^* - σ^* Orbital Crossing Point, H. O. Villar, E. A. Castro, R. A. Rossi, *Z. Naturf.* **39a** (1984) 59-54.
- 147) An Improved Two-Parameter Omega Technique (ITPOT) for Molecular Orbital Calculations. V- Calculation of Bond Lengths from a Modified Coulson's Equation, D. J. Barbiric, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Rev. Colomb. Quim.* **12** (1983) 17.
- 148) A Further Test on the Fermi-Amaldi Correction, M. D. Glossman, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Bol. Soc. Quim. (Perú)* **28**(4) (1983) 17-24.
- 149) Resolution of the Schrödinger Equation through a Simple Algebraic Technique, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Am. J. Phys.* **52** (1984) 344.
- 150) Approximate Calculation of Physical Properties on Enclosed Central Field Quantum Systems, G.A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Chem. Phys.* **80** (1984) 1569.
- 151) Eigenvalues of Anharmonic Oscillators from a Variational Functional Approach Method, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Math. Phys.* **25** (1984) 932.
- 152) Análisis del Comportamiento Sistemático de las Energías Electrónicas de Átomos e Iones, J. Marañón, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Bol. Soc. Quim. (Perú)* **XLIX**(3) (1983) 156-160.
- 153) Perturbation Calculation of the Energy Eigenvalues of a Polar Rigid Rotator in an Electric Field, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Mol. Spectr.* **104**(2) (1984) 380-387.
- 154) The Hypervirial Perturbative Method (HPM), F. M. Fernández, E. A. Castro, *Commun. Math. Chem. MATCH* **15**(1) (1984) 133-143.
- 155) Convergent Renormalized Perturbation Series, F. M. Fernández, G. A. Arteca, S. A. Maluendes, E. A. Castro, *Phys. Lett. A* **103**(1-2) (1984) 19-23.
- 156) On the Constancy of the Second Differences in Total Electronic Energies within Atomic Isoelectronic Series, G. L. Estiú, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Z. Physik. Chem.* **265**(3) (1984) 603.
- 157) Geometric Approach to the Semiclassical Bound-State Energies of Quantum Mechanical Models, F. M. Fernández, G. A. Arteca, E. A. Castro, *J. Chem. Phys.* **80**(11) (1984) 5659.
- 158) Calculation of Bound State Energies from a Variational Functional Method, F. M. Fernández, G. A. Arteca, E. A. Castro, *Int. J. Quantum Chem.* **25**(6) (1984) 1023.
- 159) Approximate Energy Levels of Bound Quantum Systems, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Am. J. Phys.* **52**(5) (1984) 453-455.
- 160) Upper and Lower Bounds to Eigenvalues from Square-Step Potentials, A. M. Meson, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Rev. Mex. Fis.* **30**(2) (1984) 301-307.
- 161) A New Method for Summation of Divergent Power Series, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Math. Phys.* **25**(8) (1984) 2377-2389.
- 162) Calculation of Thermodynamic Properties through the Use of Two Analytical Expressions for the Partition Function of the Morse Oscillator, M. D. Glossman, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Bull. Kor. Chem. Soc.* **5**(4) (1984) 145-148.
- 163) On the Convergence of the Operator Method Perturbation Series, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Lett. A* **104**(8) (1984) 401-404.
- 164) Hypervirial - Perturbative Calculation of Stark Energy Levels of

- Symmetric-Top Molecules, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Commun. Math. Chem. MATCH* **16** (1984) 95-102.
- 165) An Improved Two-Parameter Omega Technique for Molecular Orbital Calculations. VII- Pi Reaction Field Calculations, H. O. Villar, R. E. Cachau, E. A. Castro, *Acta Sud. Amer. Quim.* **3**(2) (1983) 67-76.
- 166) Perturbation Theory Without Wave Function for Multidimensional Systems, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Int. J. Quantum Chem.* **26** (1984) 497.
- 167) Análisis Comparativo de los Métodos de Uniones de Valencia y de Orbitales Moleculares, E. Ottavianelli, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Rev. Chil. Educ. Quim.* **7**(2) (1982) 63.
- 168) Algunos Comentarios acerca del Correcto Empleo del Principio de Incerteza, G. L. Estiú, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Rev. Chil. Educ. Quim.* **8**(1) (1983) 7-9.
- 169) Calculation of Rotational Energies of Molecules in Electric and Magnetic Fields by Perturbation Theory, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, A. M. Mesón, E. A. Castro, *Phys. Rev. A* **30**(5) (1984) 2227-2233.
- 170) A New Representation of Potential Energy Curves for Diatomic Molecules, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Chem. Phys.* **81** (1984) 4540.
- 171) A Method for Summing Strongly Divergent Perturbation Series: the Zeeman Effect in Hydrogen, G. A. Arteca, F. M. Fernández, A. M. Mesón, E. A. Castro, *Physica A* **128** (1984) 253.
- 172) A Method for Summation of Perturbation Series, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Physica A* **128** (1984) 589.
- 173) Summation of Strongly Divergent Perturbation Series, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Math. Phys.* **25**(12) (1984) 3492-3496.
- 174) Autoadjunción de Operadores y Conservación de Observables, G. A. Arteca, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Rev. Mex. Fis.* **30**(4) (1984) 709-716.
- 175) The Exchange and Self-Interaction Corrections in the Thomas-Fermi Calculation of Diamagnetic Susceptibilities for Ions, M. D. Glossman, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, F. M. Fernández, *J. Physique* **46** (1985) 173.
- 176) Cálculo Z-Variable con los Funcionales de la Energía de Thomas-Fermi-Dirac y Thomas-Fermi-Amaldi-Dirac para Átomos Neutros, M. D. Glossman, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Bol. Soc. Quim. (Perú)* **L**(2) (1984) 143-149.
- 177) An Alternative Formulation of the Perturbation Theory for Degenerate States, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Rev. Colomb. Fis.* **16**(1) (1984) 9.
- 178) Convergence Radii of the Rayleigh-Schrödinger Perturbation Series for a Diatomic Rigid Polar Molecule in a Uniform Electric Field, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Lett. A* **107**(5) (1985) 215-217.
- 179) Numerical Comparison of Atomic Binding Energies Calculated by Thomas-Fermi like Formulas, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Rev. Roum. Phys.* **30** (1985) 83-90.
- 180) Rotational Barriers and Force Constants in Methyl Formiate and its Fluorinated Derivatives. An MNDO Semiempirical Calculation Study, A. H. Jubert, H. O. Villar, E. A. Castro, E. L. Varetti, *Anal. Quim.* **80** Suppl.2 (1984) 625-628.
- 181) Shift of the Coordinate Origin in Calculating Resonances by Dilatation Transformation, A. M. Mesón, F. M. Fernández, E. A. Castro, A. Maltz, R. Rodríguez, *J. Comput. Phys.* **57** (1985) 491.

- 182) A Self-Consistent Reaction Field Study on Electrostatic Isopotential Maps, H. O. Villar, E. A. Castro, *Croat. Chem. Acta* **58**(2) (1985) 153-160.
- 183) Some Comments on the Nucleation Phenomena, H. O. Villar, O. G. Stradella, R. E. Cachau, E. A. Castro, *Croat. Chem. Acta* **57**(6) (1984) 1417-1421.
- 184) A Simple Iterative Solution of the Schrödinger Equation in Matrix Representation Form, F. M. Fernández, A. M. Mesón, E. A. Castro, *J. Phys. A* **18** (1985) 1389.
- 185) Matrices de Densidad. I- Matriz de Densidad Reducida y el Problema de la N-Representabilidad, M. C. Donnamaría, M. D. Glossman, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Fol. Chim. Theor. Lat.* **XII**(4) (1984) 171-201.
- 186) Consideraciones sobre la Teoría de Perturbaciones Aplicada a Interacciones Intermoleculares, R. E. Cachau, H. O. Villar, E. A. Castro, *Anal. Asoc. Quim. Arg.* **73**(3) (1985) 261-268.
- 187) Adaptación del Índice de Complejidad-Densidad al Idioma Español, G. A. Arteca, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Ens. Cienc. Número Extra* (1985) 26.
- 188) Desarrollo de la Energía del Estado Fundamental de Átomos e Iones en Series de Potencias de $1/Z^{1/3}$, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Bol. Soc. Quím. (Perú)* **L**(4) (1984) 306-309.
- 189) Stark Effect in a One-Dimensional Atom, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Am. J. Phys.* **53**(8) (1985) 760.
- 190) El Químico Como Escritor de Ciencia, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Rev. COPAQUI* **5**(1) (1985) 9-10.
- 191) Energy Eigenvalues from a Modified Operator Method, F. M. Fernández, A. M. Mesón, E. A. Castro, *Phys. Lett. A* **111**(3) (1985) 104-106.
- 192) An Approximate Analytical Expression for the Energies of the Tight-Bound States of the Zeeman Effect in Hydrogen, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Lett. A* **111**(3) (1985) 125-128.
- 193) Convergent Renormalized Perturbation Series for the Stark Rotational Energies of Diatomic Molecules, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Chem. Phys.* **83** (1985) 4599.
- 194) Molecular Dipole Moments from a New Electronegativity Scale, O. G. Stradella, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Inorg. Chem.* **24**(22) (1985) 3631-3634.
- 195) La Segunda Cuantificación en Mecánica Cuántica. III- Sistemas Fermiónicos, G. A. Arteca, S. A. Maluendes, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Rev. Chil. Educ. Quím.* **10**(2) (1985) 12-18.
- 196) Convergent Perturbation Series for Coupled Oscillators, F. M. Fernández, A. M. Mesón, E. A. Castro, *Phys. Lett. A* **112**(3,4) (1985) 107-110.
- 197) Improved Renormalized Perturbation Series, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Lett. A* **111**(6) (1985) 269-273.
- 198) Perturbation Calculation on the Hydrogen Atom in Electric and Magnetic Fields, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Int. J. Quantum Chem.* **28**(5) (1985) 603-608.
- 199) La Segunda Cuantificación en Mecánica Cuántica. IV- Funciones de Green, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Rev. Chil. Educ. Quím.* **10**(3) (1985) 3-10.
- 200) Study of Eigenvalue Singularities from Perturbation Series: Application to Two-Electron Atoms, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Chem. Phys.* **84** (1986) 1624.
- 201) A Theoretical Conformational Study of s-Tetrathiane, s-Tetroxane and their Methyl Derivatives, O. G. Stradella, H. O. Villar, E. A. Castro, *J. Mol. Struct.*

- THEOCHEM* **135** (1986) 7-14.
- 202) Cation Influence on the Structure of Water in $(\text{Me.OH}_2)^{\text{+n}}$ Complexes, R. E. Cachau, H. O. Villar, E. A. Castro, *An. Soc. Bras. Quim. Teor.* **3** (1986) 180-183.
- 203) Theoretical Analysis of the Isomerization of Fluorocarbonylthiocyanide, A. H. Jubert, H. O. Villar, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **135** (1986) 15.
- 204) Method of Analysis of Critical-Point Singularities from Power Series Expansions, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Rev. A* **33**(2) (1986) 1297-1301.
- 205) Sobre la Construcción de Curvas de Energía Potencial Vibracional para Moléculas Diatómicas, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Anal. Asoc. Quim. Arg.* **73** (1985) 605.
- 206) Matrices de Densidad. II- Matrices Reducidas de Primer y Segundo Orden. Relaciones Generales, M. C. Donnamaría, M. D. Glossman, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Fol. Theor. Chim. Lat.* **XIII**(3) (1985) 61-81.
- 207) Approximate Analytical Solution of the Thomas-Fermi-Amaldi Equation for Negative Ions in a Superstrong Magnetic Field, M. D. Glossman, E. A. Castro, *Commun. Math. Chem. MATCH* **19**(1) (1986) 3-17.
- 208) Prediction of Energies of Polyatomic Molecules on the Basis of Fundamental Homogeneous Conditions, E. Ottavianelli, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Acta Chim. Sin.* **44**(4) (1986) 402-405.
- 209) Energies of the $\alpha x^3 + \beta x^4$ Anharmonic Oscillator from a Modified Operator Method, F. M. Fernández, A. M. Mesón, E. A. Castro, *Mol. Phys.* **58**(2) (1986) 36-368.
- 210) On the Density Matrix Definition of Valency, O. G. Stradella, H. O. Villar, E. A. Castro, *Theor. Chim. Acta* **70** (1986) 67-71.
- 211) A Simple Iterative Method for Resonance Calculations, F. M. Fernández, A. M. Mesón, E. A. Castro, *J. Phys. A* **19** (1986) 2075-2077.
- 212) Large-Order Shifted $1/N$ Expansions, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, A. M. Mesón, E. A. Castro, *Phys. Rev. D* **34** (1986) 1835.
- 213) Proyectos de Integración Latinoamericanos, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **282** (1986) 45-47.
- 214) Semiclassical Model for the Zeeman Resonances in Hydrogen at Zero Field Ionization Threshold, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Rev. Mex. Fis.* **32**(2) (1986) 369-377.
- 215) Algunas Consideraciones sobre Reacciones que Involucran Estados Excitados, H. O. Villar, E. A. Castro, *Fol. Chim. Theor. Lat.* **XIII** (1985) 149-158.
- 216) Shifted Ratio Method for Calculation of Critical Parameters from Power Series Expansions, F. M. Fernández, G. A. Arteca, E. A. Castro, *Physica A* **137** (1986) 639.
- 217) On the Heat of Dissociation of Simple Acids, R. E. Cachau, H. O. Villar, E. A. Castro, *Acta Sud Amer. Quim.* **6** (1986) 17-21.
- 218) La Noción de Complementariedad en la Enseñanza de la Química, E. A. Castro, E. Canestro, *Rev. COPAQUI* **6**(1) (1986) 1-3.
- 219) A New Method of Analysis of Critical Point Singularities from Power Series Expansions: Application to Eigenvalue Problems and Virial Series, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Chem. Phys.* **85** (1986) 6713.
- 220) Further Comments on the Modified Operator Method, G. A. Arteca, F. M.

- Fernández, E. A. Castro, *Phys. Lett. A* **119** (1986) 149-152.
- 221) A Self-Consistent Reaction-Field Calculation of the Fluorobenzonitrile Radical Anions, H. O. Villar, E. A. Castro, *Z. Naturf.* **41a** (1986) 1339-1340.
- 222) Calculation of Activation Energy for Hydrogen Abstraction by CH₃ from a Modified BEBO Method, A. H. Jubert, E. A. Castro, *Acta Chim. Sin.* **44**(10) (1986) 1049-1053.
- 223) Singular Points from Taylor Series, F. M. Fernández, G. A. Arteca, E. A. Castro, *J. Math. Phys.* **28** (1987) 323.
- 224) Charge Transfer in (M-OH₂)^{o+} Complexes and its Possible Bearing on the Electric Mobility of Small Cations, S. H. Almaleck, C. M. Marschoff, R. E. Cachau, E. A. Castro, *Chem. Phys. Lett.* **133** (1987) 303.
- 225) Total and Orbital SCF Energies in Open-Shell Systems, O. G. Stradella, H. O. Villar, E. A. Castro, *Acta Chim. Sin.* **45**(1) (1987) 62-64.
- 226) Upper and Lower Bounds to Eigenvalues from Variational Functionals, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Rev. A* **35** (1987) 4861.
- 227) El Estado Actual de la Química Teórica Cuántica en Latinoamérica, E. A. Castro, *Ind. Quím.* **285** (1987) 48-50.
- 228) Simple Variational Approaches to Eigenvalues in Quantum Theory, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Phys. A* **20**(8) (1987) 2221-2224.
- 229) Implicit Analytical Expressions for Eigenvalues: the Zeeman Effect in Hydrogen, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Phys. B* **20** (1987) L331-L333.
- 230) On the Numerical Integration of the Schrodinger Equation, C. G. Díaz, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Phys. A* **21** (1988) L11-L13.
- 231) Approximate Analytical Solution of the Thomas-Fermi Equation for Positive Ions in a Strong Magnetic Field, M. D. Glossman, E. A. Castro, *Z. Phys. D* **6** (1987) 81-82.
- 232) A Semiclassical Trajectory Approach to the Cleavage Reactions of Aromatic Radical Anions, H. O. Villar, E. A. Castro, R. A. Rossi, *Acta Chim. Sin.* **45**(4) (1987) 334-339.
- 233) 1/N Expansion for a Mie-Type Potential, F. M. Fernández, S. A. Maluendes, E. A. Castro, *Phys. Rev. D* **36**(2) (1987) 650.
- 234) Modified Large-N Expansion, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Rev. A* **36**(3) (1987) 1452-1454.
- 235) Topological Properties of the Electronic Density of CO-MgF₂ and OC-MgF₂ Adducts, O. G. Stradella, S. A. Maluendes, E. A. Castro, A. H. Jubert, *Theor. Chim. Acta* **72** (1987) 57-62.
- 236) An Intermediate Solution between Csavinszky's and Kesarwani-Varshni's Trial Density Function, M. D. Glossman, M. C. Donnamaría, E. A. Castro *Commun. Math. Chem. MATCH* **22** (1987) 223-244.
- 237) Branch Points of the Eigenvalues of a Polar Symmetric Top in a Uniform Electric Field, A. M. Mesón, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Lett. A* **124**(1-2) (1987) 4-8.
- 238) Modified 1/N Expansion, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Lett. A* **124**(4-5) (1987) 215-219.
- 239) On the Power Series Method for Eigenvalue Calculation, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Lett. A* **124**(1-2) (1987) 1-3.
- 240) Critical Parameters from Power Series Expansions, F. M. Fernández, A. Arteca,

- E. A. Castro, *J. Math. Chem.* **1**(3) (1987) 267-280.
- 241) Caracterización y Tipificación de las Unidades de Investigación y Desarrollo desde la Perspectiva de la Teoría General de Sistemas, E.A.Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **XXCVI**, Serie I (1986) 37-44.
- 242) A Theoretical Study of the Structure and Vibrational Spectrum of SNO, SNONO and ONSNO, A. H. Jubert, O. G. Stradella, S. A. Maluendes, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **153**(3-4) (1987) 215-220.
- 243) Time Evolution Operator for a Class of Multidimensional Driven Oscillator, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Lett. A* **125**(2-3) (1987) 77-79.
- 244) The Magnus Expansion for the Damped Harmonic Oscillator, F. M. Fernández, J. Echave, E. A. Castro, *Chem. Phys.* **117** (1987) 101-104.
- 245) On the Linearly Driven Parametric Oscillator, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Int. J. Quantum Chem.* **32**(5) (1987) 591-594.
- 246) Comparison of Improved Approximate Energy Formulas for Molecules in Terms of Corrected Free Atom Energies, E. Ottavianelli, E. A. Castro, *J. Chem. Soc. Pak.* **9**(3) (1987) 399-406.
- 247) Application of the Modified Wu Function to the Calculation of Some Atomic Properties, M. D. Glossman, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Acta Phys. Slov.* **37**(5) (1987) 298-315.
- 248) Intellectual Development beyond Formal Operations, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Int. J. Sci. Educ.* **9**(4) (1987) 441-447. Reimpreso con autorización y en versión castellana en la *Rev. Bol. Educ. Sup. Cienc.* **1**(1) (2001) 63-69.
- 249) Eigenvalues from the Ricatti Equation, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Phys. A* **20**(16) (1987) 5541.
- 250) Application of the Hill Determinant Method to the Vibrational Motion of Diatomic Molecules, D. A. Estrín, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Chem. Phys.* **87** (1987) 7059.
- 251) Convergence Radii of the Rayleigh-Schrodinger Perturbation Series for the Bounded Oscillator, F. M. Fernández, G. A. Arteca, E. A. Castro, *J. Phys. A* **20** (1987) 6303-6307.
- 252) Quality of Simple Approximate Solutions for the Thomas-Fermi Model of Atoms in Strong Magnetic Fields, M. D. Glossman, E. A. Castro, *J. Phys. B* **21** (1988) 411-419.
- 253) Short Numerical Test for Ludeña's Functional, M. D. Glossman, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, *Few Body Systems* **3**(2) (1987) 95.
- 254) Theoretical Calculation of the Singlet-Singlet Electronic Transition and Photochemical Reactivity in Carbonyl Fluoride, Trifluoroacetyl Fluoride and Perfluoromethyl Perfluoroacetate, E. Ottavianelli, E. A. Castro, A. H. Jubert, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **42**(1-2) (1988) 149-156.
- 255) First International Institute of Theoretical Chemistry of South America, E. A. Castro, *Chem. Des. Autom. News* **3**(5) (1988) 9.
- 256) On the Inadequacy of some Usual Applications of the Omega-Techniques, R. E. Cachau, G. L. Estiú, E. A. Castro, *Acta Chim. Sin.* **46**(1) (1988) 57-61.
- 257) Optimized Energy Formulas for Polyatomic Molecules, E. A. Bidacovich, E. A. Castro, A. H. Jubert, *Acta Chim. Sin.* **46**(1) (1998) 62-65.
- 258) Vibrational-Rotational Energy Levels of Diatomic Molecules from the Hill Determinant Method, D. A. Estrín, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Mol.*

- Struct. THEOCHEM* **43** (1988) 257-260.
- 259) Algunas Consideraciones Acerca de Cómo Encarar el Inicio de un Curso Introductorio de Química Cuántica, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Bol. Soc. Quím. (Perú)* **LIII**(3) (1987) 163-165.
- 260) Aplicación de la Teoría del Aprendizaje Significativo al Estudio Teórico de Sistemas Materiales, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quím.* **1**(1) (1988) 187-196.
- 261) Cuantificación de la Complejidad y Densidad en la Escritura de Textos Científicos, G. A. Arteca, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quím.* **1**(1) (1988) 209-216.
- 262) A Theoretical Study of the Interaction of a Single Water Molecule with Pt(111) and Pt(100) Clusters. Influence of the Applied Potential, G. L. Estiú, S. A. Maluendes, E. A. Castro, A. J. Arvia, *J. Phys. Chem.* **92**(9) (1988) 2512-2515.
- 263) Algunos Aportes de la Psicología de la Sumisión a la Enseñanza-Aprendizaje de la Ciencia, E. A. Castro, *Ens. Cienc. Número Extra (III Congreso)*, **Tomo I** (1989) 159-160.
- 264) Mecanismos de Adsorción Electroquímica CO/CO₂. Estudio Semiempírico de las Interacciones Cooperativas que Condicionan su Cinética, G. L. Estiú, S. A. Maluendes, E. A. Castro, A. J. Arvia, *Proc. XI Simp. Iberoam. Cat.* (1988) 695-702.
- 265) The Exchange Correction in the Thomas-Fermi Model for Atoms in a Strong Magnetic Field, M. D. Glossman, E. A. Castro, *S. Afr. J. Phys.* **11**(1) (1988) 18-20.
- 266) Generalized Hill Determinant Method, D. A. Estrín, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Lett. A* **130**(6-7) (1988) 330-332.
- 267) Ab-initio Molecular Orbital Calculations on Linkage Isomers of MgF₂-CO Adducts, A. H. Jubert, S. A. Maluendes, E. A. Castro, K. Nakamoto, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **168** (1988) 317-322.
- 268) Approximate Polynomial Expressions for RKRR Curves of Diatomic Covalent Molecules, J. L. Villaveces, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Math. Chem.* **2**(3) (1988) 217-226.
- 269) New Method for Confluent Singularity Analysis of Power Series, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Math. Chem.* **2**(3) (1988) 227-239.
- 270) Calculation of Atomic Polarizabilities with Density Functionals, M. C. Donnay, R. E. Cachau, E. A. Castro, *Int. Cent. Theor. Phys.* **IC/86/194** (1986) 1-11.
- 271) Theoretical Calculation of the Singlet-Singlet Electronic Transition and Photochemical Reactivity in Fluoroxytrifluoromethane, Fluoroperoxytrifluoromethane, bis(Trifluoromethyl)peroxide and bis-(Trifluoromethyl)trioxide, E. Ottavianelli, E. A. Castro, A. H. Jubert, *J. Fluor. Chem.* **38**(1) (1987) 75-84.
- 272) On the Numerical Integration of the Schrodinger Equation, C. G. Díaz, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Phys. A: Math. Gen.* **21** (1988) L11-L13.
- 273) Some Improved Combination Rules for Two-Body van der Waals Coefficients, E. A. Bidacovich, E. Ottavianelli, E. A. Castro, *J. Fiz. Malay.* **9**(1) (1988) 25.
- 274) Tight Bounds to the Schrodinger Equation Eigenvalues, F. M. Fernández, G. I. Frydman, E. A. Castro, *J. Phys. A* **22** (1989) 641-645.
- 275) Theoretical Study of the Calcium Dication Hydrates, R. E. Cachau, H. O. Villar, E. A. Castro, *Theoret. Chim. Acta* **75**(4) (1989) 299-306.
- 276) Variational Test on the Relationship between Gradient Expansion Terms in the

- Kinetic Energy Density Functional, M. D. Glossman, E. A. Castro, *Phys. Rev. A* **39**(9) (1989) 4870-4872.
- 277) Aplicaciones de la Teoría del Aprendizaje Significativo al Estudio Teórico de Sistemas Materiales, E. A. Castro, *Rev. Chil. Educ. Quim.* **13**(2) (1988) 15-20. Reimpreso con autorización en la *Rev. Bol. Educ. Sup. Cienc.* **1**(1) (2001) 71-80.
- 278) Variational Principle for Obtaining Approximate Functions of the Thomas-Fermi Equation for Atoms in a Strong Magnetic Field, M. D. Glossman, E. A. Castro, *Bulg. J. Phys.* **15**(5) (1988) 459-464.
- 279) Atomic Calculations Through a Modified Thomas-Fermi-Dirac-Weizsacker Theory, M. D. Glossman, E. A. Castro, *Z. Phys. D* **13** (1989) 89-93.
- 280) Una Técnica Omega Biparamétrica Mejorada. IX- Aplicación del ITPOT/RF a Estados Excitados. Estudio de Indicadores de Constante Dieléctrica, R. E. Cachau, E. Ottavianelli, E. A. Castro, *Anal. Asoc. Quim. Arg.* **77**(3) (1989) 225-231.
- 281) Una Interpretación Gráfica del Meta-Teorema de Ortogonalidad de la Teoría de Grupos, E. A. Castro, *Rev. COPAQUI* **9**(1) (1989) 18-22.
- 282) On the Riccati Equation for Eigenvalue Problems, F. M. Fernández, E. A. Castro, J. F. Ogilvie, *Int. J. Quantum Chem.* **35** (1989) 61-65.
- 283) Alternative Treatment of Rotational Quantum Systems, D. A. Estrín, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Z. Phys. D* **14**(1) (1989) 51-56.
- 284) Una Introducción Elemental a la Teoría de los Funcionales de la Densidad. II- Aplicaciones al Estudio de Especies Atómicas, M. D. Glossman, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quim.* **Vol.I Año II** (1989) 19-27.
- 285) Preparación y Presentación de Manuscritos Científicos, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quim.* **Vol.I Año II** (1989) 11-12.
- 286) Hypervirial-Perturbative Method for Systems with Non-Bound States, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Fiz. Mal.* **10** (1989) 41-43.
- 287) On the Bilinear Approximation for Time-Dependent Hamiltonians, J. Echave, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Chem. Phys.* **92**(2) (1990) 1188-1193.
- 288) Algunas Nuevas Expresiones de la Teoría de Expansiones $1/N$, S. A. Maluendes, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Fol. Chim.Theor. Lat.* **XVI**(3) (1988) 117-132.
- 289) Teoría de los Funcionales de la Densidad y Reactividad Química, M. D. Glossman, E. A. Castro, *Fol. Chim. Theor. Lat.* **XVI**(2) (1988) 71-100.
- 290) Electronic and Vibrational Properties of ONNO₂ and ONNSO, S. A. Maluendes, A. H. Jubert, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **204** (1990) 145-151.
- 291) On the Convergence of the Magnus Expansion in the Schrödinger Representation, F. M. Fernández, J. Echave, E. A. Castro, *J. Math. Phys.* **31**(2) (1990) 338-341.
- 292) Analytical Approximate Eigenvalues of Bounded Quantum Systems, D. A. Estrín, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Bulg. J. Phys.* **16** (1989) 264-267.
- 293) Evaluación Primaria de la Producción Científica, E. A. Castro, *Anal. Acad. Nac. Cienc. Exac. Fis. Nat.* **40** (1988) 225-229.
- 294) Calculation of the $\langle p \rangle$ and $\langle p^{-1} \rangle$ from Variational Atomic Electron Densities, M. D. Glossman, E. A. Castro, *Chem. Phys. Lett.* **167**(4) (1990) 305-308.
- 295) Calculation of Vibrational Transition Probabilities in Molecular Collisions: A Recursive Algebraic Procedure, J. Echave, F. M. Fernández, E. A. Castro, D. A.

- Micha, *J. Chem. Phys.* **91** (1989) 924-928.
- 296) A Quantum Chemistry Approach to the Electrooxidation Mechanism of Adsorbed CO on Pt Single Crystal Clusters, G. L. Estiú, S. A. Maluendes, E. A. Castro, A. J. Arvia, *J. Elect. Chem. Interf. Electrochem.* **283**(1-2) (1990) 303-318.
- 297) Singularities of the Eigenvalues of the Harmonic Oscillator with von Neumann Boundary Conditions, G. I. Frydman, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **218** (1988) 59-62.
- 298) Perturbative Calculations on the Heat of Solvation of Simple Salts, R. E. Cachau, H. O. Villar, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **218** (1988) 71-74.
- 299) On the Hill Determinant Method, D. A. Estrín, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Phys. A* **23**(12) (1990) 2395-2400.
- 300) Theoretical Calculations Related to Cooperative Interaction Effects. The H-atom H₂O Molecule-Surface Site Ensemble at Pt(111) and Pt(100) Clusters, G. L. Estiú, S. A. Maluendes, E. A. Castro, A. J. Arvia, *J. Electr. Chem. Interf. Electrochem.* **284**(2) (1990) 289-302.
- 301) Potential Energy Curves of Diatomic Molecules from the Hill Determinant Method D. A. Estrín, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Math. Chem.* **5**(2) (1990) 177.
- 302) Another Version of the Operator and Scaling-Variational Methods, F. M. Fernández, E. A. Castro, G. A. Arteca, *J. Univ. Kuwait (Science)* **17**(1) (1990) 91-94.
- 303) Some Applications of Scheidemann-Dreizler's Solution of the TFDW Equation, M. D. Glossman, E. A. Castro, *Chem. Phys. Lett.* **170**(1) (1990) 61-68.
- 304) An Extensive Numerical Test for a New Thomas-Fermi Theory, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Bol. Soc. Quim. (Perú)* **LVI**(1) (1990) 46-54.
- 305) Semiempirical Approach to Drug Design. Antispasmodic Activity of Benzhydrylamine Derivatives, G. L. Estiú, R. E. Cachau, E. A. Castro, L. B. Blanch, *Il Farmaco* **XLV**(7-8) (1990) 889-900.
- 306) Atomic Properties Through Thomas-Fermi-Dirac-Weizsacker, M. D. Glossman, E. A. Castro, *Acta Phys. Hung.* **67**(1-2) (1990) 183-191.
- 307) A Diagrammatic Calculation of Matrix Elements Between Configurations for Electronic Operators, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Int. J. Math. Educ. Sci. Technol.* **20**(6) (1989) 897-902.
- 308) Theoretical Calculation of the Singlet-Triplet Electronic Transition and Photochemical Reactivity in Carbonyl Fluoride, Trifluoroacetyl Fluoride and Perfluoromethyl Perfluoroacetate, E. Ottavianelli, E. A. Castro, A. H. Jubert, *Chin. J. Chem.* **2** (1990) 109-115.
- 309) Further Results on Systematic Regularities of Molecular SCF Energies E. A. Castro, *Chin. J. Chem.* **2** (1990) 116-120.
- 310) ASED-MO Calculations Related to the Electrooxidation of Adsorbed CO on Pt Single Crystal Clusters. Influence of Underpotential Deposited Cu Atoms, M. B. López, P. Paredes-Olivera, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, *Proc. 12th Iberoamer. Symp. Catal.* (1990) 297-307.
- 311) Reflexiones Acerca de la Sobreabundancia de Información, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **219** (1989) 1-13.
- 312) Application of the Exponential Propagation Matrix Method to the Numerical Solution of the Schrodinger Equation, C. G. Díaz, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **69** (1990) 45-48.

- 313) Polynomial Expressions for RKR Curves of Covalent Diatomic Molecules, E. Daza, J. L. Villaveces, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **69** (1990) 49-61.
- 314) Effective Nuclear Charges through the Fitting of Atomic Polarizabilities with Density Functionals, M. C. Donnamaría, R. E. Cachau, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **69** (1990) 121-132.
- 315) Quantum Topological Description of the Charge Density of Molecules ON-ON₂ and ON-NSO, O. G. Stradella, S. A. Maluendes, A. H. Jubert, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **69** (1990) 169-174.
- 316) Ab-initio Study of the Vibrational Properties of Perfluoroacetaldehyde, E. Ottavianelli, S. A. Maluendes, E. A. Castro, A. H. Jubert, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **69** (1990) 305-310.
- 317) Theoretical Study of Underpotential Deposition of Foreign Metal Atoms on Pt(111) Single Crystal Cluster Surfaces. Part I- Stability of the Different Metal UPD Layer Structures as a Function of Surface Coverage and Applied Electric Potential, M. B. López, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **69** (1990) 353-364.
- 318) Theoretical Study of Underpotential Deposition of Foreign Metal Atoms on Pt(111) Single Crystal Cluster Surfaces. Part I- Stability of the Different Metal UPD Layer Structures as a Function of Surface Coverage and Applied Electric Potential, M. B. López, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **69** (1990) 353-364.
- 319) A Quantum Chemistry Approach to the Electrooxidation of CO Adsorbed on Rh(111) Cluster Surfaces, P. Paredes-Olivera, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **69** (1990) 379-391.
- 320) Theoretical Study of the Influence of the Applied Electric Potential and the Coadsorption of Water on the Vibrational Properties of CO Adsorbed on Rh(111), P. Paredes-Olivera, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **69** (1990) 393-403.
- 321) Variational Treatment of the Particle in a One-Dimensional Box with Convex Bottom, M. D. Glossman, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Bol. Soc. Quím. (Perú)* **LVI**(2) (1990) 87-93.
- 322) Adaptación del SMOG Index de Legibilidad al Idioma Español, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quím.* **III** (1990) 1-4.
- 323) Los Químicos y las Implicaciones Lógicas, E. A. Castro, G. I. Frydman, D. Estrín, A. H. Jubert, *Anuar. Lat. Educ. Quím.* **III** (1990) 35-38.
- 324) El Concepto de Fuerza en Química, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quím.* **III** (1990) 79-89.
- 325) Does Quantum Mechanics Apply to One or Many Particles? An Alternative and more General Viewpoint, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Rev. CENIC (Ciencias Químicas)* **19**(1-3) (1988) 34-36.
- 326) La Influencia de la Sobreabundancia Informativa sobre el Referato Científico, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **220** (1990) 19-25.
- 327) Una Prueba Extensiva de una Nueva Fórmula Aproximada para Energías Moleculares, E. Ottavianelli, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Rev. Soc. Quím. México* **35**(1) (1991) 34-37.
- 328) Calculation of Heat of Solvation by a Simple Electrostatic Approach to

- Molecular Interactions, R. E. Cachau, H. O. Villar, E. A. Castro, *Chin. J. Chem.* **9**(4) (1991) 17-28.
- 329) Critical Screening Parameters for Screened Coulomb Potentials, C. G. Díaz, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Phys. A* **24**(9) (1991) 2061-2068.
- 330) Are We Condemned to be Crushed by the Information Overload? E. A. Castro, *Rev. Acad. Colomb. Cienc.* **17** (1990) 805-809.
- 331) Readability Indexes to Improve Science Writing Skills, E. A. Castro, *Rev. COPAQUI* **11**(1) (1991) 20-29.
- 332) Eigenvalues from Recurrence Relations, R. Pis Díez, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Bulg. J. Phys.* **17** (1990) 2.
- 333) Construction of Bound-State Potential Energy Curves of Diatomic Molecules from Spectroscopic Data, C. G. Díaz, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Chem. Phys.* **157** (1991) 35.
- 334) La Sobreabundancia de Información, E. A. Castro, *Vuelos* **4**(14) (1991) 3-7.
- 335) Ab-Initio Study of the Electronic, Vibrational and Rotational Properties of Perfluoroacetylchloride and Trifluoroacetaldehyde, E. Ottavianelli, E. A. Castro, A. H. Jubert, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **254** (1992) 279-286.
- 336) On the Transferability of Fock Matrix Elements Calculated by the MNDO Semiempirical Method, D. J. Barbiric, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Rev. Bol. Quim.* **10**(1) (1991) 1-15.
- 337) El Empleo de Modelos en la Enseñanza de la Química, E. A. Castro, *Ens. Cienc.* **10**(1) (1992) 73-79.
- 338) Ab-Initio Study of the Electronic, Vibrational and Rotational Properties of CF₃-OOX (X = H, F, Cl), E. Ottavianelli, E. A. Castro, A. H. Jubert, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **257** (1992) 205-216.
- 339) Una Introducción Elemental a la Teoría de los Funcionales de la Densidad. I- Fundamentos Básicos, E. A. Castro, M. C. Donnamaría, *Anuar. Lat. Educ. Quim.* **4** (1991) 167-185.
- 340) Further Remarks Concerning the Hartree-Fock Energies of N-Electron Atomic Systems, E. A. Castro, M. Fraczak, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **221** (1991) 35-38.
- 341) A Semiempirical Quantum Approach to Possible Structures of Cu Electrodeposits at Submonolayer and Monolayer Levels on Pt(100) and Pt(111) Clusters, M. B. López, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, *Surf. Sci.* **277** (1992) 184.
- 342) Una Fórmula Combinatorial para Determinar Energías del Estado Fundamental de Sistemas Atómicos con $Z \geq N(N+1)/2$, M. Fraczak, E. A. Castro, *Fol. Chim. Theor. Lat.* **XIX**(1) (1991) 17-28.
- 343) Exact Perturbation Theory of Quantum-Mechanical Systems within Boxes, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Rev. A* **46**(9) (1992) 7288-7290.
- 344) Thermal Dissociative Adsorption Interactions for a Single Water Molecule on Pt(211) Surface Cluster. Extended Hückel Calculations, G. L. Estiú, S. A. Maluendes, E. A. Castro, A. J. Arvia, *Commun. Math. Chem. MATCH* **28** (1992) 105-137.
- 345) On the Quantum Harmonic Oscillator with Time-Dependent Frequency, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Portugal. Phys.* **21**(1-2) (1992) 39-43.
- 346) A Short Version of the SOMAR Program for Microcomputer, R. E. Cachau, E. A. Bidacovich, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **222** (1992) 1-18.
- 347) Towards a Possible Synthesis of Concept Maps and Mind Maps: Thematic

- Maps, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **222** (1992) 51-58.
- 348) Construction of Bound-State Potential Energy Curves of Diatomic Molecules from Vibration-Rotational Spectroscopic Data, C. G. Díaz, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **280** (1993) 89-99.
- 349) Application of the Exponential Propagation Matrix Method to the Numerical Solution of the Schrodinger Equation, F. M. Fernández, C. G. Díaz, E. A. Castro, *Acta Phys. Slov.* **43**(1) (1993) 61-73.
- 350) Quasi-Algebraic Treatment of Bound States of Simple One-Electron Systems, F. M. Fernandez, E. A. Castro, *J. Math. Chem.* **12**(1-4) (1993) 1-8.
- 351) A New Implementation of Stationary Perturbation Theory for Separable Quantum Mechanical Problems, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Chem. Phys.* **98**(8) (1993) 6392-6394.
- 352) Total Hartree-Fock Atomic Energies from Improved $1/Z$ and $1/N^{1/3}$ Expansions, E. A. Castro, A. H. Jubert, *Malay. J. Phys.* **13** (1992) 63.
- 353) Semiempirical Calculations of the Vibrational Frequency of CO on Noble Metal Single-Crystal Surfaces, P. Paredes-Olivera, R E. P. M. Leiva, E. A. Castro, A. J. Arvia, *J. Electroanal. Chem.* **351**(1-2) (1993) 65-80.
- 354) On the Semiclassical Approximation to Molecular Collisions, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Proc. IV Simp. Bras.Theor. Chem.* 1987 (Published in 1993).
- 355) A Factorization Method with Application to Perturbation Theory, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Math. Phys.* **34**(8) (1993) 3670-3675.
- 356) Comment on Iterative Bogoliubov Transformations and Anharmonic Oscillations, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Rev. A* **48**(4) (1993) 3398.
- 357) Hypervirial Perturbative Method and Periodic Boundary Conditions, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **287** (1993) 29-33.
- 358) Semiclassical Algebraic Approach to Translational-Vibrational Energy Transfer in Molecular Collisions, J. Echave, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Acta Phys. Slov.* **43**(6) (1993) 417-424.
- 359) A Simplified Scheme of Atom Equivalents to Relate Ab-Initio Energies to Enthalpies of Formation, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **304** (1994) 93-99.
- 360) 1994 Año de la Química, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **314** (1994) 53.
- 361) A Quantum Chemistry Description of Carbon Monoxide and Water Adsorbates on Single-Crystal Rh and Pt Clusters, P. P. Olivera, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, *J. Electroanal. Chem.* **369** (1994) 131-144.
- 362) Semiempirical Study of the Conformation of Tetroxane and its Halogenated Derivatives, N. Jorge, N. Peruchena, L. F. R. Cafferata, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **369** (1994) 315-324.
- 363) Procedimientos Sencillos para Ilustrar Algunos Principios Matemáticos Fundamentales de la Mecánica Cuántica, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quim.* **6** (1993) 15-30.
- 364) Peroxo Intermediates in the Electroreduction of O₂ Adsorbed on Pt(100) and Pt(111) Electrodes in Acid Media. Theoretical Interpretation of the Structure Sensitivity, F. Zinola, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, *J. Phys. Chem.* **98** (1994) 7566.
- 365) On the Numerical Solution of the Schrodinger Equation in One Dimension, C. G. Díaz, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Acta Phys. Slov.* **43**(1) (1993) 7-15.

- 366) Theoretical Study of 1,2,4,5-Trioxazines, N. Jorge, N. Peruchena, L. F. R. Cafferata, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **334** (1995) 249-255.
- 367) Obituario. Sir Karl R. Popper, *Panam. Newsl.* **7**(1) (1994) 6.
- 368) Theoretical Study of the Photochemical Decomposition of CF₃OF, A. H. Jubert, E. A. Castro, E. E. Ottavianelli and R. E. Cachau, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **335** (1995) 97-105.
- 369) Ciencia por Correo, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **225**(1) (1995) 81-98.
- 370) El Programa Ciencia por Correo del Museo de Ciencia de Boston, E. A. Castro, *Panam. Newsl.* **7**(2) (1995) 6.
- 371) Aplicación de Rayos Láser en la Fabricación de Estructuras Nanométricas E. A. Castro, *Ind. Quim.* **320** (1995) 52-53.
- 372) Hacia la Pronta Producción Masiva de Vehículos Eléctricos, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **225**(2) (1995) 185-188.
- 373) Theoretical Calculation of Heats of Formation of Carboxylic Acids and Esters, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **339** (1995) 239-242.
- 374) La Química como Centro de Convergencia de las Ciencias, las Humanidades y las Artes, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quim.* **7**(2) (1994) 293-308.
- 375) Química Teórica: Un Desafío a la Imaginación y la Apertura de Nuevas Posibilidades en el Desarrollo y la Aplicación de la Química, E. A. Castro, *Anal. Acad. Nac. Cs. Ex. Fis. Nat.* **46** (1994) 205-218.
- 376) El Manipuleo Microscópico de las Reacciones Químicas, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú* **LXI**(2) (1995) 128-130.
- 377) Una Aproximación Semiempírica al Estudio de la Interfase Electroquímica, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, *Fol. Chim. Theoret. Lat.* **XXI** (1994) 79-111.
- 378) Escribir Sobre Química para Aprender Química, E. A. Castro, *Panam. Newsl. Chem. Educ.* **8**(4) (1995) 8-9.
- 379) Plasmas Pulverulentos Cósmicos y la Manufactura de Chips Electrónicos, E. A. Castro, *Ing. Cienc. Quim.* **15**(2) (1995) 54-56.
- 380) Estimation of Enthalpies of Formation of Highly Reactive Organic Compounds, E. A. Castro, *J. Chem. Soc. Pak.* **17**(3) (1995) 156.
- 381) La Observación Individual de las Moléculas, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **322** (1995) 44-45.
- 382) Polímeros Electroactivos para Aplicaciones en Dispositivos Electrónicos, E. A. Castro, *Ciencia* **46**(4) (1995) 504-506.
- 383) Los Interferómetros de Materia y Naturaleza Dual Partícula-Onda, E. A. Castro, *Ciencia* **47** (1996) 200-204.
- 384) Nanolitografía, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **324** (1996) 32-35.
- 385) Comparison of Relative Heats of Formation from a Simplified Scheme of Atom Equivalent, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú* **LXII**(1) (1996) 217-19.
- 386) A Note on Potentials with Non-Trivial Scales and the Quantum-Mechanical Virial Theorem, E. A. Castro, *Il Nuovo Cimento B* **111**(9) (1996) 1039-1040.
- 387) La Aproximación Irrestricta al Cálculo de Estructuras Electrónicas Moleculares, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quim.* **VIII** (1) (1996) 87-103.
- 388) Simulaciones Computacionales de Polímeros en las Interfases, E.A. Castro, *Quim. Act. Fut.* **5**(2) (1996) 119-121.
- 389) La Superación del Modelo Lineal de Organización, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **226**(1) (1996) 83-89.

- 390) El Modelado en la Enseñanza de la Química como Centro de Convergencia de las Disciplinas Científicas, E. A. Castro, *Rev. Bol. Quim.* **13**(1) (1996) 23-24.
- 391) Algunos Argumentos Erróneos Respecto de los Conceptos de Objetividad y Verdad en Ciencia, E. A. Castro, *Espacios* **II**(7) (1996) 5-9.
- 392) An Improved Simplified Scheme of Atom Equivalents to Relate Ab-Initio Energies to Enthalpies of Formation, C. Vericat, E. A. Castro, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **34** (1996) 167-177.
- 393) Análisis de un Proceso de Validación para un Protocolo Empírico para Calcular Entalpías de Formación de Hidrocarburos, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú*, **LXII**(4) (1996) 239-243.
- 394) Avances en Nanolitografía con Monocapas Poliméricas, E. A. Castro, *Innov. Cienc.* **V**(3) (1996) 20-22.
- 395) Calculation of Heats of Formation of Hydrazides by a Simplified Scheme of Atom Equivalents, E. A. Castro, *Ing. Cienc. Quim.* **16**(2) (1996) 75-77.
- 396) Vibrational Spectra of 1-Hydroperoxy-1-(p-Nitrophenyl) Ethanol Molecule, A. H. Jubert, E. A. Castro, L. F. R. Cafferata, *Asian J. Spectrosc.* **2**(1) (1997) 17-23.
- 397) Some Mistaken Arguments Against Objectivity and Truth in Science, E. A. Castro, *Rev. Acad. Colomb. Cienc.* **21**(79) (1997) 119-123.
- 398) Avances Recientes en la Mecanoquímica, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **328** (1997) 27-28.
- 399) Una Nueva Rama de la Química: Los Árboles Moleculares, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú* **LXIII**(1) (1997) 26-31.
- 400) Avances Actuales en la Determinación Teórica y Experimental de las Estructuras Moleculares, E. A. Castro, *Rev. COPAQUI* **16**(1) (1996) 21-25.
- 401) Algunos Aspectos Actuales Concernientes a la Gestión de Calidad Total, E. A. Castro, *ESPACIOS* **III**(9) (1997) 53-63.
- 402) Estudios Teóricos de las Ciclodextrinas y sus Complejos de Inclusión, E. A. Castro, D. J. Barbiric, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **227**(1) (1997) 93-116.
- 403) Thomas-Fermi Density Functional and Atomic Radii, M. C. Donnamaría, E. A. Castro, *Turk. J. Phys.* **21** (1997) 1-10.
- 404) Los Orígenes Atómicos del Fenómeno de Fricción, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **329** (1997) 22-23.
- 405) ¿Un Nuevo Estado de Agregación de la Materia?, E. A. Castro, *Ing. Cs. Quim.* **17**(1) (1997) 30-33.
- 406) El Manipuleo Óptico a Nivel Individual de las Moléculas del ADN, E. A. Castro, *Educ. Quim.* **3**(2) (1997) 3-6.
- 407) Perspectivas de la Computación Cuántica, E. A. Castro, *Rev. COPAQUI* **17**(1) (1997) 34-36.
- 408) Topological Analysis of C-H...O Hydrogen Bonds, G. L. Sosa, N. M. Peruchena, R. H. Contreras, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **401** (1997) 77-85.
- 409) Improved Simple Protocols to Calculate Hydrocarbon Enthalpies of Formation from Ab-Initio Total Energies, E. A. Castro, *Comp. & Chem.* **21**(5) (1997) 305-308.
- 410) ¿Qué es la Sonoluminiscencia?, E. A. Castro, *Innov. Cienc.* **6**(3) (1997) 18-19.
- 411) La Dinámica de las Reacciones Químicas Ultrarrápidas en Racimos Moleculares Iónicos, E. A. Castro, *Rev. Acad. Colomb. Cs. Ex. Fis. Nat.* **81** (1997) 565-568.
- 412) Estudios Experimentales Recientes del Estado de Transición, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú* **XLIII**(3) (1997) 171-174.

- 413) Application of an Improved Simplified Scheme of Atom Equivalents to Calculate Heats of Formation of Alkenes, E. A. Castro, L. Gavernet, M. Firpo, *Acta Chim. Slov.* **44**(3) (1997) 327-333.
- 414) El Modelado en la Enseñanza de la Química, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quim.* **9** (1997) 1-5.
- 415) Un Estudio Introductorio a la Capacidad de los Alumnos para Manejar Modelos Físicos y Químicos, A. H. Jubert, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quim.* **9** (1997) 26-34.
- 416) Cuando lo Invisible va Cobrando Visibilidad. I - Panorama General, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú* **LXIII**(4) (1997) 224-235.
- 417) Cuando lo Invisible va Cobrando Visibilidad. II - Los Microscopios de Pruebas de Barrido, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú* **LXIII** (4) (1997) 236-241.
- 418) Cuando lo Invisible va Cobrando Visibilidad. III - Una Visión Directa de las Reacciones Moleculares, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú* **LXIII**(4) (1997) 242-246.
- 419) Cuando lo Invisible va Cobrando Visibilidad. IV - El Mundo Íntimo de las Células Vivas, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú* **LXIII**(4) (1997) 247-251.
- 420) Todos Somos Líderes, E. A. Castro, *Vuelos* **X**, #35 (1998) 16-20.
- 421) Ingeniería de Superficies de Alcanotioles Depositadas sobre Películas de Oro, E. A. Castro, *Rev. Asoc. Venez. Quim.* **20**(4) (1997) 9-16.
- 422) El Papel de la Luz en la Fotosíntesis Bacteriana, E. A. Castro, *Rev. Soc. Quim. Mex.* **41**(6) (1997) 258-260.
- 423) La Generación de Recursos y el Aumento de la Población, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quim.* **X** (1998) 6-9.
- 424) Un Nuevo Estado Estable de los Copolímeros en Bloque, E. A. Castro, *Rev. COPAQUI* **17**(2) (1997) 73-76.
- 425) Algunas Tendencias Actuales en el Ámbito de la Ciencia y la Tecnología, E. A. Castro, *Revista CET* **7** (1998) 46-51.
- 426) La Superfluidez del ^3He , E. A. Castro, *Espacios* **IV** (1998) 44-48.
- 427) Theoretical Study of Hydrogen Bonding in the 1-Hydroperoxy-1-(p-nitrophenyl) Ethanol, A. H. Jubert, E. A. Castro, L. F. R. Cafferata, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **433** (1998) 227-230.
- 428) Theoretical Study of *cis*- and *trans*-3,6-Dimethoxy-1,2,4,5-Tetroxane Molecule, N. Jorge, N. Peruchena, L. F. R. Cafferata, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **433** (1998) 311-317.
- 429) A Semiempirical Quantum Approach to the Formation of Carbon Dioxide Adsorbates on Pt(100) and Pt(111) Cluster Surfaces, C. F. Zinola, C. Gomis-Bas, G. L. Estiú, E. A. Castro, A. J. Arvia, *Langmuir* **14** (1998) 3901-3908.
- 430) La Alfabetización Científica del Ciudadano, E. A. Castro, *Educ. Cienc.* **2** (1998) 69-72.
- 431) Cajas Cuánticas Acopladas como Moléculas Artificiales, E. A. Castro, *Educ. Quim.* **4**(1) (1998) 10-16.
- 432) Cuasi-partículas con Carga Electrónica Fraccional, E. A. Castro, *Espacios* **IV** No.13 (1998) 2-6.
- 433) La Cooperación Global en Ciencia y Tecnología, E. A. Castro, *Revista CET* **VII** No.14 (1998) 28-37.
- 434) Cuando lo Invisible va Cobrando Visibilidad. VII- El Empleo de Semiconductores Amorfos en la Imagen Digital de Rayos X. Primera Parte, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú* **LXIV**(3) (1998) 188-197.

- 435) Cuando lo Invisible va Cobrando Visibilidad. VII- El Empleo de Semiconductores Amorfos en la Imagen Digital de Rayos X. Segunda Parte, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú* **LXIV**(3) (1998) 198-207.
- 436) Application of the Bogoliubov Transformation to Anharmonic Oscillators, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Anal. Acad. Nac. Cs. Ex. Fis. y Nat.* **49** (1997) 105-107.
- 437) Experimental and Theoretical Study of the Vibrational Spectra of the 3,3,6,6,9,9-hexamethyl-1,4,7-cyclononatriperoxane, A. H. Jubert, R. Pis Diez, E. A. Castro, A. I. Cañizo, L. F. R. Cafferata, *J. Raman Spectr.* **30** (1999) 45-51.
- 438) Cuando lo Invisible va Cobrando Visibilidad. VIII- Un Nuevo Microscopio de Momento, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú* **LXIV**(4) (1998) 256-259.
- 439) Cuando lo Invisible va Cobrando Visibilidad. IX- La Resonancia Magnética por Imagen Funcional, E. A. Castro, *Bol. Soc. Perú* **LXIV**(4) (1998) 260-263.
- 440) Experimental and Theoretical Study of *Trans*-3,6-Diphenyl 1,2,4,5-Tetroxane Molecule, N. Jorge, M. E. Gómez-Vara, E. A. Castro, J. C. Autino, L. F. R. Cafferata, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **459** (1999) 29-35.
- 441) Física Moderna y Espiritualidad: Algo más Sobre Sombras y Símbolos, E. A. Castro, *Vuelos* **11** (1999) 24-28.
- 442) Materiales Plásticos Fotónicos, E. A. Castro, *Rev. Soc. Quim. México* **42**(4) (1998) 179-181.
- 443) El Efecto Túnel y la Velocidad de la Luz, E. A. Castro, *Rev. Fac. Cs. Ex. Quim. Nat.* **3** (1999) 95-104.
- 444) Una Introducción Elemental al Láser Atómico, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quim.* **XI** (1998-9) 6-10.
- 445) Una Evaluación de las Actitudes Hacia la Ciencia de dos Poblaciones de Estudiantes Universitarios, M. C. Cardozo, M. B. Núñez, M. I. Aguado, N. B. Okulik, A. H. Jubert E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quim.* **XI** (1998-9) 259-268.
- 446) An Improved Calculation of Bond-Dissociation Energies of Organic Compounds Based on the Concept of Stabilization Energies, M. Firpo, L. Gavernet, E. A. Castro, *Polish J. Chem.* **73** (1999) 1041-1045.
- 447) Improved Atom Equivalents for Relating Ab Initio Energies to Hydrocarbon Enthalpies of Formation, E. A. Castro, C. Vericat, *Egyp. J. Chem.* **41**(1-2) (1998) 109-118.
- 448) La Corporación Individualizada, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **228**(1) (1998) 29-35.
- 449) Cuando lo Invisible va Cobrando Visibilidad. X – El Método del Eco Vibracional, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú* **LXV**(1) (1999) 54-58.
- 450) Cuando lo Invisible va Cobrando Visibilidad. XI – Imágenes Instantáneas de los Electrones en las Interfases, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú* **LXV**(1) (1999) 59-62.
- 451) Cuando lo Invisible va Cobrando Visibilidad. XII – El Plegamiento Rápido de las Proteínas, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú* **LXV**(2) (1999) 115-118.
- 452) La Administración Integrada de los Insecticidas, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú* **LXV**(2) (1999) 119-129.
- 453) Heats of Formation of Alkenes Calculated from Simple Protocols, L. Gavernet, M. Firpo, E. A. Castro, *Rev. Roum. Chim.* **43**(11) (1998) 1079-1082.
- 454) La Computación Cuántica, E. A. Castro, *Cienc. Inv.* **52**(1,2) (1999) 3-11.
- 455) Un Cálculo Mejorado de la Energía de Disociación de los Enlaces Químicos en

- Compuestos Orgánicos, Basado en el Concepto de Energía de Estabilización, M. Firpo, L. Gavernet, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú* **LXV**(3) (1999) 163-182.
- 456) Sensores Químicos Constituidos por Películas de Compuestos Superconductores, E. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú* **LXV**(3) (1999) 191-204.
- 457) Los Fraudes Científicos que se Reactualizan. El Affaire Sokal, E. A. Castro, *Espacios* **5** (15) (1999) 21-26.
- 458) La Estructuración y la Administración del Proceso de Investigación y Desarrollo en las Compañías, E. A. Castro, *Revista CET* **VIII**(16) (1999) 59-65.
- 459) Hydrocarbon Enthalpies of Formation from Ab Initio Calculations Improved Through Bond Parameters, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *J. Kor. Chem. Soc.* **43**(6) (1999) 621-627.
- 460) Topological Analysis of C-H...O Hydrogen Bonds, G. L. Sosa, N. M. Peruchena, R. H. Contreras, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **401** (1997) 77-85.
- 461) Theoretical Study on Gas Phase Complex Formation Between 3-Hydroxybutanoic Acid and Cyclodextrins, E. A. Castro, A. H. Jubert, *Atual. Fisicoq. Org.* (1999) 246-256.
- 462) El Arte de la Simplificación en la Ciencia de los Materiales, E. A. Castro, *Rev. Bol. Quim.* **16**(1) (1999) 26-32.
- 463) La Teleportación Cuántica y el Manipuleo de la Información, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **228**(2) (1998) 5-10.
- 464) Las Drogas Liposomales, E. A. Castro, *Rev. Acad. Colomb. Cs. Ex. Fis. Nat.* **89**(23) (1999) 625-634.
- 465) Empirical Calculation of Vaporization Enthalpies at 298.15K of the n-Alkanes from C₂₁ to C₂₈ and C₃₀, M. Firpo, L. Gavernet, E. A. Castro, *Rom. J. Phys.* **44**(1,2) (1999) 181-187.
- 466) El Decrecimiento Global del CO en la Atmósfera y sus Implicancias Ambientales, E. A. Castro, *Rev. Cs. Quim. (Cuba)* **X**(1,2) (1998) 76.
- 467) El Flujo de Polímeros en Películas Delgadas, E. A. Castro, *Rev. Cs. Quim. (Cuba)* **X**(1,2) (1998) 78.
- 468) Conservación de la Masa y Cálculos Estequiométricos. Resultados de Ciertos Cambios Metodológicos en su Enseñanza de Química General, M. I. Aguado, M. B. Núñez, N. B. Okulik, E. A. Castro, *Educ. Quim.* **5**(3) (1999) 7-14.
- 469) El Enfriamiento Perfecto, E. A. Castro, *Educ. Quim.* **5**(3) (1999) 15-16.
- 470) Cuando las Dimensiones Cuentan. Las Computadoras Futuras Deberían ser Construidas por los Químicos Orgánicos, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **338** (2000) 34-35.
- 471) Los Elementos 116 y 118 Buscan Posicionarse en la Tabla Periódica, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **338** (2000) 36.
- 472) Tautomeric Equilibrium of Amides and Related Compounds. Theoretical and Spectral Evidences, P. E. Allegretti, E. A. Castro, J. J. P. Furlong, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **499** (2000) 121-126.
- 473) Lo Ordinario que se Hace Extraordinario: El Semiconductor de Silicio, E. A. Castro, *Rev. Fac. Cs. Ex. Quim. Nat.* **4** (2000) 59-71.
- 474) Calculation of Heats of Formation of Hydrazides with an Improved Simplified Scheme of Atom Equivalents, M. Firpo, L. Gavernet, E. A. Castro, *Rev. COPAQUI* **19**(1,2) (1999) 32-36.
- 475) Una Propuesta de Cambio para los Trabajos Prácticos Correspondientes a los Cursos Universitarios de Química, M. V. Piaggio, M. L. Olivares, E. A. Castro, *Anuar. Lat.*

- Educ. Quim.* **XII** (1999-2000) 55-63.
- 476) Percepciones Sobre el Proceso de Enseñanza-Aprendizaje en un Curso de Química Básica. Opinión de los Alumnos, M. B. Núñez, M. I. Aguado, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quim.* **XII** (1999-2000) 74-78.
- 477) Maximum Topological Distances Based Indices as Molecular Descriptors for QSPR. Part I. Application to Alkyl Benzenes Boiling Points, M. Firpo, L. Gavernet, E. A. Castro, A. A. Toropov, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **501-502** (2000) 419-425.
- 478) Maximum Topological Distances Based Indices as Molecular Descriptors for QSPR. 2- Application to Aromatic Hydrocarbons, E. A. Castro, M. Tueros, A. A. Toropov, *Comp. Chem.* **25**(5) (2000) 571-576.
- 479) UV Spectroscopic Analysis of a Substituted 1,2,4-Trioxane Molecule: Theoretical and Experimental Study of *cis*-6-Phenyl-5,6-(2-phenyl propyliden)-3,3-tetramethylen-1,2,4-trioxacyclohexane, A. H. Jubert, E. A. Castro, L. F. R. Cafferata, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **503** (2000) 165-172.
- 480) An Improved QSAR Study of Toxicity of Alcohols, G. P. Romanelli, L. F. R. Cafferata, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **504** (2000) 261-265.
- 481) La Innovación como una Estrategia de Largo Plazo, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **339** (2000) 8-11; *Noticias Químicas* **22**(73) (2000) 27-31.
- 482) La Miniaturización de la Química. 1- Conceptos Generales, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **339** (2000) 12-13.
- 483) Algunos Nuevos Materiales con Propiedades Ópticas No Lineales de Tercer Orden Marcadamente Incrementadas, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **339** (2000) 14-16.
- 484) A Rather Simple Method to Calculate log P Values in QSAR/QSPR Studies, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *Acta Chim. Slov.* **47** (2000) 281-292.
- 485) Theoretical Conformational Study of 1,2,4-Trioxane Molecule and its Halogenated Derivatives, N. Jorge, M. E. Gómez-Vara, L. F. R. Cafferata, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **530** (2000) 137-147.
- 486) A Molecular Mechanics Study of 1:1 Complexes Between Azobenzene Derivatives and β -Cyclodextrin, D. J. Barbiric, E. A. Castro, R. H. de Rossi, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **532**(1-3) (2000) 171-181.
- 487) Algunas Herramientas Analíticas para el Manejo de la Información, E. A. Castro, *Ing. Cienc. Quim.* **19**(1) (2000) 30-36.
- 488) Application of Improved Quantitative Structure-Retention Relationships to Study the Molecular Mechanism of Stationary Phases for HPCL, G. P. Romanelli, E. A. Castro, L. F. R. Cafferata, *Khimicheskaya Fizika* **19**(9) (2000) 105-109.
- 489) La Miniaturización de la Química. 2- Los Microprocesadores, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **340** (2000) 18-20.
- 490) La Miniaturización de la Química. 3- Sistemas de Análisis Totalmente Miniaturizados, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **340** (2000) 22-23.
- 491) ¿Qué es la Sonoquímica? III- Mayor Seguridad en las Condiciones de Reacción y Preparación de Micromateriales y Nanoestructuras, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú.* **LXVII**(3) (2001) 222.
- 492) Theoretical and Experimental Study of the Vibrational Spectra of 3,6-diphenyl-1,2,4,5-Tetroxane, N. Jorge, M. Gómez-Vara, L. F. R. Cafferata, E. A. Castro, *Asian J. Spect.* **4** (2000) 181-186, [CPS: physchem /0009006](https://doi.org/10.1007/s1009006)
- 493) Spectrometric and Theoretical Evidences for the Occurrence of Tautomeric Structures for Selected Ketones, P. E. Allegretti, L. Gavernet, E. A. Castro, J. J. P. Furlong,

- J. Mol. Struct. THEOCHEM* **532** (2000) 139-142.
- 494) Mass Spectrometric Analysis and Theoretical Calculations for the Occurrence of Tautomeric Structures of Selected 3(2H)Isoquinolinones, P. E. Allegretti, A. S. Cánepa, R. D. Bravo, E. A. Castro, J. J. P. Furlong, CPS: physchem/0011010, *Asian J. Spectr.* **4** (2000) 133-137.
- 495) Improved QSPR Prediction of Heats of Formation of Alkenes, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *J. Korean Chem. Soc.* **44**(6) (2000) 506.
- 496) QSPR Modeling of the Enthalpy of Formation from Elements by Means of Correlation Weighting of Local Invariants of Atomic Orbital Molecular Graphs, A. Mercader, E. A. Castro, A. A. Toropov, *Chem. Phys. Lett.* **330** (2000) 612-623.
- 497) Density Functional Analysis of the *trans* Isomers of 3,6-Diphenyl-1,2,4,5-Tetroxane Molecular, N. Jorge, M. Gómez-Vara, L. F. R. Cafferata, E. A. Castro, *Bull. Polish Acad. Sci.* **49**(3) (2001) 255-160, [CPS: physchem/0110011](#).
- 498) Inclusion Complexes of 1:2 Stoichiometry Between Azobenzenes and Cyclodextrins: A Molecular Mechanics Study, D. J. Barbiric, R. H. de Rossi, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **537** (2001) 235-243.
- 499) Calculation of Molecular Polarizability and Water Solubility of Alkanes and Alcohols, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *J. Indian Chem. Soc.* **78** (2001) 192-196, [CPS: physchem/0101001](#).
- 500) Cuando lo Pequeño no es Sólo Hermoso sino También Útil, E. A. Castro, *Ciencia* **51**(3) (2000) 36-40.
- 501) El Uso del Láser del Femtosegundo en el Estudio Químico de las Superficies, E. Castro, *Rev. Boliv. Quim.* **17**(1) (2000) 35-36.
- 502) Percepciones Sobre el Proceso de Enseñanza-Aprendizaje en un Curso de Química Básica. La Opinión de los Alumnos. Segunda Parte, M. B. Núñez, N. B. Okulik, M. I. Aguado, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quim.* **Año XIV**, No. XIV (2000-2001) 192-199.
- 503) Dificultades en el Proceso de Enseñanza-Aprendizaje de la Resolución de Problemas en Química, M. B. Núñez, M. I. Aguado, N. B. Okulik, A. H. Jubert, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quim.* **Año XIII-XIV**, No. XIII (2000-2001) 38-41.
- 504) Reciclando Aluminio en una Experiencia de Química Inorgánica, M. B. Núñez, L. López-Tévez, C. Verbik, N. Okulik, A. H. Jubert, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quim.* **Año XIV**, No. XIV (2000-2001) 165-169.
- 505) Improved Molecular Descriptors Based on the Optimization of Correlation Weights of Local Graph Invariants, G. Krenkel, E. A. Castro, A. A. Toropov, *Int. J. Mol. Sci.* **2** (2001) 57-65.
- 506) Cuando lo Invisible va Cobrando Invisibilidad. XIII- Las Nuevas Imágenes Embriológicas, E. A. Castro, *Espacios* **VII**(19) (2001) 62-65.
- 507) Extendiendo los Límites de la Ley de Moore, E. A. Castro, *Ing. Cienc. Quim.* **19**(2) (2000) 85-87.
- 508) Improved Molecular Descriptors to Calculate Boiling Points Based on the Optimization of Correlation Weights of Local Graph Invariants, G. Krenkel, E. A. Castro, A. A. Toropov, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **542**(1-3) (2001) 107-113, [CPS: physchem/0103020](#).
- 509) Calculation of Total Electronic Energies from Correlation Weighting of Local Graph Invariants, A. Mercader, E. A. Castro, A. A. Toropov, *J. Mol. Model.* **7**(1-3) (2001) 1-5. [CPS: physchem/0103018](#).

- 510) Theoretical Study of the *trans*-3,6-Dimethoxy-1,2,4-Trioxane Molecule, N. L. Jorge, M. Gómez-Vara, L. F. R. Cafferata, E. A. Castro, *Zhurnal Obshchei Khimii* **71**(8) (2001) 1391-1395. [CPS: physchem/0103017](#), *Russ. J. Gen. Chem.* **71**(8) (2001) 1314-1317.
- 511) Ameliorate QSPR Study of Alkyl-hydroperoxides, G. P. Romanelli, L. F. R. Cafferata, E. A. Castro, *Russ. J. Gen. Chem.* **71**(2) (2001) 257-260.
- 512) La Formación de un Enlace Químico y su Caracterización con un Microscopio de Escaneo Túnel, E. A. Castro, *Ing. Cienc. Quim.* **20**(2) (2002) 38-40.
- 513) Maximum Topological Distances Based Indices as Molecular Descriptors for QSPR. 4-Modeling the Enthalpy of Formation of Hydrocarbons from Elements, A. Mercader, E. A. Castro, A. A. Toropov, *Int. J. Mol. Sci.* **2** (2001) 121-134.
- 514) La Miniaturización de la Química. IV- Electroforesis en un Procesador, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **No. 341**, Julio 2001, 26-27.
- 515) Maximum Topological Distance-Based Indices as Molecular Descriptors for QSPR. 3- Calculation of the Hydrophobicity of Polyaromatic Hydrocarbons, M. Tueros, E. A. Castro, A. A. Toropov, *J. Molec. Model.* **7**(6) (2001) 178-183.
- 516) Calculation of pK Values of Flavylum Salts from the Optimization of Correlation Weights of Local Graph Invariants, O. Peruzzo, D. Marino, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **572**(1-3) (2001) 53-60, [CPS: physchem/0103031](#).
- 517) Ciencia, Tecnología y Desarrollo Social, E. A. Castro, *Vuelos XIII*, #47 (2001) 22-26. (Reimpreso en la *Revista CET*, Año 12, No.23, Octubre 2003, 26-29).
- 518) El Suministro Controlado y Regulado de los Pesticidas, E. A. Castro, *Not. Quim.* **23**, No.25 (2001) 23-24.
- 519) Diseño de un Cuestionario Diagnóstico Acerca del Concepto “Enlace Químico”, M. B. Núñez, M. I. Aguado. N. B. Okulik, A. H. Jubert, E. A. Castro, *Alternativas Año VI*, No.23 (2001) 187-209.
- 520) ¿Qué es la Sonoquímica? I- Generalidades, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú LXVII*(1) (2001) 61-66.
- 521) ¿Qué es la Sonoquímica? II- Mejoras en las Velocidades y Mayores Rendimientos de las Reacciones Químicas, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú LXVII*(2) (2001) 136-144.
- 522) Los Cuasicristales y una Nueva Clase de Orden, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú LXVI*(2) (2000) 113-118.
- 523) Los Usos Potenciales de Carácter Terapéutico de la Nicotina, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú LXVI*(3) (2000) 170-174.
- 524) Molecular Mechanics Study of the Molecular Structure of Cyclo-(NPX₂)_n (n = 2, 3, 4, 5 and X = H, F, Cl) Phosphazenes, V. Mora, N. Rendtorff, E. A. Castro, *Khimicheskaya Fizika* **20**(3) (2001) 37-41, [CPS: physchem/0110010](#).
- 525) Enseñanza de la Geometría Molecular con el Auxilio de Modelos, L. López-Tévez, E. Sánchez, M. B. Okulik, E. A. Castro, *Ens. Cienc.* Número Extra, VI Congreso, (2001) 248.
- 526) La Fotoquímica sobre Superficies Alineadas, E. A. Castro, *Rev. Bol. Quim.* **18**(1) (2001) 99-100.
- 527) Relationship Between Kováts Retention Indices and Molecular Descriptors of 1-(2-Hydroxy)-3-aryl propane-1,3-diones, G. P. Romanelli, J. Jios, J. C. Autino, L. F. R. Cafferata, E. A. Castro, [CPS: physchem/011009](#), <http://www.thescientificworld.com/scibase/searchdetails.asp?tool=pub>, *TheScientificWorld Journal* **1** (2001) 897-905.

- 528) An Experience of Investigation in Teaching Atomic Structure, N. Okulik, M. B. Núñez, M. I. Aguado, E. A. Castro, *J. Sci. Educ.* **3**(1) (2002) 31-33.
- 529) Improved Atom Equivalents Method for Converting Density Functional Energy Calculated on Molecular Mechanics Structures to Heats of Formation, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, [CPS: physchem/01030228](https://doi.org/10.1002/physchem.01030228), *Arkivoc* **2**(6) (2001) 227-241.
- 530) Mass Spectral and Theoretical Studies on the Tautomerism of β -Diketones, P. E. Allegretti, L. Gavernet, E. A. Castro, J. J. P. Furlong, *Asian J. Spectrosc.* **5**(2) (2001) 63-68, [CPS: orgchem/0110002](https://doi.org/10.1002/orgchem.0110002).
- 531) Topological and NBO Analysis of Hydrogen Bonding Interactions Involving C-H...O Bonds, G. L. Sosa, N. M. Peruchena, R. H. Contreras, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **577** (2002) 219-228, [CPS: physchem/0103021](https://doi.org/10.1002/physchem.0103021).
- 532) ¿Qué es la Teoría de Cuerdas?, E. A. Castro, *Rev. Cienc. Exac. Ing. (CET)* **Año 10**, No.20 (2001) 46-50.
- 533) QSPR Study of Boiling Points of Alkyl Alcohols Via Improved Polygonal Relationships, E. A. Castro, M. Tueros, *Phil. J. Sci.* **130**(2) (2001) 111-117. [CPS: physchem/0110012](https://doi.org/10.1002/physchem.0110012).
- 534) El Laboratorio Virtual de Investigación y Desarrollo, E. A. Castro, *Rev. Bol. Educ. Sup. Cienc.* **2** (2002) 43-48.
- 535) Predicción de los Calores de Formación de Diazoazoles y Azolilidenos Calculados por una Aproximación Mejorada de Equivalentes Atómicos, E. A. Castro, L. Gavernet, M. Firpo, *Bol. Soc. Quim. Perú*, **LXVII**(4) (2001) 259-266.
- 536) Los Líquidos Iónicos y su Empleo en la Electroquímica y el Procesamiento Químico, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú*, **LXVII**(4) (2001) 267-272.
- 537) QSAR Carcinogenic Study of Methylated Polycyclic Aromatic Hydrocarbons Based on Topological Descriptors Derived from Distance Matrices and Correlation Weights of Local Graph Invariants, D. J. G. Marino, Pablo J. Peruzzo, E. A. Castro, A. A. Toropov, *Internet Electron. J. Molec. Des.* **1**(2002) 108-114, [CPS: physchem/0110006](https://doi.org/10.1002/physchem.0110006), <http://www.biochempress.com>.
- 538) Los Líquidos Iónicos y su Empleo como Solventes no Contaminantes, E. A. Castro, *FONTUS* **9** (2002) 153.
- 539) Theoretical Study of Substituted Trioxanes: *trans*-3,6-Dimethoxy-1,2,4-Trioxane, N. Jorge, M. Gómez-Vara, L. F. R. Cafferata, E. A. Castro, *Acta Chim. Slov.* **49**(1) (2002) 111-120, [CPS: physchem/0110016](https://doi.org/10.1002/physchem.0110016).
- 540) Improved Correlations Between ^{19}F NMR Chemical Shifts and Physical Chemistry Properties in Fluorohalohydrocarbons, E. A. Castro, A. Mercader, [CPS: physchem/0010002](https://doi.org/10.1002/physchem.0010002), *Rev. Roum. Chim.* **46**(12) (2001) 1285-1292.
- 541) An Optimal Characterization of Structure by Means of Several Molecular Connectivity and Complexity Indices, J. A. Marinich, F. Maguna, N. B. Okulik, E. A. Castro, *Polish J. Chem.* **76** (2002) 589-600, [CPS: physchem/0103030](https://doi.org/10.1002/physchem.0103030).
- 542) El Premio Nóbel de Química 2001, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **No.343** (2002) 39.
- 543) Derechos y Responsabilidades en el Uso de las Modernas Redes Informativas, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **No 343** (2002) 40-43.
- 544) Application of Quantitative Structure-Retention Relationships (QSRR) to a Set of Organic Bromo and Nitrile Derivatives, G. P. Romanelli, J. C. Autino, E. A. Castro, *Turk. Chem.* **26**(3) (2002) 335-344, [CPS: physchem/0011009](https://doi.org/10.1002/physchem.0011009).
- 545) UV and IR Spectroscopic Study of 1,2,3,4-Tetroxane. A Joint Experimental and Theoretical Analysis, L. C. Leiva, J. R. Romero, N. L. Jorge, M. E. Gómez-Vara, E.

- A. Castro, *Asian J. Spectr.* **5** (2001) 177-183, CPS: orgchem/0205001.
- 546) 3D and 4D Molecular Models Derived from the Ideal Symmetry Method. Prediction of Alkanes Normal Boiling Points, G. Krenkel, E. A. Castro, A. A. Toropov, *Chem. Phys. Lett.*, **355**(5-6)(2002)517-528, [CPS: physchem/0110005](#).
- 547) Application of Quantitative Structure-Retention Relationships to Calculate Chromatographic Retention Times of o-Acetylphenyl Esters, G. P. Romanelli, J. Jios, J. C. Autino, L. F. R. Cafferata, D. Ruiz, E. A. Castro, *Chem. Anal.* **47** (2002) 205-217, [CPS: physchem/0110014](#).
- 548) Experimental and Theoretical Analysis of the Enthalpy of Formation of 3,6-Diphenyl-1,2,4,5-Tetroxane Molecule, N. L. Jorge, L. C. A. Leiva, M. G. Castellanos, M. E. Gómez-Vara, E. A. Castro, *TheScientificWorld Journal*, **2** (2002) 455-460, CPS: physchem/0111002.
- 549) Improved QSPR Analysis of Standard Entropy of Acyclic and Aromatic Compounds Using Optimized Correlation Weights of Linear Graph Invariants, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, A. A. Toropov, *Comp. & Chem.* **26**(4) (2002) 327-332, CPS: physchem/01100113.
- 550) Concepciones de los Alumnos Acerca de la Estructura de la Materia, F. P. Maguna, M. Núñez, F. López-Tévez, N. B. Okulik, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quim.* **XV** (2001-2002) 1-7.
- 551) Theoretical Study of the *trans*-3,6-Dimethoxy-1,2-dioxane Molecule, N. L. Jorge, M. Gómez-Vara, L. F. R. Cafferata, E. A. Castro, *Kragujevac J. Sci.* **24** (2002) 57-64, [CPS: orgchem/0101001](#).
- 552) Improved Simplified Scheme of Atom Equivalents to Calculate Enthalpies of Formation of Alkyl Radicals, E. A. Castro, CPS: physchem/0110017, *Ing. Cs. Quim.* **20**(1) (2002) 2-5
- 553) Semiempirical Theoretical Study of New Pyranoquinoxaline, Pyrimido(pyrido) Pyranoquinoxaline and Quinoxalinone Derivatives, E. A. Castro, O. S. Moustafa, *Ind. J. Heteroc. Chem.* **11**(4) (2002) 273-278, CPS:orgchem/0111003.
- 554) Semiempirical Study of the Molecular Structure of Cyclic (NPX₂)_n (n = 2, 3, 4, 5 and X = H, F, Cl) Phosphazenes, V. Mora, E. A. Castro, *Chem. Pap.* **56**(4) (2002) 250-256, [CPS:physchem/0110020](#).
- 555) QSPR Modeling of Normal Boiling Points of Aldehydes, Ketones and Esters by Means of Nearest Neighboring Codes Correlation Weighting, A. Toropov, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, [CPS:physchem/0203009](#), *J. Arg. Chem. Soc.* **90**(1-3) (2002) 91-107.
- 556) *Ab Initio* Theoretical Study of Substituted Trioxanes: *trans*-3,6-dimethoxy-1,2,4-trioxane, N. Jorge, M. Gómez-Vara, L. F. R. Cafferata, E. A. Castro, *Afinidad*, **59** No.499 (2002) 223-228, [CPS:orgchem/0112001](#).
- 557) Modeling the Aqueous Solubility of Aliphatic Alcohols via Molecular Descriptors, G. P. Romanelli, C. M. Martino, E. A. Castro, CPS: physchem/0101002, *J. Chem. Soc. Pak.* **23**(4) (2001) 195-199.
- 558) El Crecimiento de las Revistas Electrónicas, E. A. Castro, *Ind. & Quim.* **No 344** (2002) 12-17.
- 559) Mass Spectrometry as a Valuable Tool for the Study of Tautomerism of Amides and Thioamides, C. B. Milazzo, P. E. Allegretti, E. A. Castro, J. J. P. Furlong, CPS:physchem/0203004, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **589-590** (2002) 161-170.
- 560) Theoretical Study of New Pseudohalogen CS₂N₃· and Some Related Compounds, N.

- B. Okulik, A. H. Jubert, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM*, **589-590** (2002) 79-87, [CPS:physchem/0110004](https://doi.org/10.1016/S0165-3984(02)00004-1).
- 561) Upgrading the Wiener Index, E. A. Castro, I. Gutman, D. Marino, P. Peruzzo, *J. Serb. Chem. Soc.* **67**(10) (2002), 647-651, [CPS:physchem/0206003](https://doi.org/10.2478/S116704902000003).
- 562) Derechos y Responsabilidades en el Uso de las Redes Informativas, E. A. Castro, *Vuelos* **No.51** (2002) 12-14.
- 563) Nuevos Avances en el Desarrollo y Aplicación de los Semiconductores Láser, E. A. Castro, *Tecnociencia* **4**(2) (2002) 29-33.
- 564) Prediction of Critical Temperatures and Critical Pressures of Some Industrially Useful Organic Molecules from Rather Simple Topological Descriptors, P. R. Duchowicz, E. Castro, *Zhurnal Obshchei Khimii* **72**(12) (2002) 1973-1979, *Russ. J. Gen. Chem.* **72**(12) (2002) 1867-1873, [CPS: physchem/0103027](https://doi.org/10.1007/s10102027)
- 565) QSPR Study of the Acidity of Carboxylic Acids in Aqueous Solutions, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, [CPS: physchem/0203015](https://doi.org/10.1007/s1010203015), *Mendel. Commun.* September-October, **Number 5** (2002) 187-189.
- 566) Estudios Teóricos de las Propiedades Moleculares y Globales de los Líquidos. Formulación General, E. A. Castro, *Rev. Bol. Quim.*, **20**(1) (2003) 57-63.
- 567) Conformational Analysis of 1,2,4,5-Tetroxane, N. Jorge, M. Gómez-Vara, E. A. Castro, *Bull. Polish Acad. Sci.* **50**(3) (2002) 387-395, [CPS: physchem/0205005](https://doi.org/10.1007/s1010205005).
- 568) *Ab Initio* Theoretical Astudy of Substituted Dioxanes: *Trans*-3,6-dimethoxy-1,2-dioxane, N. L. Jorge, M. Gómez-Vara, E. A. Castro, *Acta Phys. Chim. Debrecina* **XXXIV-XXXV** (2002) 12-22, [CPS: physchem/0203003](https://doi.org/10.1007/s1010203003).
- 569) Conformational Study of 1,2-Dioxane and its Halogenated Derivatives from the Semiempirical AM1 and PM3 Molecular orbital Methods – A Comparative Analysis, N. L. Jorge, E. A. Castro, M. E. Gómez-Vara, L. F. R. Cafferata, *J. Indian Chem. Soc.* **80**(1) (2003) 14-20, [CPS: physchem/0103029](https://doi.org/10.1007/s1010203029).
- 570) Current Theoretical Methods to Study Cyclodextrins and their Complexes, E. A. Castro, D. J. Barbiric, *J. Arg. Chem. Soc.* **90**(4-6) (2002) 1-44, [CPS: physchem/0203005](https://doi.org/10.1007/s1010203005).
- 571) Reaction Products Arising from the Complexation of Trimeric o-Tetrafluorophenylene Mercury with Benzene, E. A. Castro, [CPS: physchem/0010008](https://doi.org/10.1007/s101020010008) *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **619**(1-3) (2002) 45-50.
- 572) Effect of β -Cyclodextrin on the Hydrolisis of N-Phenylphtalamide and N-Adamtyl-phtalamide. A Two-Sided Semiempirical Approach, D. J. Barbiric, E. A. Castro, R. H. de Rossi, *J. Mol. Struct. THEOCHEM*, **619**(1-3) (2002) 91-100, [CPS:physchem/0206001](https://doi.org/10.1007/s1010206001).
- 573) The Scientific Mysticism, E. A. Castro, *OMETECA* **5-6** (2002) 359-388.
- 574) Mitos y Realidades Vinculados al Concepto de Orbitales, E. A. Castro, I. Gutman, *Pan. Newsl. Chem. Educ.* **14**(1) (2002) 3-11.
- 575) La Polivalencia en los Compuestos de Interés Biológico, E. A. Castro, *Rev. Bol. Quim.* **19**(1) (2003) 39-46.
- 576) El Control de los Fenómenos Cuánticos, E. A. Castro, *Rev. Bol. Quim.* **19**(1) (2003) 108-114.
- 577) Improved Prediction of Critical Temperatures and Critical Pressures for Normal Alkanes C_nH_{2n+2} with $n \leq 43$ from Rather Simple Topological Descriptors, G. Krenkel, E. A. Castro, [CPS: physchem/0110015](https://doi.org/10.1007/s10102010015), *J. Theor. Comp. Chem.* **2**(1) (2003) 33-41.
- 578) La Empresa Virtual, E. A. Castro, *Ing. Cs. Quim.* **20**(2) (2002) 77-84.

- 579) QSPR Modeling of Heat of Formation and Vaporization of Aliphatic Ketones by Means of Electrotopological Indices, D. J. G. Marino, P. J. Peruzzo, G. Krenkel, E. A. Castro, [CPS: physchem/0210005](#), *Chem. Phys. Lett.* **369** (2003), 325-334.
- 580) Química y Medio Ambiente: Propuesta de una Herramienta Motivadora para la Enseñanza de Resolución de Problemas, M. I. Aguado, M. B. Núñez, N. B. Okulik, E. A. Castro, *Educ. Quim.* **8**(3) (2002) 13-18.
- 581) Improved Correlations Between Theoretical and Experimental Determination of Heat of Formation of Certain Aliphatic Nitro Compounds, P. R. Duchowicz, P. C. Chen, E. A. Castro, [CPS: physchem/0205002](#), *J. Korean Chem. Soc.* **47**(2) (2003) 89-95.
- 582) Theoretical Study of new Pyranoquinoxaline, Pyrimido(pyrido)pyranonoquinoxaline and Quinoxalinone Derivatives, O. S. Moustafa, E. A. Castro, *Bull. Polish Acad. Sci.*, **51**(1) (2003) 59-69, [CPS: physchem/0111006](#).
- 583) Structure-Toxicity Relationships for Aliphatic Compounds Based on Correlation Weighting of Local Graph Invariants, A. A. Toropov, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *Int. J. Mol. Sci.* **4** (2003) 272-283, [CPS: physchem/0205001](#).
- 584) Tautomerism of Lactones and Related Compounds. Mass Spectrometric Data and Theoretical Calculations, P. E. Allegretti, M. S. Cortizo, C. Guzmán, E. A. Castro, J. J. P. Furlong, *Arkivoc* Vol. 2003, **Part X**, 24-31, CPS: orgchem/0304002.
- 585) Theoretical Study on the Interaction of *o*-Tetrafluorophenylene Mercury with Ethylene and Acetylene, E. A. Castro, [CPS: physchem/021001](#), *Molecules* **8** (2003) 418-429.
- 586) Theoretical Density Functional Study of Substituted Dioxanes: *trans*-3,6-Dimethoxy-1,2-dioxane, J. M. Romero, N. L. Jorge, M. Gómez Vara, E. A. Castro, CPS: [physchem/0110008](#), *Arkivoc* 2003, **Part XV**, 1-9.
- 587) QSPR Modeling of Lipophilicity by Means of Correlation Weights of Local Graph Invariants, D. Marino, P. Peruzzo, E. A. Castro, A. A. Toropov, CPS: physchem/0203002, *Internet Electron. J. Mol. Des.* **2** (2003) 334-347.
- 588) Maximum Topological Distances Based Indices as Molecular Descriptors for QSPR. V- Modeling the Free Energy of Hydrocarbons, P. R. Duchowicz, R. G. Siñani, E. A. Castro, A. A. Toropov, [CPS: physchem/0207001](#), *Ind. J. Chem.* **42A** (2003) 1354-1359.
- 589) Study of the Occurrence of Tautomeric Forms of Ureas and Thioureas by Mass Spectrometry, P. E. Allegretti, V. Peroncini, E. A. Castro, J. J. P. Furlong, CPS: [orgchem/0207002](#), *Int. J. Chem. Sci.* **1**(1) (2003) 1-12.
- 590) Molecular Mechanics Study of the Cyclic and Unsymmetrical Diborane(4) Compounds, N. Rendtorff, E. A. Castro, *TheScientificWorld Journal*, **3** (2003) 1-4, [CPS: physchem/0205003](#), *Russ. J. Gen. Chem.* **73**(12) (2003) 1881-1883.
- 591) La Relación entre la Química y la Matemática, I. Gutman, E. A. Castro, *Cienc. Inv.* **55**(1) (2003) 33-37.
- 592) A Rather Simple Theoretical Calculation of Heat of Formation of Some Aromatic Nitro Compounds, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, CPS: physchem/0110019, *J. Arg. Chem. Soc.* **91**(1-3) (2003) 29-41.
- 593) El Uso de las Supercomputadoras en la Industria, E. A. Castro, *Revista CET Año 11*, No.22, (2002) 39-40.
- 594) QSPR Modeling of Dipole Moments by Means of Correlation Weighting of Local Graph Invariants, A. A. Toropov, O. M. Nabiev, F. Torrens, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, [CPS: physchem/0211002](#), *J. Theor. Comp. Chem.* **2**(2) (2003) 139-146.

- 595) Experimental and Theoretical Study of the Heat of Formation of the Formaldehyde Diperoxide, J. M. Romero, L. C. Leiva, N. L. Jorge, M. E. Gómez-Vara, E. A. Castro, *Acta Chim. Slov.* **50**(3) (2003) 579-585, [CPS: orgchem/0206003](#).
- 596) Cuando lo Invisible va Cobrando Visibilidad. V-Los Nuevos Telescopios, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú*, **LXVIII**(3) (2002) 132-140.
- 597) Cuando lo Invisible va Cobrando Visibilidad. VI-Nuevas y Mejores Imágenes Internas de los Cuerpos Vivientes, E. A. Castro, *Bol. Soc. Quim. Perú* **LXVIII**(3) (2002) 141-149.
- 598) Optimized Calculation on the Inhibition of Carbonic Anhydrase Isozymes I and II by Some Phenyl and Pyridil Substituted Sulfanilamide Schiff's Bases, G. Krenkel, E. A. Castro, *J. Mol. Med. Chem.* **1**(1) (2003) 13-20, [CPS: physchem/0210002](#).
- 599) QSAR Study of the Toxic Action of Aliphatic Compounds to the Bacteria *Vibrio fisheri* Based on Correlation Weighting of Local Graph Invariants, E. A. Castro, A. A. Toropov, A. I. Nesterova, A. U. Nazarov, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **639** (2003) 129-135, [CPS: physchem/0306010](#).
- 600) La Química al Servicio de la Humanidad, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **Nº 346** (2003) 57-59.
- 601) QSPR Modeling the Aqueous Solubility of Polychlorinated Biphenyls by Optimization of Correlation Weights of Local and Global Graph Invariants, E. A. Castro, A. A. Toropov, A. I. Nesterova, O. N. Nabiev, [CPS: physchem/0310004](#), *Cent. Eur. J. Chem.* **2**(3) (2004) 500-523.
- 602) QSPR Modeling of Enthalpies of Formation from Elements of Coordination Compounds by Correlation Weighting of Nearest Neighboring Codes, E. A. Castro, P. R. Duchowicz, F. M. Fernández, A. A. Toropov, A. I. Nesterova, A. U. Nazarov, *J. Theor. Comp. Chem.* **3**(1) (2004) 31-41, [CPS: physchem/0309006](#).
- 603) Alternative Statistical and Theoretical Analysis of Fluorophilicity, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, F. M. Fernández, [CPS: physchem/0306005](#), *J. Fluor. Chem.* **125** (2004) 43-48.
- 604) About Orthogonal Descriptors in QSPR/QSAR Theories, F. M. Fernández, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, [CPS: physchem/0305008](#), *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **51** (2004) 39-57.
- 605) Semiempirical Calculation of the Reaction Products Arising from the Complexation of Trimeric o-Tetrafluorophenylene Mercury with Benzene, E. A. Castro, [CPS: physchem/0207010](#), *Asian J. Inform. Technol.* **3**(2) (2004) 88-95, y *J. Animal & Veterinary Adv.* **3**(2) (2004) 88-95.
- 606) Mass Spectral and Theoretical Studies on the Tautomerism of Selected Thioesters, P. E. Allegretti, D. Asens, M. M. Schiavoni, R. D. Bravo, E. A. Castro, J. J. P. Furlong, *Arkivoc* **Vol.2003**, Part XV, 134-142, [CPS: physchem/0311002](#).
- 607) Improved QSAR Analysis of the Toxicity of Aliphatic Carboxylic Acids, F. Maguna, M. B. Núñez, N. B. Okulik, E. A. Castro, [CPS: physchem/0205006](#), *Russian J. Gen. Chem.* **73**(11) (2003) 1792-1798.
- 608) QSPR Modeling of Gibbs Free Energy of Chemical Transformations of Oil Shale Components During Thermal Treatment, E. A. Castro, A. P. Toropova, A. A. Toropov, D. V. Mukhamedjanova, *J. Arg. Chem. Soc.* **91**(4-6) (2003) 85-90, [CPS: physchem/0306008](#).
- 609) La Importancia de las Ilustraciones Gráficas en la Comprensión de los Textos Escritos, E. A. Castro, *Alternativas. Serie: Espacio Metodológico*, **Año VIII**, No.30,

- (2003) 105-122.
- 610) Some Reflections About Objectivity and Truth in Science, E. A. Castro, *OMETECA*, **Vol.VIII** (2004) 105-112.
- 611) QSPR Calculation of Aromaticity in Some Five-Membered Heteroatomic Compounds, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, CPS:physchem/0304006, *J. Theor. Comp. Chem.* **3**(2) (2004) 145-153.
- 612) Evaluación de un Hipertexto para la Enseñanza de “Pilas y Baterías, Salud y Medio Ambiente”, M. I. Aguado, M. B. Núñez, N. B. Okulik, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quim.* **No. XVIII** (2003-2004) 7-14.
- 613) Los Nanocristales Semiconductores, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quim.* **No. XVIII** (2003-2004) 31-33.
- 614) El Autoensamblaje y la Autoorganización en los Fluidos, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quim.* **No. XVIII** (2003-2004) 155-164.
- 615) Pilas y Baterías, Salud y Medio Ambiente: Desarrollo de un Hipertexto para su Enseñanza, M. I. Aguado, M. B. Núñez, N. B. Okulik, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quim.* **No. XVIII** (2003-2004) 181-190.
- 616) QSPR Calculation of Normal Boiling Points of Organic Molecules Based on the Employment of Correlation Weighting of Atomic Orbitals with Extended Connectivity of Zero- and First-Order Graphs of Atomic Orbitals, M. Pérez González, A. A. Toropov, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *Molecules*, **9** (2004).
- 617) Modelos QSAR/QSPR en Adsorción de Sustancias Químicas, H. Castañeta, E. A. Castro, *Rev. Boliv. Quim.* **21**(1) (2004) 53-61.
- 618) QSPR Modeling of the Octanol/Water Partition Coefficient of Alcohols by Means of Optimization of Correlation Weights of Local Graph Invariants, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, A. A. Toropov, A. I. Nesterova, O. M. Nabiev, CPS: physchem/0310006, *J. Arg. Chem. Soc.* **92**(1-3) (2004) 29-42.
- 619) Estudio QSPR de Momentos Dipolares de Hidrocarburos, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *Ind. & Quim.* **No. 348** (2004) 16-18
- 620) La Astroquímica, E. A. Castro, *Ind. & Quim.* **No. 348** (2004) 19-23, *Deslinde* **No.36** (2004) 110117.
- 621) Acerca del Buen Gusto, E. A. Castro, *Ind. & Quim.* **No. 348** (2004) 3-7.
- 622) Relationship Among Potential Energy Functions, F. M. Fernández, E. A. Castro CPS: physchem/03110005, *J. Math. Chem.* **36**(2) (2004) 161-165.
- 623) QSAR Modeling of Anti-HIV-1 Activities by Optimization of Correlation Weights of Local Graph Invariants, E. A. Castro, F. Torrens, A. A. Toropov, I. V. Nesterov, O. M. Nabiev, CPS:physchem/0403005, *Molec. Simul.* **30**(10) (2004) 691-696.
- 624) QSAR Modeling of the MAO Inhibitory Activity of Xantones Derivates, M. B. Núñez, F. P. Maguna, N. B. Okulik, E. A. Castro, *Bioorg. & Med. Chem. Lett.* **14**(22) (2004) 5611-5617.
- 625) QSPR Modeling the Aqueous Solubility of Alcohols by Optimization of Correlation Weights of Local Graph Invariants, P. Duchowicz, E. A. Castro, A. A. Toropov, I. V. Nesterov, O. M. Nabiev, CPS: physchem/0309008, *Molec. Diversity* **8**(4) (2004) 325-330.
- 626) Nuclei Acid Quadratic Indices of the “Macromolecular Graph’s Nucleotides Adjacency Matrix”. Modeling of Footprints after the Interaction of Paromomycin with the HIV-1-Ψ-RNA Packaging Region, Y. Marrero Ponce, D. Nodarse, H. G. Díaz, R. R. de Armas, V. R. Zaldívar, F. Torrens, E. A. Castro, CPS:

- physchem/0401004, *Int. J. Mol. Sci.*, **5** (2004) 276-293, CPS:physchem/0401004.
- 627) An Improved QSPR Modeling of Hydrocarbon Dipole Moments, I. V. Nestervov, A. A. Toropov, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, CPS:physchem/0404003, *TheScientific WorldJOURNAL* **4** (2004) 956-964.
- 628) Los Descriptores Ortogonales en la Teoría QSAR-QSPR, F. M. Fernández, E. A. Castro, P. R. Duchowicz, *Afinidad* **61**, No.514, November-December 2004, 476-495.
- 629) Spiroconjugation of 1-, 2- and 3-Dimensions: The Foundations of a Spiro Quantum Chemistry, M. Bucknum, E. A. Castro, *J. Math. Chem.* **36**(4) (2004) 381-408.
- 630) Enol and Enethioenol Occurrence of Some Ketones and Thioketones. Mass Spectrometry and Theoretical Calculations, P. E. Allegretti, M. de los Ángeles Schiavoni, M. S. Cortizo, E. A. Castro, J. J. P. Furlong, [CPS: orgchem/0306001](http://CPS:orgchem/0306001), *Int. J. Molec. Sci.* **5** (2004) 294-300.
- 631) Moravia: A 3-,8-connected Cubic Structural Pattern in Space Group Pm3m, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *Central Eur. J. Chem.* **3**(1) (2005) 169-173.
- 632) Protein Quadratic Indices of the “Macromolecular Pseudograph’s α Carbon Adjacency Matrix” in Mathematical Biology. 1- Prediction of Arc Repressor Alanine-Mutants Stability, Y. Ponce Marrero, R. Medina Marrero, E. A. Castro, R. Ramos de Armas, H. González Díaz, V. Romero Saldívar, F. Torrens, *Molecules* **9** (2004) 1124-1147.
- 633) Atom, Atom-Type, and Total Linear Indices of the “Molecular Pseudograph’s Atom Adjacency Matrix”: Application to QSPR/QSAR Studies of Organic Compounds, Y. Marrero Ponce, J. A. Castillo Garit, F. Torrens, V. Romero Saldívar, E. A. Castro, *Molecules* **9** (2004) 1100-1123.
- 634) Synthesis and Spectroscopic Study of 1,3-Dibutanoic-1,2,4,5-Tetroxane, J. M. Romero, M. I. Profeta, N. L. Jorge, M. E. Gómez-Vara, A. H. Jubert, E. A. Castro, *Asian J. Spectr.* **8**(1) (2004) 43-46.
- 635) Caracterización de Materiales Carbonosos por Adsorción de Gases Simples, E. A. Castro, J. L. Vicente, L. E. C. de Torre, H. Castañeta, J. L. Llanos, E. S. E. Flores, A. E. Fertita, E. J. Bottani, *Ind. & Quim.* **No. 349** (2004) 4-7.
- 636) Atom, Atom Type, and Total Molecular Linear Indices as a Promising Approach for Bioorganic and Medicinal Chemistry: Theoretical and Experimental Assessment of a Novel Method for Virtual Screening and Rational Design and Rational Design on New Lead Anthelmintic, Y. Marrero Ponce, A. Castillo Gari, E. Olazábal, H. S. Serrano, A. Morales, N. Castañedo, F. Ibarra Velarde, A. Huesca Guillén, A. M. Sánchez, F. Torrens, E. A. Castro, *Biooorg. & Med. Chem.* **13** (2005) 1005-1020.
- 637) Cuando lo Invisible Cobra Visibilidad. I Parte, E. A. Castro, *Ind. & Quim.* **No. 349** (2004) 12-17.
- 638) El Empleo de los Láseres en las Ciencias de la Vida, E. A. Castro, *Ind. & Quim.* **No. 349** (2004) 23-25.
- 639) Calculating Topological Indexes of Networks from the Corresponding Wells Point Symbol, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **54**(1) (2005) 89-119.
- 640) Introduction to Molecular Schläfli Indexes, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **54**(1) (2005) 121-136.
- 641) Comparisons Among Different Approaches Toward Atomic Radii, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, [CPS: physchem/0304001](http://CPS:physchem/0304001), *Phil. J. Sci.* **133**(1) (2004) 45-53.
- 642) Electronic Structure and Bulk Modulus of Silicon Dicarbide: A Glitter Phase, M. J.

- Bucknum, A. Ienco, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **716** (2005) 73-78.
<http://authors.elsevier.com/sd/article/S0166128004008905>.
- 643) Protein Linear Indices of the “Macromolecular Pseudograph’s α -Carbon atom Adjacency Matrix” in Bioinformatics. 1- Prediction of Protein Stability Effects of a Complete Set of Alanine Substitutions in Arc Repressor, Y. Marrero Ponce, R. Medina Herrero, J. A. Castillo Garit, V. Romero Saldívar, F. Torrens, E. A. Castro, *Bioorg. & Med. Chem.* **13** (2005) 3003-3015.
- 644) Non-Stochastic and Stochastic Quadratic Indices of the Molecular Pseudograph’s Atom Adjacency Matrix:: A Promising Approach for Chemical Information and Modeling Antibacterial Activity, Y. Marrero Ponce, R. Medina Marrero, F. Torrens, Y. Martínez, V. Romero Zaldívar, E. A. Castro, *Bioorg. Med. Chem.* **13** (2005) 2881-2899.
- 645) El Proceso de Desenvolvimiento Espiritual: ¿Experiencia Científica o Fenomenología Exclusivamente Individual?, E. A. Castro, *OMETECA* **9** (2005) 49-53.
- 646) Conformational analysis of trans-3,6-dibutanol-1,2,4,5-tetroxane, M. I. Profeta, J. M. Romero, N. L. Jorge, M. Gómez-Vara, E. A. Castro, *Am. J. Biochem. Biotechnol.* **1**(1) (2005)
- 647) Synthesis of Sodium Salt of 3,6,-Dibutanoic-1,2,4,5-Tetroxane, S. Bustillo, J. M. Romero, L. C. Leiva, N. L. Jorge, M. Gómez-Vara, E. A. Castro, *Am. J. Biochem. Biotechnol.* **1**(1) (2005) 47-49.
- 648) Towards a Microscopic Theory of the Modulus of Elasticity in Crystalline Covalent Materials and a Survey of Potential Superhard Materials, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *J. Math. Chem.* **38**(1) (2005) 27-42.
- 649) QSPR Modeling of the Gibbs Free Energy of Organic Compounds by Weighting of Nearest Neighboring Codes, E. A. Castro, A. P. Toropova, A. A. Toropov, D. V. Mukhamedjanova, CPS: physchem/0309007, *Structural Chemistry* **16**(3) (2005) 311-330.
- 650) Jubilite: A 4-,8-connected Cubic Structural Pattern in Space Group Pm3, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *Int. J. Mol. Sci.* **6** (2005) 177-187.
- 651) Comparison Between Two Different Approaches Toward Atomic Radii, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, [CPS: physchem/0304004](https://doi.org/10.1002/physchem.0304004), *Krag. J. Sci.* **27** (2005) 51-56.
- 652) 3D-Chiral Quadratic Indices of the “Molecular Pseudograph’s Atom Adjacency Matrix” and their Application to Central Chirality Codification: Classification of ACE Inhibitors and Prediction of σ -Receptor Antagonist Activities, Y. Marrero Ponce, H. González Díaz, V. Romero Zaldívar, F. Torrens, E. A. Castro, CPS: physchem/0401004, *Bioorg. & Med. Chem.* **12** (2004) 5331-5342.
- 653) TOMOCOMD-CARDD, A Novel Approach for Computer-aided “Rational” Design: I-Theoretical and Experimental Assessment of a Promising Method for Computational Screening and *In Silico* Design of New Anthelmintic Compounds, Y. Marrero-Ponce, J. A. Castillo-Garit, E. Olazábal, H. S. Serrano, A. Morales, N. Castañedo, F. Ybarra-Valderde, A. Huesca-Guillén, E. Jorge, A. del Valle, F. Torrens, E. A. Castro, *J. Comput.-Aided Molec. Design* **18** (2004) 615-633.
- 654) Cuando lo Invisible Cobra Visibilidad. II Parte, E. A. Castro, *Ind. & Quim.* **350** (2005) 5-9.
- 655) Los Líquidos Iónicos en la Síntesis Orgánica. I- Las Reacciones de Sustitución Nucleofílicas y Electrofílicas, E. A. Castro, *Ind. & Quim.* **350** (2005) 29-30.
- 656) Propiedades Inusuales de Moléculas Ultraenfriadas, E. A. Castro, *Ind. & Quim.*

- 350** (2005) 41-44.
- 657) El Debate como Generador de Actitudes Críticas en el Aprendizaje del Conocimiento Científico, L. López-Tévez, M. B. Núñez, N. B. Okulik, E. A. Castro, *Educ. Quim.* **16** (2005) 137-141.
- 658) Experimental and Theoretical Standard Enthalpy of Formation of 3,6-Dibutanol-1,2,4,5-tetroxane, D. A. Ayala, M. I. Profeta, J. M. Romero, N. L. Jorge, M. E. Gómez-Vara, E. A. Castro, A. H. Jubert, *Int. J. Chem. Model.* **2**(1) (2009)
- 659) Microcrystal Structure Determination Using Synchrotron Radiation and a CCD Detector, M. J. Bucknum, D. M. Szebenyi, E. Lobkovsky, M. Patil, R. Klein, E. A. Castro, *Internet Elec. J. Molec. Design.* **4** (2005) 342-354.
- 660) QSPR Modeling of the Enthalpy of Formation Based on Partial Order Ranking, E. A. Castro, F. M. Fernández, P. R. Duchowicz, *J. Math. Chem.* **37**(4) (2005) 433-441.
- 661) La Detección, la Mensura y la Administración Empresarial del Conocimiento, E. A. Castro, *Rev. Bol. Educ. Sup.* **3**(3) (2004) 99-108.
- 662) Geometrical Isomerism and Conformational Changes of Selected Open-ring Enaminones in its Neutral and Protonated Forms, J. C. Garro Martínez, G. N. Zamarbide, M. R. Estrada, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **725** (2005) 63-68.
- 663) Quantitative Structure Activity Relationship to Predict Differential Inhibition of Aldose Reductase by Flavonoid Compounds, M. Fernández, J. Caballero, A. Morales Helguera, E. A. Castro, M. Pérez González, *Bioorg. Med. Chem.* **13** (2005) 3269-3277. Most Cited Paper 2006-2009 Award otorgado por la Revista Bioorganic & Medicinal Chemistry, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, October 2009.
- 664) Alternative Algorithm for the Search of an Optimal Set of Descriptors in QSAR-QSPR Theories, P. R. Duchowicz, F. M. Fernández, E. A. Castro, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **55**(1) (2006) 179-192.
- 665) Lithographite: A 5-,6-connected Orthorombic Structural Pattern in Space Group Pmmm, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **55**(1) (2006) 57-64.
- 666) Towards an Empirical Relation Between the Elementary Circuit and the Topological Index, 1, in the Polyhedra and 2-, and 3-Dimensional Structures, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **54**(2) (2005) 313-330.
- 667) Cooperativo y Colaborativo: Las Dimensiones del Aprendizaje Grupal, G. del Valle López, M. B. López, E. A. Castro, *Anuar. Lat. Educ. Quim.* **XIX** (2004-2005) 55-64.
- 668) Adsorción de Gases: Su Empleo para Caracterizar Materiales Carbonosos, H. Castañeta, E. A. Castro, J. L. Vicente, L. C. de Torre, J. L. Llanos, E. S. E. Flores, A. E. Fertita, *Anuar. Lat. Educ. Quim. (ALDEQ)* **XIX** (2005) 114-116.
- 669) A New Search Algorithm for QSPR/QSAR Theories. Normal Boiling Points of some Organic Molecules, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, F. M. Fernández, M. Pérez-González, *Chem. Phys. Lett.* **412** (2005) 376-380.
- 670) A Chemically Intuitive Proposal for the Structure of n-Diamond, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *Mol. Phys.* **103**(20) (2005) 2707-2715.
- 671) Aplicación de los Métodos QSPR en Fenómenos de Adsorción Sobre Materiales Carbonáceos, H. Castañeta, E. A. Castro, *Revista CET* **26** (2005) 4-10.
- 672) Algunos Avances en la Ciencia de los Materiales, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **351** (2005) 3-6.
- 673) Algunos Peróxidos Cíclicos Inusuales, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **351** (2005)

7-8.

- 674) ¿Computadoras Moleculares?, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **351** (2005) 14-18.
- 675) El Análisis de las Uniones por Puente de Hidrógeno a través de la Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **351** (2005) 19-21.
- 676) Los Superácidos, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **351** (2005) 27-28.
- 677) Los Líquidos Iónicos en la Síntesis Orgánica. II- La Síntesis Asimétrica, E. A. Castro, *Industria y Química* **351** (2005) 25-26.
- 678) Calorimetric and Computational Study of Enthalpy of Formation of 3,6-Dibutanoic-1,2,4,5-Tetroxane, J. M. Romero, D. A. Ayala, N. L. Jorge, M. E. Gómez-Vara, E. A. Castro, *Bioorg. Med. Chem.* **13** (2005) 5826-5829.
- 679) Improved QSAR Modeling of Anti-HIV-1 Activities by Means of the Optimized Correlation Weights of Local Graph Invariants, D. J. G. Marino, E. A. Castro, A. A. Toropov, *Cent. Eur. J. Chem.* **4**(1) (2006) 135-148.
- 680) New Yorkite: A 4-, 8-Connected Tetragonal Structural Pattern in Space Group P4/mmm with Anti-cube Connection, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *Zhurnal Obshchei Khimii* **78**(1) (2008) 38-39, *Russ. J. Gen. Chem.* **78**(1) (2008) 35-36.
DOI: 10.1007/s11176-008-1006-1.
- 681) On Topological Form in Structures, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *J. Math. Chem.* **39**(1) (2006) 33-46. Versión corregida íbid **40**(4) (2006) 327-340.
- 682) Anharmonic Compression of the Glitter Lattice, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *J. Mol. Model.* **12** (2005) 111-124.
- 683) Structural and Spectroscopic Study of 3,6-Dibutanoic-1,2,4,5-Tetroxane, J. M. Romero, M. I. Profeta, N. L. Jorge, M. E. Gómez-Vara, E. A. Castro, A. H. Jubert. *Molec. Simul.* **31**(14,15) (2005) 1075-1081.
- 684) Hexagonite: A Hypothetical Organic Zeolite, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *J. Math. Chem.* **39**(3,4) (2006) 6-11.
- 685) An Approximate Formula Relating the Two Transcendental Numbers e and π , M. J. Bucknum, E. A. Castro, *Trends in Applied Sciences Research* **1**(2) (2006) 113-114.
- 686) Leadership and Literature in the Knowledge Age, E. A. Castro, *OMETECA*, **10**(1) (2006) 153-171.
- 687) Kentuckia: A 4-,6-,8-Connected Tetragonal Structure Pattern in Space Group P4/nmm, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *Russ. J. Gen. Chem.* **76**(2) (2006) 265-266. Published in Russian language in *Zhurnal Obshchei Khimii* **76**(2) (2006) 280-281.
- 688) Dynamic Elasticity of Cubic Diamond, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *J. Math. Chem.* (Published online 7 March 2006) ISSN: 0259-9791 (Paper) 1572-8897 Online), DOI: 10.107/s 10910-005-9038-9, **40**(4) (2006) 341-347.
- 689) Relations Between Molecular Structure of Terpenoids and its Antymycotic Activity Against *Candida albicans*, F. P. Maguna, N. B. Okulik, E. A. Castro, *Med. Chem.: An Indian Journal*, **1**(1,2) (2005) 1-6.
- 690) Estudio Teórico de las Propiedades Moleculares y Globales de los Líquidos. Aplicaciones, E. A. Castro, *Rev. Bol. Quim.* **22**(1) (2005) 34-38.
- 691) QSAR Modeling of Anti-HIV-1 Activity of HEPT Derivatives by Optimization of Correlation Weights of Morgan Extended Connectivity in Graph of Atomic Orbitals, E. A. Castro, A. A. Toropov, A. P. Toropova, D. V. Mukhamedzhanove, *J. Arg. Chem. Soc.* **93**(4-6) (2005) 109-121.
- 692) Theoretical Study of the Adsorption of C_5H_n ($n = 5, 8, 10$) on Ni(100) and Ni(111) Surfaces, N. C. Comelli, M. B. López, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **726**

- (2005) 197-204.
- 693) Non-stochastic and Stochastic Linear Indices of the Molecular Pseudograph's Atom Adjacency Matrix: A Novel Approach for Computational *in silico* Screening and "Rational" Selection of New Lead Antibacterial Agents, Y. Marrero-Ponce, R. Medina Marrero, Y. Martínez, F. Martínez, V. Romero-Zaldívar, E. A. Castro, *J. Mol. Model.* **12** (2006) 255-271.
- 694) ¿Ciencia Versus Religión, Ciencia o Religión, o Religión Científica?, E. A. Castro, *Alternativas. Serie: Espacio Pedagógico*, **10**(40-41) (2005) 71-86.
- 695) QSPR Prediction of the Dubinin-Raduschkevich's *k* Parameter for the Adsorption of Organic Vapours on BPL Carbon, P. R. Duchowicz, H. Castañeta, E. A. Castro, F. M. Fernández, J. L. Vicente, *Atmospheric Environment* **40**(16) (2006) 2929-2934.
- 696) On the Structure of i-Carbon, M. J. Bucknum, I. Stamatina, E. A. Castro, *J. Theor. Comp. Chem.* **5**(2) (2006) 175-185.
- 697) El Trabajo en Equipo en las Empresas Químicas, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **352** (2006) 41-43.
- 698) Einstein y la Química, *Ind. Quim.* **352** (2006) 51-54.
- 699) El Desarrollo de la Química en los Siglos XVIII y XIX, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **352** (2006) 60-62. Reimpreso en *Galaxia* 198 – 2007/1, 9-12.
- 700) Guest Editorial on POR Approximation in QSAR/QSPR Theory, E. A. Castro, *Int. J. Mol. Sci.* **7** (2006) 1.
- 701) Experimental Preparation and UV/IR Spectroscopic Characterization of 1,3-dibutanal-1,2,4,5-tetroxane, D. A. Ayala, J. M. Romero, N. L. Jorge, M. E. Gómez-Vara, E. A. Castro, A. H. Jubert, *Spectrochim. Acta Part A: Molec. Biomol. Spectr.* **64** (2006) 717-721.
- 702) Some Comments on a Matter Wave-Light Wave Hypothesis, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *J. Math. Chem.* ISSN: 0259-9791 (Paper), 1572-8897 (Online) DOI: 10.1007/s10910-006-9106-9, *J. Math. Chem.* **42**(3) (2007) 367-372.
- 703) Some Comments on the Topological Features of Some 3-,4-connected Networks and their Relationships with the Numbers *e* and π , M. J. Bucknum, E. A. Castro, *J. Math. Chem.* ISSN:0259-9791 (Paper),1572-8897(Online), DOI:10.1007/s10910-006-9107-8 *J. Math. Chem.* **42**(3) (2007) 373-376.
- 704) The Carbon Allotrope Hexagonite and its Potential Synthesis from Cold Compression of Carbon Nanotubes, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *J. Chem. Theory & Comput.* **2**(3) (2006) 775-781.
- 705) Application of the Replacement Method as a Novel Selection Strategy in QSAR. 1-Carcinogenic Potential, A. Morales Helguera, P. R. Duchowicz, M. A. Cabrera Pérez, E. A. Castro, M. N. Dias Soeiro Cordeiro, M. Pérez González, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **81** (2006) 180-187.
- 706) A Theoretical Study of a Family of New Quinoxaline Derivatives, A. Albesa, P. R. Duchowicz, H. Castañeta, E. A. Castro, R. Pis Diez, F. M. Fernández, *J. Mol. Graphics Model.* **25** (2006) 487-494.
- 707) La Espectroscopía de Resonancia Nuclear Magnética, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **353** (2006) 54-57.
- 708) La Oxidación Catalítica Verde de Alcoholes en Solvente Acuoso, E. A. Castro. *Ind. & Quim.* **353** (2006) 3-4.
- 709) El Control del Posicionamiento de los Huéspedes en las Cavidades de las Nanocápsulas Anfitrionas, E. A. Castro, *Ind. & Quim.* **354** (2006) 13-15.

- 710) QSAR of Non-Nucleoside Inhibitors of HIV-1 Reverse Transcriptase, P. R. Duchowicz, M. F. Llamosa, J. Caballero, E. A. Castro, F. M. Fernández, *Bioorg. Med. Chem.* **14** (2006) 5876-5889. Premio Most Cited Paper por Elsevier, Amsterdam.
- 711) El Comportamiento Cuántico Inusual de los Gases Ultraenfriados, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **353** (2006) 27-28.
- 712) Evaluación Estadística de los Resultados Obtenidos a Partir de la Aplicación de una Técnica Participativa en el Desarrollo de un Contenido Matemático, D. P. Leguiza, M. A. Cardozo, A. Almirón, E. A. Castro, *Actas del RELME 17*, Código CB0105, 2003.
- 713) A Preliminary Theoretical Study of Antiepileptic Drugs, J. C. Garro Martínez, M. F. Andrada, M. R. Estrada, E. A. Castro, G. M. Zamarbide, *J. Arg. Chem. Soc.* **94**(1-3) (2006) 121-127.
- 714) Bonding in Some Covalent Derivatives of the 1,2,3,4-Thiatriazole-5-thiolate Anion. A Topological Study, N. B. Okulik, A. H. Jubert, E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **770**(1-3) (2006) 13-22.
- 715) Solvent Effects in the Thermal Decomposition Reactions of Cyclic Benzaldehyde, S. Bustillo, L. C. Leiva, N. L. Jorge, M. R. Gómez-Vara, E. A. Castro, *Trends in Applied Sciences Research* **1**(6) (2006) 640-644.
- 716) La Química Interestelar, E. A. Castro, *Revista de Ciencia y Técnica* (ISSN 038-431X), No.12, IX, No.2, Año 9, 2006, www.editorial.unca.edu.ar.
- 717) Quantum Mechanical Study of the Inclusión Proceses of Adamantol Isomers by L-Tryptophan-Modified-Beta-Cyclodextrin, E. A. Castro, D. A. J. Barbiric, C. S. Nascimento, Jr., W. B. De Almeida, H. F. Dos Santos, *Mol. Simul.* **32** (2006) 623-631.
- 718) On Application of Carhart Atom Pairs to Predict Anticonvulsant Activity, A. Talevi, J. J. Prieto, L. E. Bruno-Blanch, E. A. Castro, *Am. J. Biochem. & Biotechnol.* **2**(3) (2006) 119-128.
- 719) Theoretical Study of 3,6-Difluoro-1,2,4,5-Tetroxane Isomers, J. M. Romero, N. L. Jorge, M. E. Gómez-Vara, E. A. Castro, *Organic Chemistry: An Indian Journal* **2**(1-3) (2006), http://ocaij.tsjournals.com/Abstract/Vol2_1-3/Or01EACastro.htm.
- 720) Tautomerism and Mass Spectra of Thiomorpholides, P. E. Allegretti, F. Namor, E. A. Castro, J. J. P. Furlong, *Org. Chem.: An Indian Journal* **2**(4) (2006) http://ocaij.tsi Journals.com/Abstract/Vol2_4/Or04EACastro.htm.
- 721) Mass Spectrometry of Beta-ketoesters. Some Evidence of their Tautomerism, P. E. Allegretti, E. A. Castro, J. J. P. Furlong, *J. Mass Spectrom.* **12** (2006) 317-330.
- 722) Study of the Topological Properties of Some Pseudohalides, N. B. Okulik, A. H. Jubert, E. A. Castro, *J. Chem. Theory & Comput.* **2** (2006) 1335.
- 723) Cuando las Inter-relaciones Múltiples Producen Fertilizaciones Beneficiosas, E. A. Castro, *Diario HOY*, 20/11/06, <http://www.diariohoy.net/notas/verNoticia.phtml/html/26849124>.
- 724) L-Tryptophan-Modified-Beta-Cyclodextrin as Molecular and Enantiomeric Selector: Semiempirical Calculations, E. N. Coscarello, D. A. Barbiric, E. A. Castro, *Global J. Mol. Sci.* **1**(1) (2006) 1-8.
- 725) QSPR Prediction of Chain-Transfer Constants Employing Optimal Descriptors, E. A. Castro, P. R. Duchowicz, A. A. Toropov, I. N. Nurgaliev, V. O. Kudyshkin, *Global J. Mol. Sci.* **1**(1) (2006) 9-14.
- 726) Structural Study of the Complex of Al(III) with 1,2,-Benezenediol. Solvent Effects, M. I. Sancho, A. H. Jubert, S. E. Blanco, F. H. Ferretti, E. A. Castro, *Global J. Mol. Sci.* **1**(1) (2006) 33-41.

- 727) Chemical Physics: The Standing of a Mature Discipline, E. A. Castro, *Central Chemistry Journal* **1** (2007) 1-5.
- 728) A Complementary Analysis on the Equilibrium Lactam-Lactim. Mass Spectrometric Analysis and Theoretical Calculations, P. E. Allegretti, H. Saraví-Cisneros, E. A. Castro, J. J. P. Furlong, *Trends in Heterocyclic Chemistry* **11** (2006) 81-86.
- 729) New Molecular Descriptors Based Upon the Euler Equations for Chemical Graphs, M. J. Bucknum, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *J. Math. Chem.* **41**(2) (2007) 193-208.
- 730) El Proyecto OMETECA sobre la Convergencia de las Ciencias y las Humanidades, E. A. Castro, A. Catalá, *OMETECA* **11** (2007) 177-185.
- 731) Extraction and Identification of the Alkaloids of the *Ipomoea Fistulosa* (aguapei or mandiyurá) of Argentina, L. Cholich, E. Bogado, N. L. Jorge, O. Acosta, E. A. Castro, *Trends in Applied Sciences Research* **2**(3) (2007) 255-259.
- 732) QSAR Analysis for Heterocyclic Antifungals, P. R. Duchowicz, M. G. Vitale, E. A. Castro, M. Fernández, J. Caballero, *Bioorg. Med. Chem.* **15**(7) (2007) 2680-2689.
- 733) QSPR Analysis of Fluorophilicity for Organic Compounds, A. G. Mercader, P. R. Duchowicz, M. A. Sanservino, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Fluor. Chem.* **128**(5) (2007) 484-492.
- 734) Potential Unusual Chemical Bonding in Mixed Structures of the 3rd Transition Series Containing the Element Ni, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *J. Theor. Comp. Chem.* **6**(1) (2007) 165-175.
- 735) Thermal decomposition of formaldehyde diperoxide in aqueous solution, S. A. I. Cazut, E. Ramírez Maisuls, M. R. Delfino, J. M. Romero, N. L. Jorge, E. A. Castro, *Russ. J. Gen. Chem.* **79**(10) (2009) 2187-2190, *Zhurnal Obshchei Khimii* **79**(10) (2009) 1692-1696, DOI:10.1134/S107036320910017X.
- 736) Synthesis and IR Spectroscopic Study of 3,6-diethanal-1,2,3,4-tetroxane, J. R. Romero, N. L. Jorge, M. E. Gómez-Vara, M. B. Reguera, E. A. Castro, *Int. J. Appl. Chem.* **2**(3) (2006) 221-225 y **3**(1) (2007) 47-51.
- 737) New Solubility Model Based on Descriptors Derived from the Detour Matrix, A. Talevi, E. A. Castro, L. B. Blanch, *J. Arg. Chem. Soc.* **94**(1-3) (2006) 129-141.
- 738) QSPR Modeling of Metal Halides Lattice Enthalpy, E. A. Castro, A. P. Toropova, A. A. Toropov, D. V. Mukhamedjanova, *J. Arg. Chem. Soc.* **94**(1-3) (2006) 105-112.
- 739) Complexation of Zn(II) by Catechol in Hydroxylic Solvents, M. I. Sancho, A. H. Jubert, S. E. Blanco, F. H. Ferretti, E. A. Castro, *J. Arg. Chem. Soc.* **94** (1-3) (2006) 143-155.
- 740) QSPR Evaluation of Thermodynamic Properties of Acyclic and Aromatic Compounds, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, A. N. Pankratov, CPS: physchem/0207006, *J. Arg. Chem. Soc.* **94**(4-6) (2006) 31-45.
- 741) Application of Descriptors Based on Lipinski Rules in the QSPR Study of Aqueous Solubilities, P. R. Duchowicz, A. Talevi, C. Bellera, L. E. Bruno-Blanch, E. A. Castro, *Bioorg. Med. Chem.* **15** (2007) 3711-3719.
- 742) Application of the Replacement Method as Novel Variable Selection in QSPR. II- Soil Sorption Coefficients, P. R. Duchowicz, M. Pérez-González, A. Morales Helguera, M. N. Dias Soeiro Cordeiro, E. A. Castro, *Chemom. & Intell. Lab. Syst.* **88** (2007) 197-203.
- 743) Calorimetric and Computational Study of Enthalpy of Formation of Diperoxide of Cyclohexanone, J. M. Romero, S. Bustillos, H. E. Ramírez Maisuls, N. L. Jorge, M. E. Gómez-Vara, E. A. Castro, A. H. Jubert, *Int. J. Mol. Sci.* **8**(7) (2007) 688-694.

- 744) QSAR Studies for the Pharmacological Inhibition of Glycogen Synthase Kinase-3, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *Medicinal Chemistry: An Indian Journal* **3**(4) (2007) 393-417.
- 745) Los Materiales Plásticos de Uso Electrónico, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **355** (2007) 25-26.
- 746) Los Cristales Fotónicos, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **355** (2007) 3-5.
- 747) Los Materiales Magnetoreológicos, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **359** (2009) 19-21.
- 748) New Similarity-based Algorithm and Its Application to Classification of Anticonvulsant Compounds, A. Talevi, J. Prieto, L. E. Bruno-Blanch, E. A. Castro, *J. Enzyme Inhib. & Med. Lett.* **22**(3) (2007) 253-265.
- 749) Discovery of Anticonvulsant Activity of Abietic Acid through Application of Linear Discriminant Analysis, A. Talevi, M. S. Cravero, E. A. Castro, L. Bruno Blanch, *Bioorg. & Med. Chem. Lett.* **17**(6) (2007) 1684-1690.
- 750) Effect of Cupric Ions on Thermal Decomposition of 3,6-Diphenyl-1,2,4,5-Tetroxane, S. Bustillo, L. C. Leiva, M. E. Gómez-Vara, N. L. Jorge, E. A. Castro, *Trends in Applied Science Research* **2**(2) (2007) 151-157.
- 751) QSPR Modeling of Heats of Combustion for Carboxylic Acids, P.R. Duchowicz, Juan C. M. Garro, Matías F. Andrada, E. A. Castro, F. M. Fernández, *QSAR & Comb. Sci.* **5** (2007) 647-652.
- 752) Cuando lo Invisible va Cobrando Visibilidad. XIV- La Primera Imagen Resuelta de una Fuente Celestial de Rayos Gamma, E. A. Castro, *Rev. Boliv. Quim.* **23**(1) (2006) 58-60.
- 753) Theoretical and computational investigation into conformational analysis of the antimalarial agent 1,2,4,5-tetroxane and some derivatives, R. J. Thomas, E. A. Castro, *Academic Reviews*, **14**(1) (2007) 90-93.
- 754) Effects of the Solvent and Temperature on the 2:1 Catechol-Al(III) complex, M. I. Sancho, A. H. Jubert, S. E. Blanco, F. H. Ferretti, E. A. Castro, *Spectrochim. Acta Part A: Molec. & Biomolec. Spectr.* **68**(2) (2007) 387-393.
- 755) Trigohexagonite: A rare three-dimensional network of quaternary stoichiometry, M. J. Bucknum, B. Wen, E. A. Castro, *Global J. Mol. Sci.* **2**(2) (2007), 37-44. *Nature Precedings* <http://hdl.net/10101/npre.2008.1650.1>, (2008).
- 756) QSPR Modeling Mineral Cristal Lattice Energy by Optimization of Correlation Weights of Vertex and Vertex Degree in Graphs of Atomic Orbitals: Linear and Non-linear Models, E. A. Castro, A. P. Toropova, A. A. Toropov, R. Z. Akhmerov, *World J. Chem.* **1**(1) (2006) 6-9.
- 757) Theoretical study of 3,6-difluoro-1,2,4,5-tetroxane isomers, J. M. Romero, N. L. Jorge, M. E. Gómez-Vara, E. A. Castro, *Org. Chem. An Indian J.* 2(1-3) (2006), http://ocajj.tsijournals.com/Abstract/Vol2_1-3/Or01EACastro.htm
- 758) A successful virtual screening application: Prediction of anticonvulsant activity in MES test of widely used pharmaceutical and food preservatives methylparaben and Propylparaben, A. Talevi, C. L. Bellera, E. A. Castro, L. B. Blanch, *J. Comput. Aided Molec. Design.* **21** (2007) 527-538.
- 759) La Eliminación de las Impurezas en la Catálisis Asimétrica, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **357** (2008) 41-43.
- 760) Experiencia didáctica en el aula de ciencias: Un análisis desde la concepción constructivista, M. B. López, E. A. Castro, *Educación en la Química* **13**(2) (2007) 97-107. Reimpreso con autorización en *Ind. Quim.* **359** (2009) 58-62.

- 761) Construcción, validación y aplicación de un modelo QSAR para la búsqueda de nuevos agentes antiepilépticos, A. Talevi, E. A. Castro, L. E. Bruno-Blanch, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **No. 236** (1) (2007) 19-30.
- 762) Comprobación experimental de datos predichos de capacidades de adsorción mediante la aplicación de relaciones cuantitativas estructura-propiedad (QSPR) para C₂H₄, H. Castañeta, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, J. L. Vicente, F. M. Fernández, *Rev. Bol. Quim.* **24**(1) (2007) 45-52.
- 763) Prediction of aqueous toxicity for heterogeneous phenol derivatives by QSAR, P. R. Duchowicz, A. G. Mercader, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Chemom. & Intell. Lab. Systems* **90**(2) (2008) 97-107.
- 764) Spectroscopic study of the dispiro-1,2,4,5-tetroxane (cyclohexanone diperoxide), J. M. Romero, N. L. Jorge, M. E. Gómez-Vara, A. H. Jubert, E. A. Castro, *Spectr. Chimica Acta, Part A* **70**(4) (2008) 775-779, DOI: 10.1016/j.saa.2007.09.018
- 765) SMILES Based Optimal Descriptors: QSAR Modeling Mutagenicity, E. A. Castro, A. P. Toropova, A. A. Toropov, S. Kh. Maksudov, *Physical Chemistry: An Indian Journal* **2**(3) (2007) 171-175.
- 766) Application of a Novel Ranking Approach in QSAPR-QSAR, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, F. M. Fernández, *J. Math. Chem.* **43**(2) (2008) 620-636, DOI: 10.1007/s10910-006-9214-6
- 767) Theoretical study of trimethylsilyl-substituted tetrahedrane derivatives. Semiempirical methods, E. A. Castro, P. R. Duchowicz, *Advances in Natural and Applied Sciences (ANAS)* **2**(1) (2008)
- 768) QSAR Modeling of the interactions of flavonoids with GABA(A) receptor, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, M. G. Vitale, J. C. Autino, *Eur. J. Med. Chem.* **43** (2008) 1593-1602, DOI: 10.1016/j.ejmech.2007.11.009
- 769) Geometrical-topological correlation in structures, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *Nature Precedings* <http://hdl.handle.net/10101/npre.2008.1651.1>, (2008).
- 770) ¿Hacia una Posible Química Orgánica Acuosa?, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **360** (2009) 3-5.
- 771) La Microscopía de Fuerza Atómica, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **358** (2008) 30-31.
- 772) Algunos Contactos Singulares, E. A. Castro, *Ind. Quim.* **358** (2008) 19-20.
- 773) Adsorción de hidrógeno sobre una superficies Pt/100) modificada por nanopartículas de Ni, E. V. Ortiz, M. B. López, E. A. Castro, Proceeding II Encuentro de Jóvenes Investigadores en Ciencia y Técnica de Materiales, Trabajos Completos, Editor C. E. Schvezov y col., Primera Edición, Rosario, Sociedad Argentina de Materiales, 2008. ISBN 978-987-24687-1-2
- 774) Modified and enhanced replacement method for the selection of molecular descriptors in QSAR and QSPR theories, A. G. Mercader, P. R. Duchowicz, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **92** (2008) 138-144.
- 775) QSPR study of the Henry's Law constant for hydrocarbons, P. R. Duchowicz, J. C. M. Garro, E. A. Castro, *Chemom. & Intell. Lab. Syst.* **91** (2008) 133-140.
- 776) Catalytic decomposition of 3,3,6,6-tetramethyl-1,2,4,5-tetroxane. Effect of ferric ions (Fe³⁺), M. B. Reguera, J. M. Romero, S. Bustillo, N. L. Jorge, M. E. Gómez-Vara, E. A. Castro, *Krag. J. Sci.* **30** (2008) 73-79.
- 777) Determination of dissociation constants of p-hydroxybenzophenone in aqueous-organic mixtures. Solvent effects, M. I. Sancho, A. H. Jubert, S. E. Blanco, F. H. Ferretti, E. A. Castro, *Can. J. Chem.* **86**(5) (2008) 462-469.

- 778) An exploratory study to investigate possible simple descriptors in order to predict relative activity of antiepileptic enaminones, J. Garro Martínez, M. Andrade, M. Estrada, E. A. Castro, Z. Muczi, G. Zamarbide, I. G. Csizmadia, *J. Phys. Org. Chem.* **21**(5) (2008) 409-418.
- 779) Catalytic effect of cuprous ions on thermal decomposition of 3,3,6,6-tetramethyl tetroxane in methanol solutions, L. I. Giménez, J. M. Romero, S. Bustillo, N. L. Jorge, M. E. Gómez-Vara, E. A. Castro, *Zhurnal Obshchei Khimii (Russian Journal of General Chemistry)* **78**(6) (2008) 1273-1276, **DOI:** 10.1134/s1070363208060303.
- 780) QSPR Prediction of inhibition of aldose reductase for flavonoids, A. G. Mercader, P. R. Duchowicz, F. M. Fernández, E. A. Castro, D. Bennardi, J. C. Autino, G. P. Romanelli, *Bioorg. Med. Chem.* **16** (2008) 7470-7476, **DOI:** 10.1016/j.bmc.2008.06.004
- 781) 3D-Chiral (2.5) Atom-Based TOMOCOMD-CARDD Descriptors: Theory and QSAR Applications to Central Chirality Codification, Y. Marrero-Ponce, J. A. Castillo-Garit, E. A. Castro, F. Torrens, R. Rotondo, *J. Math. Chem.* **44**(3) (2008) 755-786. **DOI:**10.1007/S10910-008.9386-3
- 782) Theoretical studies on the structure and spectroscopic properties of pseudohalides, N. B. Okulik, A. H. Jubert, E. A. Castro, *J. Struct. Chem.* **TOM 49**, No. 5 (2008), 956-970, **UDC:** 544.15 – 544.18 – 543.42, <http://dx.doi.org/10.1007/S10947-008-0158-5>
- 783) La inteligencia espiritual, E. A. Castro, *articuloz*, 2008, <http://www.articuloz.com/ciencia-articulos/la-inteligencia-espiritual-una-nueva-forma-de-inteligir-o-algo-mas-de-lo-ya-conocido-en-el-terreno-de-la-aprehension-humana-478034.html>
- 784) Partial order ranking for the aqueous toxicity of aromatic mixtures, P. R. Duchowicz, M. G. Vitale, E. A. Castro, *J. Math. Chem.* **44**(2) (2008) 541-549, **DOI:** 10.1007/s10910-007-9327-6
- 785) Chemical topology of crystalline matter and the transcendental numbers ϕ , e and π , M. J. Bucknum, E. A. Castro, *J. Math. Chem.* **46**(1) (2008) 117-138, **DOI:** 10.1007/s10910-008-9446-8
Nature Precedings <http://hdl.handle.net/10101/npre.2008.1587.2>
- 786) Partial Order Theory applied on QSPR-QSAR studies, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *Combinatorial Chemistry and High Throughput Screening* **11**(10) (2008) 783-793.
- 787) The Squarographites: A Lesson in the Chemical Topology of Tessellations in 2- and 3-Dimensions, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *Solid State Sciences* **10**(9) (2008-9) 1245-1251, **DOI:** 10.1016/j.solidstatesciences.2007.11.035.
- 788) Methodologies QSAR/QSPR/QSTR: Current state and perspectives, F. P. Maguna, M. B. Núñez, N. B. Okulik, E. A. Castro, *Int. J. Chem. Model.* **1**(2) (2008) 221-244.
- 789) Compressibility of α -Ca₃N₂ to 137 Kb using synchrotron radiation and a diamond anvill cell, M. J. Bucknum, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *Int. J. Chem. Model. (IJCHEMO)* **2**(1) (2009)
- 790) A combined virtual screening 2D and 3D QSAR methodology for the selection of new anticonvulsant candidates from a natural product library, A. Talevi, L. Gavernet, E. A. Castro, L. Bruno Blanch, *QSAR & Combinatorial Sci.* **27**(9) (2008) 1120-1129, <http://www.interscience.wiley.com/journal/104557877/home?CRETY=1&SRETRY=0>
- 791) QSPR study of solvent quenching of the ⁵D₀ → ⁷F₂ emission of Eu(6,6,7,7,8,8,8-heptafluoro-2,2-dimethyl 3,5-octanedionate)₃, A. G. Mercader, P. R. Duchowicz, F. M. Fernández, E. A. Castro, E. Wolcan, *Chem. Phys. Lett.* **462** (2008) 352-357. **DOI:** 10.1016/j.cplett.2008.08.003

- 792) New QSAR study for the prediction of aqueous solubility of drug like compounds, P. R. Duchowicz, A. Talevi, L. E. Bruno Blanch, E. A. Castro, *Bioorg. & Med. Chem.* **16** (2008) 7944-7955.
- 793) Mass spectrometry as a tool for tautomerism studies, J. J. P. Furlong, M. M. Schiavoni, E. A. Castro, P. E. Allegretti, *Russ. J. Org. Chem.* **44**(12) (2008) 1725-1736, *Zhurnal Organicheskoi Khimii* **44**(12) (2008) 1751-1763.
- 794) Thermal decomposition reaction of formaldehyde diperoxide (1,2,4,5-tetroxane) in tetrahydrofurane solution, C. L. Chaín, V. E. Insaurralde, H. E. Ramírez Maisuls, S. Romero, J. M. Bustillo, N. L. Jorge, E. A. Castro, *Int. J. Nat. & Soc. Sci.* (2008), ISSN: 1916-1573, <http://www.ianss.org/ijnss/index.php?volume=1&issue=3>.
- 795) QSPR applied on gas chromatographic retention indices for polycyclic aromatic compounds, P. R. Duchowicz, J. J. Marrugo, R. Vivas-Reyes, E. A. Castro, *Int. J. Environm. Sci.* **1**(1) (2010) 73-77.
- 796) Tautomeric Equilibria Studies by Mass Spectrometry, P. E. Allegretti, M. M. Schiavoni, E. A. Castro, J. J. P. Furlong, *Nature Precedings*, 2007, <http://preceedings.nature.com/documents/1842/version/1>.
- 797) Experimental and theoretical study of the structure and vibrational spectra of valpramide, C₇H₁₅CO.NH₂, A. H. Jubert, N. C. Comelli, N. E. Massa, E. A. Castro, *J. Raman. Spectr.* **40**(1) (2009) 6-17.
- 798) Thermal decomposition of the acetone cyclic diperoxide in octanol solution, L. C. A. Leiva, N. L. Jorge, J. M. Romero, L. F. R. Cafferata, M. E. G. Vara, E. A. Castro, *J. Arg. Chem. Soc.* **96**(1-2) (2008) 110-122.
- 799) Comparative analysis of complexation of pesticides (fenitrothion, methylparathion, parathion) and their ester-analogues by beta-cyclodextrin, E. Coscarello, D. J. Barbiric, E. A. Castro, R. V. Vico, E. I. Bujàn, R. H. de Rossi, *J. Struct. Chem.* **50**(4) (2009) 671-679. DOI: 10.1007/s 10947-009-0103-2.
- 800) Optimal descriptors based on extended connectivity and codes of cycles: QSPR of hydrocarbons normal boiling points, E. A. Castro, A. A. Toropov, A. P. Toropova, R. Z. Akhmerov, *Kragujevac J. Sci.* **31** (2009) 33-43.
- 801) QSPR Studies on aqueous solubilities of drug-like compounds, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *Int. J. Mol. Sci.* **10**(6) (2009) 2558-2577, DOI: 10.3390/ijms10062558.
- 802) Reactivity of a Pt(100) cluster modified by adsorption of a Nickel tetramer, E. V. Ortiz, M. B. López, E. A. Castro, *J. Physics: Conference Series* **167** (2009) 012021. DOI: 10.1088/1742-6596/167/1/012021
- 803) New hybrid genetic based support vector regressions QSAR approach for analyzing flavonoids – GABA(A) complexes, M. Goodarzi, P. R. Duchowicz, C. H. Wu, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Chem. Inf. & Model.* **49**(6) (2009) 1475-1485.
- 804) Aplicaciones QSAR en toxicidad de mezclas aromáticas, P. R. Duchowicz, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **239**(2) (2009) 31-41.
- 805) QSAR Analysis of quinoxaline-2-carboxylate 1,4-di-N-oxides and antimycobacterial agents, E. Vicente, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, A. Monge, *J. Mol. Graphics & Model.* **28** (2009) 28-36.
- 806) Spectrometric studies and semiempirical calculation of some thiomorpholides, P. E. Allegretti, D. Ruiz, E. A. Castro, J. J. P. Furlong, *The Open Physical Chemistry Journal* **3** (2009) 18-23, ISSN: 1874-0677, DOI: 10.2174/187-4067700903010018.
- 807) QSAR Models for quinoxaline 1,4-di-N-oxide derivatives as antitrypanosomal agents, E. Vicente, P. R. Duchowicz, S. Pérez-Silanes, I. Aldana, E. A. Castro, H. Cerecetto,

- M. González, A. Monge, *Drugs of the Future*, **34**(Supplement A) (2009) PC 95.
- 808) Density functional study on the stability and reactivity of Pt(1000) and Pt(111) surfaces modified by Ni atoms, M. B. López, E. A. Castro, *Nature Precedings*, <http://precedings.nature.com/documents/3909/version/1>, *Int. J. Chem. Model.* **2**(4) (2010) 1-14, ISSN:1941-3955.
- 809) QSAR Analysis on Spodoptera litura antifeedant activities for flavone derivatives, P. R. Duchowicz, M. Goodarzi, M. Ocsachoque, G. P. Romanelli, E. Ortiz, J. Autino. D. Bennardi, D. Ruiz, E. A. Castro, *Sci. Total Environm. (STOTEN)*, DOI: 10.1016/j.Scitoten.2009.09.041
- 810) Spin polarized density functional theory applied to the study of nanoalloys, E. Valle Ortiz, M. B. López, E. A. Castro, *Computational Mechanics* **28** (2009) 2435-2443, ISSN: 1666-6070.
- 811) Generation of new QSAR model for anticonvulsant activity and application in virtual screening, A. Talevi, E. A. Castro, L. B. Blanch, *Int. J. Appl. Chem.* **4**(2) (2008) 99-118. <http://www.interscience.wiley.com/journal/104557877/home?CRETY=1&SRETRY=0>
- 812) Hsichengia: A 4,6-connected trigonal structure pattern in space group P3ml, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *Russ. J. Gen. Chem.* **79**(11) (2009) 2445-2448, ISSN: 1070-3632 (Print), 1608-3350 (On line), DOI: 10.1134/S1070363209110279.
- 813) Theoretical characterization of some amides and esters derivatives of valproic acid, A. H. Jubert, N. C. Commelli, P. Fuentealba, E. A. Castro, *J. Mol. Model.* **16**(2) (2009) 343-359, DOI: 10.1007/s00894-009-0554-6, ISSN 1610-2940 (Print), 0948-5023 (Online).
- 814) Spectroscopy properties of the amide group in valpromide and some derivatives with antiepileptic activity, N. C. Comelli, N. E. Massa, A. H. Jubert, E. A. Castro, *J. Raman Spectrosc.* **40** (2009) 1797-1809, DOI 10.1002/jrs.2322.
- 815) Thermal decomposition reaction of 3,3,6,6-tetramethyl-1,2,4,5-tetroxane in 2-metoxyethanol solution, L. A. C. Leiva, J. M. Romero, N. L. Jorge, L. F. R. Cafferata, M. E. Gómez-Vara, E. A. Castro, *Chem. Heter. Comp.* **45**(12) (2009) 1455-1459, DOI: 10.1007/s10593-010-0449-6.
- 816) Predictive modeling of the total deactivation rate constant of singlet oxygen by heterocyclic compounds, A. G. Mercader, P. R. Duchowicz, F. M. Fernández, E. A. Castro, F. M. Cabrerizo, A. H. Thomas, *J. Mol. Graphics & Model.* **28** (2009) 12-19.
- 817) A parameter of creativity and quality in reference to intelligence quotient, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **244**(1) (2010) 21-23.
- 818) A dualistic cosmogony, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **244**(1) (2010) 25-27.
- 819) El ceremonial y el orden natural, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **244**(1) (2010) 29-32.
- 820) Optimal partition of QSPR studies datasets: a sampling problem, A. Talevi, C. L. Bellera, E. A. Castro, L. Bruno-Blanch, *MATCH, Comun. Comput. Math. Chem.* **63** (2010) 585-599.
- 821) The Moravia series of crystalline networks, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *Asian Chem. Lett.* **14**(3) (2010) 53-54.
- 822) Trigohexagonite, M. J. Bucknum, B. Wen, E. A. Castro, *J. Math. Chem.* **48**(3) (2010) 816-826, DOI:10.1007/s10910-010-9713-3.
- 823) Amino acid profiles and QSPR analyses of argentine malts and beers, M. A. Giraudó,

- P. R. Duchowicz, E. A. Castro, A. B. Pomilio, *Food Research International*, **43**(4) (2010) 965-971, DOI: 10.1016/j.foodres.2010.01.006.
- 824) QSAR study for fish toxicity of benzene derivatives, P. R. Duchowicz, J. J. Marrugo, E. A. Castro, R. Vivas Reyes, *J. Arg. Chem. Soc.* **97**(2) (2009) 116-127.
- 825) The Bibliographical Compendia: A critical analysis, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **242**(2) (2010) 5-7.
- 826) El desarrollo de las competencias comunicacionales en la educación del Ingeniero Industrial, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **242**(2) (2010) 37-51. Reimpreso con autorización en OMETECA **XVI** (2011) 205-229.
- 827) On the hydrides of B, C, N, O, and F, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **242**(2) (2010) 9-11. *Nature Precedings* 2011.2541.2
- 828) Mass spectrometric study and theoretical calculations on the tautomerism of nitrocompound-nitronic acid, D. L. Ruiz, S. L. Laurella, M. S. Cortizo, M. M. Schiavoni, E. A. Castro, J. J. P. Furlong, *Trends in Organic Chemistry* **14** (2010) 63-71.
- 829) Tetroxanes: Structure and Properties, L. N. Jorge, E. A. Castro, *Trends in Organic Chemistry* **13** (2009) 65-74, ISSN: 0972-4362.
- 830) Los modelos de comunicación en Química, E. A. Castro, *Ind. & Quim.* **362** (2010) 27-33.
- 831) Cosmogony of the Material World, M. J. Bucknum, Sir R. Penrose, E. A. Castro, *Int. J. Environm. Sci.* **1**(2) (2010) 89-109.
- 832) Predictive study of the dissociation constants of diverse pharmaceutical compounds, A. G. Mercader, M. Goodarzi, P. R. Duchowicz, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Chem. Biol. & Drug Design.* **76** (2010) 433-440.
- 833) Replacement method and enhanced replacement method versus the genetic algorithm approach for the selection of molecular descriptors in QSPR/QSAR theories, A. G. Mercader, P. R. Duchowicz, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Chem. Inf. Model.* **50** (2010) 1542-1548.
- 834) Effect of temperature, pH and NaCl on nisin activity against *Lactobacillus fructivorans* Cristian Herman, Fabiana P. Maguna, Oscar A. Garro, Eduardo A. Castro, *J. Arg. Chem. Soc.* **97** (2009) 11-18.
- 835) Adsorption isotherms of substituted benzophenones on a reverse phase liquid chromatography system. Effect of the mobile phase composition, M. I. Sancho, S. E. Blanco, E. A. Castro, *J. Chem. & Eng. Data* **55** (2010) 4768-4774.
- 836) Amino acid profiles and quantitative structure property relationships for malts, A. B. Pomilio, P. R. Duchowicz, M. A. Giraud. E. A. Castro, *Food. Res. Int.* **43** (2010) 965-971.
- 837) Prediction of drug intestinal absorption by new linear and non-linear QSPR, A. Talevi, M. Goodarzi, E. Ortiz, P. R. Duchowicz, C. Bellera, G. Pesce, E. A. Castro, L. Bruno-Blanch, *Eur. J. Med. Chem.* **46** (2011) 218-228.
- 838) Solvent effect of oxygen in the thermolysis decomposition of the acetone diperoxide, M. I. Profeta, J. R. Romero, L. A. C. Leiva, N. L. Jorge, M. E. Gómez-Vara, E. A. Castro, *Int. J. Chemoinf. & Chem. Engin.* **1**(1) (2011) 96-102.
- 839) Computer-aided linear modelling employing QSAR for drug discovery, E. C. Ibezim, P. R. Duchowicz, N. E. Ibezim, L. M. A. Mullen, I. V. Onyishi, S. A. Brown, E. A. Castro, *Scient. Res. & Essay* **4**(13) (2009) 1559-1564.
- 840) Quantitative Structure-Spectral Property relationships for functional groups of novel

- 1,2,5-thiadiazole compounds, P. R. Duchowicz, M. V. Mirifico, M. F. Rozas, J. A. Caram, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Chemom. & Intell. Lab. Systems* **105** (2011) 27-37.
- 841) Computer-aided linear modelling employing QSAR for drug discovery, E. C. Ibezim, P. R. Duchowicz, N. E. Ibezim, L. M. A. Mullen, I. V. Onyishi, S. A. Brown, E. A. Castro, *African J. Basic & Applied Science* **1**(3-4) (2009) 76-82.
- 842) Characterization of polycyclic aromatic hydrocarbons by multivariate statistical analysis, D. J. Marino, E. A. Castro, L. Massolo, A. Mueller, O. Herbarth, A. E. Ronco, *Int. J. Chemoinf. & Chem. Engin.* **3**(3) (2011) 155-169.
- 843) Study of the structural and electronic properties of valproic acid and new derivatives used as anticonvulsant agents, A. H. Jubert, N. C. Comelli, R. Lobayán, E. A. Castro, *J. Phys. Chem. A* **115** (2011) 1686-1700.
- 844) QSAR Treatment of a new class of triphenylmethyl-containing compounds as potent anticancer agents, L. Mullen, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *Chemom. & Intell. Lab. Syst.* **107** (2011) 269-275
- 845) QSPR Analyses for aminograms in food: Hard Cheeses, P. R. Duchowicz, M. A. Giraud, E. A. Castro, A. B. Pomilio, *Chemom. & Intell. Lab. Systems*, **107** (2011) 384-390,
DOI: 10.1016/j.chemolab..2011.05.014,
<http://dx.doi.org/10.1016/j.chemolab.2011.05.014>.
- 846) The carbon allotrope glitters as a n-diamond and i-carbon nanocrystals, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **245**(2) (2011) 43-46.
- 847) Osmotic pressure barometer, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **245**(2) (2011) 41-42.
- 848) La Alquimia y la Química Cuántica: Algunas similitudes significativas, E. A. Castro, *Ind. & Quim. ISSN 0368-0819* **N° 363** (2011) 6-8.
- 849) Inclusion complex of 2-chlorobenzophenone with cyclomaltoheptaose (β -cyclodextrin). Temperature, solvent effects and molecular modeling, M. I. Sancho, E. Gasull, S. Blanco, E. A. Castro, *Carbohydrate Research*. **346** (2011) 1978-1984.
- 850) Advances in the Replacement and Enhanced Replacement Method in QSAR & QSPR Theories, A. G. Mercader, P. R. Duchowicz, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Chem. Inf. & Model.* **51** (2011) 1575-1581.
- 851) A comparative QSAR on 1,2,5-thiodiazolidin-3-one 1,1 dioxide compounds as selective inhibitors of human serine proteinases, J. Gacía, M. F. Rozas, P. R. Duchowicz, M. V. Mirifico, J. A. Caram, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Mol. Graphics & Modeling* **31** (2011) 10-19.
- 852) Global metabolic response in the bile of pejerrey (*Odontesthes bonariensis*, Pisces) sublethally exposed to the pyrethroid cypermethrin, P. Carriquiriborde, D. J. Marino, G. Giachero, E. A. Castro, A. E. Ronco, *Ecotoxicology & Environmental Safety*, 2011, DOI: 10.1016/j.ecoenv.2011.07.039.

- 853) Spectroscopic and TD-DFT study of solvent effects on the electronic absorption spectra of
Flavone and 7-hydroxyflavone in neat and binary solvent mixtures, M. I. Sancho, M. C.
Almandoz, S. E. Blanco, E. A. Castro, *Int. J. Molec. Sci.* **12**(12) (2011) 8895-8912, DOI: 10.3390/ijms120x000x,
ISSN 1422-0067, www.mdpi.com/journal/ijms
- 854) Isoglitter, M. J. Bucknum, E. A. Castro, Bin Wen, npre.2011.6483.1, <http://precedings.nature.com>.
J. Math. Chem. **50**(8) (2012) 2281-2290, Manuscript JOMC-1145R1, DOI: 10.1007/s10910-012-0030-x.
- 855) SMILES based QSPR models of ionic lattice energies, E. A. Castro, A. P. Toropova, A.
A. Toropov, R. Z. Akhmerov, *Int. J. Chem. Model.* **2**(2-3) (2010) 209-220.
- 856) Preservation of C hexagons in C allotrope transformations, M. J. Bucknum, E. A. Castro,
Nature Precedings, npre.2011.6481.1.
- 857) Topological properties of some PhSeX compounds, N. B. Okulik, A. H. Jubert, E. A. Castro, *J. Mol. Model.*
18(3) (2012) 913-920. DOI: 10.1007/s00894-011-1127-z.
- 858) QSAR on aryl-piperazine derivatives with activity on malaria, E. Ibezim, P. R. Duchowicz, E. V. Ortiz, E. A. Castro, *Chemom. & Intell. Lab. Systems* **110** (2012) 81-88.
- 859) The development of more accurate QSAR techniques, A. Lee, A. G. Mercader, E. A. Castro, P.
R. Duchowicz, *SciTech, Journal of Science & Technology* **1**(1) (2012) 3-41.
- 860) The importance of the QSAR/QSPR methodology to the theoretical study of pesticides, P. R. Duchowicz,
E. A. Castro, *Int. J. Chem. Model.* **5**(1) (2012-2013)
- 861) QSPR Analyses for aminograms in food: Citric juices and concentrates, P.R. Duchowicz, M. A. Giraud, A. B. Pomilio, E. A. Castro, *Food Chemistry* DOI:10.1016/j.foodchem.2010.04.082, **123**(3) (2010) 917-927.
- 862) Amino acid profiles and QSPR analyses for Merlot and Torrontés argentine wines, M. A. Giraud, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, A. B. Pomilio, *Food Chemistry*.
FOODCHEM-D-11-03139R1
- 863) QSAR study of the DPPH radical scavenging activity of di(hetero)arylamines derivatives of
benzo[b]thiophenes, halophenols and caffeic acid analogues Adam Lee, Andrew Gustavo Mercader,
Pablo R Duchowicz, Eduardo A Castro, Alicia B. Pomilio, *Chemometrics & Intelligent Laboratory Systems*.
116 (2012) 22-40, CHEMOM2494, PII: S0169-7439(12)00076-7, DOI: 10.1016/j.chemolab.2012.03.016
- 864) Calorimetric and computational study of enthalpy of formation of acetone diperoxide, A. N. Pila,
M. B. Reguera, M. I. Profeta, N. L. Jorge, E. A. Castro, *Revista Iberoamericana Interdisciplinar de Métodos*,

- Modelización y Simulación (NEREIS)* **4** (2012) 31-36, ISSN 1888-8550.
- 865) La aplicación de la teoría QSAR/QSPR en la predicción de actividades biológicas y propiedades fisicoquímicas. I-
Introducción y propósitos generales, R. Villamayor, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **246**(1) (2012) 25-30.
- 866) La aplicación de la teoría QSAR/QSPR en la predicción de actividades biológicas y propiedades fisicoquímicas. II-
Las técnicas de clasificación, R. Villamayor, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **246** (2012) 31-46.
- 867) An integrated drug development approach applying topological descriptors, A. Talevi, C. L. Bellera, M. Dilanni,
P. R. Duchowicz, L. Bruno-Blanch, E. A. Castro, *Current Computer Aided Drug Design (CCADD)* **8** (2012) 172-181,
ISSN 1573-4019.
- 868) QSAR applications during last decade on inhibitors of acetylcholinesterase in Alzheimer's disease,
K. Y. Wong, P. R. Duchowicz, A. G. Mercader, E. A. Castro, *Mini Reviews in Medicinal Chemistry, Special Issue*, **12** (2012) 936, M. C. Monteagudo, Editor, PMID: 22303974,
<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/22303974>.
- 869) Theoretical studies on the structure and spectroscopic properties of 2,4-D(2,4-dichlorophenoxyacetic acid), M. G. Andino, I. M. Profeta, M. J. Romero, N. L. Jorge, E. A. Castro, *Int. J. Chemoinf. & Chem. Engin. (IJCCE)* **2**(2) (2012) 1-11.
- 870) Kinetics and hydrolysis mechanism of 2,4-dichlorophenoxyacetic acid, J. M. Romero, N. L. Jorge, E. A. Castro,
Int. J. Res. Chem. & Environm. **2**(1) (2012) 54-57.
- 871) QSAR on aryl-piperazine derivatives with activity on malaria, E. Ibezim, P. R. Duchowicz,
V. Ortiz, E. A. Castro, *Chemometrics & Intelligent Laboratory Systems* **110** (2012) 81-88.
- 872) Anticonvulsant activity of ringed enamines: A QSAR study, J. C. Garro Martínez, P. R. Duchowicz, M. R. Estrada, G. N. Zamarbide, E. A. Castro, *QSAR & Comb. Sci.* **28** (2009) 1376-1385.
- 873) A multivariate QSAR study on the anticonvulsant activity of acetamide-N-Benzylacetamide derivatives. Influence of
different molecular descriptors, J. C. Garro-Martínez, P. R. Duchowicz, M. R. Estrada, E. A. Castro, *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry* **67** (2012) 745-758.
- 874) Exploring 3-arylquinoxaline-2-carbonitrile 1,4-di-N activities against neglected diseases with QSAR, E. Vicente, P. R. Duchowicz, E. del Valle Ortiz, A. Monge, E. A. Castro, *Chem. Biol. & Drug Design* **76** (2010) 59-69.
- 875) A comparative QSAR on 1,2,5-thiadiazolin-3-one-1,1-dioxide compounds as selective inhibitors of human serine proteinases, J. García, M. F. Rozas, P. R. Duchowicz, M. V. Mirifico, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Mol. Graphics & Model.* **31** (2011) 10-19.

- 876) Anti-T.cruzi activities and QSAR studies of 3-arylquinoxaline-2-carbonitrile di-N-oxide derivatives, E. Vicente, P. R. Duchowicz, D. Benítez, E. A. Castro, H. Cerecetto, M. González, A. Monges, *Bioorg. & Med. Chem. Lett.* **20** (2010) 4831-4835.
- 877) Advances in the Replacement and Enhanced Replacement Method in QSAR and QSPR theories, A. G. Mercader, P. R. Duchowicz, F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Chem. Inf. & Model.* **51** (2011) 1575-1581.
- 878) QSPR study of valproic acid and its functionalized derivatives, N. C. Comelli, P. R. Duchowicz, A. H. Jubert, E. A. Castro, *Molecular Informatics* **31** (2012) 181-188, DOI: 10.1002/minf.201100119.
- 879) On the n-diamond and i-carbon nanocrystalline forms, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *J. Math. Chem.* **50**(5) (2012) 1034-1038, DOI:10.1007/s10910-011-9954-9.
- 880) QSAR study and molecular design of pen-chain enamines as anticonvulsant agents, J. C. Garro-Martínez, P. R. Duchowicz, M. Estrada, G. Zamarbide, E. A. Castro, *Int. J. Mol. Sci.* **12** (2011) 9354-9368, ISSN 1422-0067, DOI: 10.3390/ijms 12129354.
- 881) La aplicación de la teoría QSAR/QSPR en la predicción de actividades biológicas y propiedades fisicoquímicas. III- Los conjuntos moleculares de ensayo, R. Villamayor, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.* **247**(2) (2012) 5-34, ISSN 0037-843.
- 882) Drug development of CNS drugs. Lost in translation?, A. Talevi, C. L. Bellera, M. Di Ianni, M. Gartner, L. E. Bruno Blanch, E. A. Castro, *Mini Reviews in Medicinal Chemistry* **12** (2012) 959.
- 883) Synthesis and thermal decomposition reaction of 3,6-dibutanoic-1,2,4,5-tetroxane in solution, M. B. Reguera, S. G. Frette, J. M. Romero, N. L. Jorge, E. A. Castro, *BenSci* **4**(1) (2012) 1-4.
- 884) Some recent developments on the synthesis, chemical reactivity and theoretical studies of tetroxanes, N. L. Jorge, E. A. Castro, *IJC* **3**(1) (2013)
- 885) Kinetics & mechanism of the thermal decomposition reaction of 3,6-diphenyl-1,2,3,5-tetroxane in solution, N. L. Jorge, E. A. Castro, *Int. J. Chem. Model.* **4**(4) (2013)
- 886) Exocyclobutadieneite, M. J. Bucknum, V. K. Dasari, E. A. Castro, *J. Math. Chem.*, DOI: 10.1007/s10910-012-0115-6.
- 887) QSAR study for carcinogenicity in a large set of organic compounds Pablo R. Duchowicz, Nieves C. Comelli, Erlinda V. Ortiz, Eduardo A. Castro, *Current Drug Safety* **7**(4) (2012) 282-288, ISSN:1574-8863 (Print), ISSN: 2212-3911 (online).

CV07747738 fragmentado - Microsoft Word

Archivo Edición Ver Insertar Formato Herramientas Tabla Ventana ?

Normal + Justific

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18

Trabajos aceptados para su publicacion

- 5) Resonance in 2- and 3-dimensions in caltropes and their corresponding metalboride salts, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *Asian Chem. Lett.* **14**(3) (2010).
- 6) Development of a high sensitive ensemble of topological models for early identification of P-glycoprotein substrates, M. Di Ianni, a. Talevi, E. A. Castro, L. Bruno-Blanch, *J. Chemom.* (2011)
- 7) Synthesis and thermal decomposition reaction of 3,6-dibutanoic-1,2,4,5-tetroxane in solution, M. B. Reguera, S. G. Frette, J. M. Romero, N. L. Jorge, E. A. Castro, *BenSci* (2012).
- 8) Synthesis of the carbon allotrope glitter as nanocrystalline n-diamond, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *Natural Science*.
- 10) Multicriteria approaches in computer-aided drug discovery, A. Talevi, C. L. Bellera, M. Di Ianni, M. Gartner, L. B. Blanche, E. A. Castro, *Special Issue of Mini Reviews in Medicinal Chemistry*.
- 11) Drug development of CNS drugs. Lost in translation?, A. Talevi, C. L. Bellera, M. Di Ianni, M. Gartner, L. E. Bruno Blanch, E. A. Castro, *Mini Reviews in Medicinal Chemistry*.
- 12) La aplicación de la teoría QSAR/QSPR en la predicción de actividades biológicas y propiedades fisicoquímicas Los conjuntos moleculares de ensayo, R. Villamayor, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.*
- 13) La aplicación de la teoría QSAR/QSPR en la predicción de actividades biológicas y propiedades fisicoquímicas Algunos resultados significativos, R. Villamayor, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.*
- 15) QSPR Study of valproic acid and its functionalized derivatives, N. C. Comelli, P. R. Duchowicz, R. M. Lobayán, A. H. Jubert, E. A. Castro, *Molecular Informatics*.
- 16) La administración de medicamentos sin prescripción médica en la infancia. I- Introducción, F. P. Maguna, N. B. Okulik, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.*
- 17) La administración de medicamentos sin prescripción médica en la infancia. II- Marco referencial y antecedentes, F. P. Maguna, N. B. Okulik, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.*
- 18) La administración de medicamentos sin prescripción médica en la infancia. III- La automedicación, F. P. Maguna, N. B. Okulik, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.*
- 19) La administración de medicamentos sin prescripción médica en la infancia. IV- La automedicación, en la infancia. F. P. Maguna, N. B. Okulik, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.*

Inicio

Pág.

Sec.

A

Lín.

Col.

GRB

MCA

EXT

SOB

Inglés (Reino

Inicio

Re: Averiguación ...

KINGSTON (F.)

CV07747738 - Mic...

Ed6 - Micros

Libros, Monografías, Tesis, Capítulos de Libros, Ediciones

- 1- *Aplicación de la Teoría de Orbitales Moleculares al Beta-Caroteno*, Tesis Doctoral, Universidad Nacional de La Plata, Facultad de Ciencias Exactas, 1971.
- 2- *La Segunda Cuantificación en la Química Cuántica*, E. A. Castro, F. M. Fernández,

- E. E. Mola, FECIC, Buenos Aires, 1983.
- 3- *Hypervirial Theorems. Development and Application of the Hypervirial Methodology to Solve Quantum Chemistry Models*, F. M. Fernández, E. A. Castro, Lectures Notes in Chemistry, Vol. 43, Springer-Verlag, Heidelberg, 1987.
 - 4- *Teoría de Perturbaciones y Principio Variacional*, F. M. Fernández, E. A. Castro, en **Metodología Básica**, Ed. S. Fraga, Serie "Nuevas Tendencias en Química Teórica. Estructura, Interacciones y Reactividad", Editorial del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), Madrid, España, 1988.
 - 5- *Large Order Perturbation Theory and Summation Methods*, G. A. Arteca, F. M. Fernández, E. A. Castro, Lecture Notes in Chemistry, Vol. 53, Springer-Verlag, Heidelberg, 1990.
 - 6- *Algunas Reflexiones sobre Física Cuántica y Expansión de Conciencia*, E. A. Castro, en **La Ciencia Frente a los Confines del Conocimiento. Del Todo-y-las-Partes como Modelo Reversible de Síntesis**, Ed. R. P. Muñoz Soler, Sociedad Científica Argentina, Buenos Aires, 1987.
 - 7- *Variation Principle and Perturbation Theory*, F. M. Fernández, E. A. Castro, in "Structure, Interaction and Reactivity", Vol. I-Atomic and Molecular Structure. **Basic Methodology**, S. Fraga (Ed.), Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1992.
 - 8- *On the Algebraic Solution of the Time-Dependent Schrodinger Equation for Simple Dynamical Systems*, F. M. Fernández, E. A. Castro, in **Finite Dimensional Integrable Nonlinear Dynamical Systems**, P. G. L. Leach and W. H. Stteb (Ed.), World Scientific Publishers, Singapore, 1988.
 - 9- *Improved Variational Calculations with Atomic Energy Functionals Using an Additional Restriction on the Density*, M. D. Glossman, E. A. Castro, in **Density Functional Methods in Chemistry**, Jan K. Labanowski & Jan W. Anszelm, Editors, Springer-Verlag, New York, 1991.
 - 10- *Journal of Molecular Structure THEOCHEM*, Vol. 69, 1990, Elsevier, Amsterdam, **Theoretical Chemistry 1989, Proceedings of the XVIII International Congress of Theoretical Chemistry of Latin Expression**, La Plata, Argentina, Edited by Y. G. Smeyers, E. A. Castro, W. J. Orville-Thomas.
 - 11- *Algebraic Methods in Quantum Chemistry and Physics*, F. M. Fernández, E. A. Castro, CRC Press, Inc., USA, 1996.
 - 12- *Algo más Sobre Sombras y Símbolos*, E. A. Castro, **Proceedings of the V Working Sessions**, The Ometeca Institute, Fundación Cafh y Sociedad Científica Argentina, Buenos Aires, 28/6 al 13/7/98
 - 13- *Química Orgánica*, de Imre G. Csizmadia, Editorial Universitaria, Universidad Nacional de San Luis, San Luis, Argentina, 2001, Traducción de E. A. Castro.
 - 14- *La Magia de la Ciencia*, E. A. Castro, Serie Ciencia por Correo, Universidad Nacional de La Plata, La Plata, 1998.
 - 15- *Las Máquinas Voladoras*, E. A. Castro, **Serie Ciencia por Correo**, Universidad Nacional de La Plata, La Plata, 1999.
 - 16- *Notas de Clase de Lógica*, E. A. Castro, Editorial Nueva Escuela del Sur, Buenos Aires, 2002. Segunda Edición 2005.
 - 17- *Usual Theoretical Methods to Study Cyclodextrins and their Complexes*, E. A. Castro and D. J. Barbiric, *Trends in Physical Chemistry*, Vol.9, 2003, 119-128, CPS:physchem/0212001.
 - 18- *Current Theoretical Methods to Study Oxane Derivatives*, E. A. Castro and N. L.

- Jorge, *Trends in Heterocyclic Chemistry*, Vol.9, 2003, CPS:orgchem/0307002.
- 19- *Nomenclatura de Química Inorgánica, Recomendaciones 2000*, Edited by J. A. McCleverty and N. G. Connelly, IUPAC – RS&C – AQA. Traducción de E. A. Castro y E. J. Bottani, http://www.alipso.com/monografias3/Nomenclatura_en_Quimica_Inorganica/index.php, 2007.
 - 20- *Effective Speaking: Communicating in Speech*, C. Turk, E. & F. N. Spon, London – New York, 1985. Traducción de E. A. Castro, 2005.
 - 21- *Applications of Flexible Molecular Descriptors in the QSPR-QSAR Study of Heterocyclic Drugs*, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, A. A. Toropov and A. Benfenati, in *QSAR and Molecular Modeling Studies of Heterocyclic Drugs I*, International Series of Monograph on “*Topics in Heterocyclic Chemistry*”, Volume 3, S. P. Gupta, Editor, 2006, Springer-Verlag, Heidelberg, Germany. ISSN: 1861-9282 (Paper) 1861-9290 (Online), DOI 10.1007/7081_028, pp1-38, ISBN: 3540333789.
 - 22- *Molecules*, Special Issue on “*Flexible Molecules Descriptors*”, Vol. 12, December 2004, pp. 988-1235, Guest Editors E. A. Castro and A. A. Toropov, Editorial p. 988.
 - 23- *Molecular Modeling and Cyclodextrins: A Relationship Strengthened by Complexes*, D. J. Barbiric, E. A. Castro, in *Current Organic Chemistry*, Qing-Xiang Guo, Lei Liu, Editors, Vol. 10, No. 7, 2006, 715-729.
 - 24- **Ciencias y Humanidades. Convergencias**, M. C. Boiero, E. A. Castro, A. Ruatta, Editores, Comité Editor de la Facultad de Ciencias Humanas, Universidad Nacional de Río Cuarto, Río Cuarto, Córdoba (2005). Acreedor al Testimonio de Honor otorgado por la UNRC, Resolución Rectoral No. 1322/07 del 20/08/2008.
 - 25- *La Diferenciación Absoluta entre la Ciencia y la Religión y su Aplicación en la Enseñanza de las Ciencias*, E. A. Castro, en **Ciencias y Humanidades. Convergencias**, M. C. Boiero, E. A. Castro, A. Ruatta, Editores, Comité Editor de la Facultad de Ciencias Humanas, Universidad Nacional de Río Cuarto, Río Cuarto, Córdoba (2005), pp. 87-91.
 - 26- *Las Demandas Actuales de la Ciencia Computacional*, E. A. Castro, ídem, pp.102-109.
 - 27- *La Inteligencia Espiritual: Una Nueva Forma de Inteligir o Algo Más de lo ya Conocido en el Terreno de la Aprehensión Humana?*, ídem, pp.92-98.
 - 28- *La Organización Cognoscente*, E. A. Castro, ídem, pp.26-37.
 - 29- *Liderazgo y Literatura*, E. A. Castro, ídem, pp.66-79.
 - 30- *Ciencia, Tecnología y Desarrollo Social en el Nuevo Milenio*, E. A. Castro, ídem, pp.2-11.
 - 31- *The Order Theory in QSPR/QSAR Studies*, P. R. Duchowicz & E. A. Castro, *Mathematical Chemistry Monographs, No.7*, Publisher: University of Kragujevac and Faculty of Science Kragujevac, 2008. ISBN: 978-86-81829-90-5, X+204 pp.
 - 32- *Aplicaciones Fisicoquímicas y Biológicas de la Teoría QSPR-QSAR*, P. R. Duchowicz, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Monografías*, http://www.alipso.com/Monografias3/Aplicaciones_Fisicoquímicas_y_Biológicas_de_la_Teoria_QSPR-QSAR/index.php
 - 33- **The Shortest Carbon Single Bonds of Chemistry**, E. A. Castro, P. R. Duchowicz, Chapter IV, 99-118, in *Advances in Quantum Chemistry Bonding Structures*, Transworld Research Networks, pag. 419, Kerala, India (2008), Editor M. V. Putz, ISBN: 978-81-7895-306-9, URL: <http://www.trnres.com/putz.htm>
 - 34- **Structures and Bonding of Pseudohalides**, N. B. Okulik, A. H. Jubert, E. A

- Castro, in *Advances in Quantum Chemistry Bonding Structures*, Chapter V, 119-152, Transworld Research Network, Kerala, India (2008), pag.419, Editor M. V. Putz, ISBN: 978-81-7895-306-9, URL: <http://www.trnres.com/putz.htm>
- 35- *Aplicación de los Métodos QSAR-QSPR en Fenómenos de Adsorción de Sustancias Químicas Sobre Materiales Sólidos*, H. Castañeta, E. A. Castro, *Monografías*, <http://www.monografias.com/trabajos41/metodos-qsar-qspr/metodos/qsar-qspr.shtml>.
 - 36- *La Consideración de la Dimensión Axiológica en el Ejercicio del Liderazgo*, E. A. Castro, *Monografías* (2007), <http://www.monografias.com/trabajos42/dimension-axiologica-liderazgo/dimension-axiologica-liderazgo.shtml>.
 - 37- *Hacia un Modelo Integrado de la Comunicación*, E. A. Castro, *Monografías* (2007) URL: <http://monografias.com/trabajos45/modelo-de-comunicación/modelo-de-comunicacion.shtml>. Este trabajo mereció el reconocimiento de “Monografía Destacada” por la calidad de su contenido y fue expuesto en el sitio monografias.com como “El Trabajo del Día”.
 - 38- *La Revalorización de la Oralidad*, E. A. Castro, *Monografías* (2007), http://www.alipso.com/monografias2/LA_REVALORIZACION_DE_LA_ORALIDAD/index.php.
 - 39- *QSPR/QSAR Studies on Desired Properties for Drug Design*, E. A. Castro, Editor-in-Chief, Signpost Design, India, 2010.
 - 40- *El Proceso de Evaluación Interna*, E. A. Castro, *Monografías* 2007, http://www.alipso.com/monografias4/Evaluación_Interna/
 - 41- *La Oratoria Persuasiva*, E. A. Castro, *Monografías* 2007, http://www.alipso.com/monografias2/LA_ORATORIA_PERSUASIVA/index.php.
 - 42- *Los Nuevos Procesos de Enfriamiento*, E. A. Castro, http://www.alipso.com/LOS_NUEVOS_PROCESOS_DE_ENFRIAMIENTO/index.php.
 - 43- *El desarrollo de las capacidades comunicacionales en la formación del Ingeniero Industrial*, E. A. Castro, http://www.alipso.com/monografias2/EL_DESARROLLO_DE_LAS_CAPACIDADES_COMUNICACIONALES_EN_LA_FORMACION_DEL_INGENIERO_INDUSTRIAL/index.php.
 - 44- *Chemical Applications of Fuzzy Logic Theory*, E. A. Castro, P. R. Duchowicz.
 - 45- *Recent Advances in QSAR/QSPR Theory*, Special Thematic Issue of International Journal of Molecular Sciences, Section Physical Chemistry – Theoretical and Computational Chemistry, ISSN 1422-0067, E. A. Castro, Editor, 2009.
 - 46- *Theory and Applications of Artificial Neural Networks to QSPR-QSAR Analysis of Heterocyclic Compounds*, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, in *Trends in Heterocyclic Chemistry, Series Research Trends*, Trivandrum, INDIA.
 - 47- *Lógica: Razonamientos en el Lenguaje Ordinario*, E. A. Castro, monografías.com. <http://www.monografias.com/trabajos63/logica-lenguaje-ordinario/logica-lenguaje-ordinario.shtml>, 2008.
 - 48- *Application of the Fuzzy Logic Theory to QSAR/QSAR Studies in Quantum Frontiers of Atoms and Molecules*, M. Putz, Editor, Nova Publishing, Inc., New York, 2011, ISBN: 978-1-61668-158-6.
 - 49- *Orthogonalization methods in QSPR/QSAR studies*, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, in *QSPR/QSAR Studies on Desired Properties for Drug Design*, E. A. Castro, Editor-in-Chief, Signpost Design, India, 2010, ISBN: 978-81-308-0404-0.
 - 50- *The chemical topology of carbon allotropes and the emergence of spiro quantum chemistry*, M. J. Bucknum, E. A. Castro, in *Handbook of Research in Chemoinformatics and Chemical Engineering*, Chapter 8, A. K. Haghi, Editor, Nova

- Science Publishers, New York, ISBN: 9781-61668-504-1. 2010.
- 51- **Advanced Methods and Applications in Chemoinformatics: Research Progress and New Applications**, E. A. Castro, Leading Editor and A. K. Haghi, Assistant Editor, IGI Global, Hershey, PA 17033, USA, www.igi-global.com, 2011.
DOI: 10.4018/978-1-60960-860-6, ISBN13: 978-1-60960-860-6. ISBN13: 978-1-60960-860-6, isbn10: 1-60960-860-7, eisbn13: 978-1-60960-861-3.
 - 52- **On the Enumeration of the Glitter Series Networks**, M. J. Bucknum, E. A. Castro, Chapter 6, in *Mathematical Chemistry*, Editor W. I. Hong, Nova Science Publishers, New York, 2009, ISBN 978-1-60876-894-3.
 - 53- **Towards Virtual Screening Technologies: Sampling of Chemical Space and Applicability Domain Estimation**, A. Talevi, E. A. Castro, L. Bruno-Blanch, in *Chemical Information and Computation in 21st, A Celebration of 2011 International Year of Chemistry*, M. V. Putz, Editor, Nova Science Publishers, Inc., New York, 2010, Chapter 12.
 - 54- **Recent Studies of Similarity Measures and its Applications to Chemoinformatics and Drug Design**, A. Talevi, E. A. Castro, L. R. Bruno-Blanch, in *Recent Trends on QSAR in the Pharmaceutical Perception*, Mahmud Tareq Hassan, Editor, Bentham Science Publishers, USA, 2010.
 - 55- **On Applications of Macromolecular QSAR Theory**, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, in *Advanced Methods and Applications in Chemoinformatics: Research Progress and New Applications*, E. A. Castro, A. K. Haghi, Editors, IGI Global, USA, 2011, DOI: 10.4018/978-1-60960-860-6, ISBN13: 978-1-60960-860-6. ISBN13: 978-1-60960-860-6, isbn10: 1-60960-860-7, eisbn13: 978-1-60960-861-3.
 - 56- **Lattice Parameters of Calcite in the PT-plane to 7.62 Kb and 533°C**, M. J. Bucknum, E. A. Castro, in *Chemistry and Chemical Engineering Research Progress, Chapter 6*, A. K. Haghi, Editor, 2010, Nova Science Publishers, New York, ISBN: 978-1-61668-502-7, pp. 55-66.
 - 57- **Mass Spectrometry Data as a Semi-empirical QSAR/QSPR Descriptor**, D. J. G. Marino, P. Carriquiriborde, E. A. Castro, in *Vademecum of Computational Chemistry, Volume 2C*, World Scientific, Singapore, Manoj Shukla, Editor, 2010.
 - 58- **Quantitative Structure-Activity Relationships (QSARs) of Antimicrobial Compounds**, F. P. Maguna, N. B. Okulik, E. A. Castro, in *Vademecum of Computational Chemistry, Volume 2C, Chapter 39*, World Scientific, Singapore, Manoj Shukla, Editor, 2010.
 - 59- **Recent Advances on Applications of QSAR/QSPR Theory to Chemistry**, Special Thematic Issue of Asian Chemistry Letters, Vol.14, No. 4, Guest Edited by E. A. Castro, (October – December 2010), KC 68/1, Old Kavinagar, Ghaziabad – 201 002, India.
 - 60- **Recent developments on the chemical reactivity of some tetroxanes**, N. L. Jorge, E. A. Castro, in *Recent Advances on the Theoretical Calculations of Structure and Reactivity of New Heterocyclic Compounds*, E. A. Castro, Guest Editor, Research Signpost, Transworld Research Network, Scientific Research Publishing, Inc. 2010.
 - 61- **Methodologies QSAR/QSPR/QSTR: Current State and Perspectives**, F. M. Maguna, M. B. Núñez, N. B. Okulik, E. A. Castro, in *Advances in Chemical Modeling*, A. K. Haghi, Editor, 2010, Nova Science Publishers, New York

- 62- **High pressure synthesis of the carbon allotrope hexagonite with carbon nanotubes in a diamond anvil cell**, M. J. Bucknum, E. A. Castro, in *Carbon Materials: Chemistry and Physics 5* . “Carbon Bonding and Structures: Advances in **Physics and Chemistry**”, M. V. Putz Volume Editor, Springer Verlag, Heidelberg, 2011. DOI 10.1007/978-94-007-1733-6. Springer Science and Business Media B. V.
- 63- **Structural and Topological Aspects of Carbonium Ions (C = 1-4)**, N. B. Okulik, A. H. Jubert, E. A. Castro, *Research Trends*, Trivandrum, India, Vol.15, 2011, 51-72.
- 64- **Partial Order Ranking and Linear Modeling: Their use in predictive QSAR/QSPR studies**, A. G. Mercader, E. A. Castro, in *Statistical Modelling of Molecular Descriptors in QSAR/QSPR*, D. Bonchev, M. Dahmer, K. Varmuzza, Editors, Wiley, New York, 2010. <http://www.fishpond.com.au/Books/Statistical-Modelling-of-Molecular-Descriptors-QSARQSPR-Matthias-Dehmer-Edited-by-Kurt-Varmuza-Edited-by/9783527324347>
<http://www.amazon.co.uk/Statistical-Modelling-Molecular-Descriptors-QSAR/dp/3527324348>
- 65- **La Oratoria Como Disciplina de Convergencia**, E. A. Castro, <http://www.monografias.com/trabajos81/oratoria-como-disciplina-convergencia/oratoria-como-disciplina-convergencia.shtml>.
- 66- **Chemical Physics of Phonons and Superconductivity: A Heuristic Approach**, M. J. Bucknum, E. A. Castro, Chapter 7, in *Mathematical Chemistry*, Editor W. I. Hong, Nova Science Publishers, New York, 2009, ISBN 978-1-60876-894-3.
- 67- **The Contribution of Molecular Modeling to the Knowledge of Pesticides**, E. Coscarello, D. J. Barbiric, E. A. Castro, in *Pesticides*, INTECH, ISBN 978-953-307-531-0.
- 68- **IJMS (ISSN 1422-0067) Special Issue on “Advances in Molecular Electronic Structure Calculations”**, Section “Physical Chemistry, Theoretical and Computational Chemistry”, E. A. Castro, Guest Editor, 2011.
- 69- **Recent Advances on the Theoretical Calculations of Structure and Reactivity of New Heterocyclic Compounds**, E. A. Castro, Guest Editor, Research Signpost, Transworld Research Network, Scientific Research Publishing, Inc. 2010.
- 70- **New Developments and Applications of QSAR/QSPR Theory**, Research Signpost, Transworld Research Network, Scientific Research Publishing, Inc., 2011.
- 71- **OMETECA in Laramie: Friends and colleagues pay homage to Rafael Catalá**, Editors: K. S. Larsen, J. Hoeg, E. A. Castro, Apple Pergamon, Canada, 2011.
- 72- **Principles of Chemical Topology**, M. J. Bucknum, E. A. Castro, Apple Academic Press, Canada, 2011.
- 73- **Virtual Screening: An Emergent, Key Methodology for Drug Development in an Emergent Continent**, A. Talevi, E. A. Castro, L. Bruno-Blanch, in *Advanced Methods and Applications in Chemoinformatics: Research Methods and New Applications*, E. A. Castro, A. K. Haghi, Editors, IGI Global, USA, 2011, DOI: 10.4018/978-1-60960-860-6, ISBN13: 978-1-60960-860-6. ISBN13: 978-1-60960-860-6, ISBN10: 1-60960-860-7, EISBN13: 978-1-60960-861-3.
- 74- **“The Contribution of QSAR/QSPR to the Knowledge of Pesticides”**, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, in *Pesticides*, INTECH, 978-953-7619-X-X
- 75- **Nanoscience and Advancing Computational Methods in Chemistry: Research Progress**, E. A. Castro, A. K. Haghi, Editors, IGI Global, Hershey, PA, USA, 2011.

- DOI: 10.4018/978-1-4656-1607-3, ISBN: 10:1466616075, EISBN 13:9781465616080.
- 76- **La aplicaci3n de la Teor3a QSAR/QSPR en la predicci3n de actividades biol3gicas y propiedades fisicoqu3micas**, R. Villamayor, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *Monograf3as* (2011).
- 77- **Quantitative Structure Activity/Property Relationships (QSAR/QSPR) as Computer-Based Linear Modeling Tools for Drug Development**, E. C. Ibezim, P. R. Duchowicz, N. E. Ibezim, E. A. Castro, in *Matlab/Book 1*, ISBN 978-953-308-94-9, INTECH, Open Access Publishers, Croatia, 2011.
- 78- **Special Issue in the International Journal of Medicinal Chemistry**, 2011, E. A. Castro Lead Guest Editor, <http://www.hindawi.com/journals/ijmc/>.
- 79- **Dise1o de Conjuntos Moleculares Balanceados para su Aplicaci3n en la Teor3a QSAPR-QSAR**, R. Villamayor, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *Monograf3as.com* (2011). Link de Acceso (URL): <http://www.monograf3as.com/trabajos89/disen0-conjuntos-moleculares-balanceados/disen0-conjuntos-moleculares-balanceados.shtml>
- 80- **QSAR Study and Molecular Design of Open-Chain Enaminones as Anticonvulsant Agents**, J. C. Garro-Mart3nes, P. R. Duchowicz, M. R. Estrada, G. N. Zamarbide, E. A. Castro, in **Atoms in Molecules and in Nanostructures**, http://www.mdpi.com/journal/ijms/special_issues/atoms-in-molecules, *International Journal of Molecular Sciences*, Vol. 12, 2011, DOI: 10.3390/ijms120x000x.
- 81- **Spiro Quantum Chemistry**, M. J. Bucknum & E. A. Castro, Editors, Apple Academic Press, Canada, 2011.
- 82- **Current Theoretical Contributions to Organic Chemistry to Predict, Correlate and Interpret Organic Chemistry Reactions**, E. A. Castro, Guest Editor, Current Organic Chemistry Special Issue, Bentham Science Publishers, 2012.
- 83- **Modern Nanochemistry and Chemoinformatics**, E. A. Castro & A. K. Haghi, Editors, IGI Global.
- 84- **Trigohexagonite**, M. J. Bucknum, B. Wen, E. A. Castro, in *Carbon Bonding and Structures: Advances in Physics and Chemistry*, Mihai V. Putz, Volume Editor, Springer Verlag, Heidelberg-New York, 2011.
- 85- **Consideraci3n de la Flexibilidad Molecular en los Estudios QSAR**, J. Garc3a, P. R. Duchowicz, E. A. Castro
- 86- **Srinivasa Aiyangar Ramanujan: Un genio enigm3tico**, Eduardo A. Castro, Michael J. Bucknum
URL: <http://www.alipso.com/monograf3as4/Srinivasa-Aiyangar-Ramanujan/>
- 87- **Recent studies on similarity measures and its applications to chemoinformatics and drug design**, A. Talevi, L. Bruno-Blanch, E. A. Castro, in *Recent Trends on QSAR in the Pharmaceutical Perception*, Chapter 9, 2012, 270-295, Mahmud Tareq

Hassan, Editor, Bentham Science Editors, DOI: 10.2174/97816080537971120101
eISBN: 978-1-60805-379-7.

88- **Consideración de la flexibilidad conformacional molecular en los estudios QSAR**, J. García, P. R. Duchowicz,

E. A. Castro, URL: http://www.alipso.com/monografias4/Flexibilidad_Molecular.

89- *Nanoscience & Computational Chemistry: Research Progress*, A. K. Haghi, E. A. Castro & A. G. Mercader, Editors,

Apple Academic Press, Ontario, Canada, 2012, ISBN 978-1-4666-1607-3 (hardcover).

90- *Recent progress on mathematical modeling of electrospinning of nanofibers: A detailed review*, S. Maghsoodloo,

S. Rafiei, Sh. Arbab, B. Noroozi, A. K. Haghi, E. A. Castro, **Communications and Networks**, ID: 6101234, 2012.

91- **LA ADMINISTRACIÓN DE MEDICAMENTOS SIN PRESCRIPCIÓN MÉDICA EN LA INFANCIA**", Fabiana P. Maguna,

Nora B. Okulik, E. A. Castro, Editorial Acadèmica Española, AV Akademikverlag GMBH & CoKG, Germany, 2012

92- La aplicación de la teoría QSPR/QSAR en la predicción de actividades biológicas. R. Villamayor, P. R. Duchowicz,

E. A. Castro, Link de Acceso (URL):

<http://www.monografias.com/trabajos93/aplicacion-teoria-qspr-qsar-prediccion-actividades-biologicas/aplicacion-teoria-qspr-qsar-prediccion-actividades-biologicas.shtml>

Trabajos aceptados para su publicación

1) QSAR on tacrine-related inhibitors of acetylcholinesterase in Alzheimer disease, K. Wong,

P. R. Duchowicz, A. G. Mercader, E. A. Castro, *Chemom. & Intell. Lab. Systems*

3) Amino acid profiles and quantitative structure-property relationships models as makers for

Merlot and Torrontès wines, P. R. Duchowicz, M. Giraud, E. A. Castro, A. B. Pomilio,

Food Chemistry.

5) Resonance in 2- and 3-dimensions in caltropes and their corresponding metalboride salts, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *Asian Chem. Lett.* **14**(3) (2010).

6) Development of a high sensitive ensemble of topological models for early identification of P-glycoprotein substrates, M. Di Ianni, a. Talevi, E. A. Castro, L. Bruno-Blanch, *J. Chemom.* (2011)

8) Synthesis of the carbon allotrope glitter as nanocrystalline n-diamond, M. J. Bucknum, E. A. Castro, *Natural Science*.

10) Multicriteria approaches in computer-aided drug discovery, A. Talevi, C. L. Bellera, M. Di Ianni, M. Gartner,

L. B. Blanche, E. A. Castro, *Special Issue of Mini Reviews in Medicinal Chemistry*.

11) Algunos resultados significativos, R. Villamayor, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.*

- 15) QSPR Study of valproic acid and its functionalized derivatives, N. C. Comelli, P. R. Duchowicz,
R. M. Lobayàn, A. H. Jubert, E. A. Castro, *Molecular Informatics*.
- 16) La administración de medicamentos sin prescripción mèdica en la infancia. I- Introducción, F. P. Maguna, N. B. Okulik,
E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.*
- 17) La administración de medicamentos sin prescripción mèdica en la infancia. II- Marco referencial y antecedentes,
F. P. Maguna, N. B. Okulik, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.*
- 18) La administración de medicamentos sin prescripción mèdica en la infancia. III- La automedicación,
F. P. Maguna, N. B. Okulik, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.*
- 19) La administración de medicamentos sin prescripción mèdica en la infancia. IV- La automedicación,
en la infancia, F. P. Maguna, N. B. Okulik, E. A. Castro, *Anal. Soc. Cient. Arg.*
- 20) La administración de medicamentos sin prescripción mèdica en la infancia. V- El comportamiento,
adulto e infantil que rodea al uso de medicamentos, F. P. Maguna, N. B. Okulik, E. A. Castro,
Anal. Soc. Cient. Arg.
- 21) Linear QSAR models for the prediction of carcinogenicity of structurally heterogeneous drugs,
P. R. Duchowicz, E. A. Castro, *Current Drug Safety*, Special Issue on “*In Silico* modelling for prediction of drug induced adverse reactions and environmental hazards using QSAR tools”.
- 23) Amino acid profiles and QSPR analyses for Merlot and Torrontés argentine wines, M. A. Giraud, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, A. B. Pomilio, *Food Chemistry*.
- 25) Complexes of Nile Red and β - OR γ -Cyclodextrin: A Semiempirical-Density Functional Theory – Molecular Dynamics route, Ruth Hojvat, Dora A. Barbiric, Eduardo A. Castro, *African J. Pure & Applied Chem.* (2012).

Trabajos terminados y enviados para su publicación

- 1) Anticonvulsant profile of widely-used pharmaceutical and food preservative Propylparaben, Alan Talevi, Andrea Enrique, Anabella Gregorini, Eduardo A. Castro, Luis E. Bruno-Blanch.
- 2) Electronic structure study of 2-benzyl-3-methylquinoxaline 1,4 di N-oxide derivatives, P. R. Duchowicz, E. Vicente, M. G. Vitale, J. García, E. A. Castro.
- 3) New Yorkite: A tetragonal structure pattern in space group P4/mmm with anti-cube connection,
M. J. Bucknum, E. A. Castro.
- 4) On a gravitational energy analog to the matter wave-light hypothesis, M. J. Bucknum, E. A. Castro.

- 5) Recent progress on mathematical modeling of electrospinning of nanofibers. A detailed review, S. Maghsoodloo, S. Rafiei, Sh. Arbab, B. Noroozi, A K. Haghi, E. A. Castro.
- 6) El acoso psicológico en la vida organizacional, E. A. Castro.
- 7) La administración de medicamentos sin prescripción médica en la infancia, F. P. Maguna, N. B. Okulik, E. A. Castro.
- 8) QSAR model for predicting DPPH radical scavenging assay of synthesised molecules, A. G. Mercader, P. R. Duchowicz, E. A. Castro, A. B. Pomilio.
- 9) Exotic Carbon Allotropes, M. J. Bucknum, E. A. Castro.
- 11) Compressibility of α -Ca₃N₂ to 137 Kb, M. J. Bucknum, E. A. Castro.
- 12) Calcite lattice parameters in the PT-plane to 7.62 Kb and 533 °C, M. J. Bucknum, E. A. Castro.
- 13) Novel diverse anticonvulsant prototypes discovered through 2D virtual screening.