

CURRICULUM VITAE

DR. JAVIER CARMONA ESPÍNDOLA

DIRECCIÓN

Porfirio Díaz No. 18
Santa Martha Acatitla
Iztapalapa
Ciudad de México
Telefono: 70-42-12-43
Cel: 55-13-73-78-00
Email: jcarmona_26@yahoo.com.mx

DIPLOMA

Dr. Ciencias Químicas

CINVESTAV del I.P.N.

EDUCACIÓN

2006 - 2012	Graduado de Dr. en Ciencias Químicas del CINVESTAV unidad D.F.
1999 - 2003	Graduado de Ingeniero Químico Industrial de la Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas

TESIS

Teoría de la Densidad Auxiliar Perturbada Dependiente del Tiempo:
Método, Implementación y Aplicaciones

RECONOCIMIENTOS

- Miembro del Registro CONACYT de Evaluadores Acreditados (RCEA), en el Área 2. Biología y Química.
 - Miembro del Sistema Nacional de Investigadores (SNI) nivel I, en el Área 2. Biología y Química.
 - Mención Honorífica en el Certamen a la Mejor Tesis Doctoral en el área de Ciencia e Ingeniería de Materiales, Premio IIM-UNAM 2013.
-

Árbitro de revistas y libros

- Réferi de la Royal Society of Chemistry Advances.
 - Réferi de la revista: Journal of the Mexican Chemical Society.
-

PUBLICACIONES

- [1] J. Carmona-Espíndola, J. L. Gázquez, A. Vela, S. B. Trickey, **Improved correct asymptotic potential generalized-gradient approximation exchange functional with derivative discontinuity treatment**, *in preparation*.
- [2] P. Zerón, J. Carmona-Espíndola, M. M. Flores-Leonar, J. L. Gázquez, I. González, C. Amador-Bedolla, V. M. Ugalde-Saldivar, **TDDFT as a guide for chemical intermediates identification in the redox mechanism of the n3 dye**, *Chemical Science* submitted.
- [3] C. A. Polanco Ramírez, M. A. Franco Perez, J. Carmona-Espíndola, J. L. Gázquez, P. Ayers, **Revisiting the definition of local hardness and hardness kernel**, *Physical Chemistry Chemical Physics* 19 (2017) 12355–12364.
- [4] J. Carmona-Espíndola, J. L. Gázquez, A. Vela, S. B. Trickey, **Temperature effects in static and dynamic polarizabilities from distinct generalized gradient approximation exchange-correlation functionals**, *Chem. Phys. Lett.* 664 (2016) 77–82.

- [5] A. Piedras, B. Gómez, J. Carmona-Espíndola, R. Arroyo, J. L. Gázquez, **Intramolecular charge transfer model in fluorescence processes**, *Theoretical Chemistry Accounts* 135 (2016) 243.
- [6] J. Carmona-Espíndola, J. L. Gázquez, A. Vela, S. B. Trickey, **Global hybrid exchange energy functional with correct asymptotic behavior of the corresponding potential**, *Theoretical Chemistry Accounts* 135 (2016) 120.
- [7] J. Carmona-Espíndola, J. L. Gázquez, A. Vela, S. B. Trickey, **Generalized gradient approximation exchange energy functional with correct asymptotic behavior of the corresponding potential**, *J. Chem. Phys.* 142 (2015) 054105.
- [8] J. Carmona-Espíndola, A. M. Köster, **Photoabsorption spectra from time-dependent auxiliary density functional theory**, *Can. J. of Chem.* 91 (2013) 795–803.
- [9] P. Calaminici, J. Carmona-Espíndola, G. Geudtner, A. M. Köster, **Static and dynamic polarizability of c₅₄₀ fullerene**, *Int. J. Quantum Chem.* 112 (2012) 3252–3255.
- [10] J. Carmona-Espíndola, R. Flores-Moreno, A. M. Köster, **Static and dynamic first hyperpolarizabilities from time-dependent auxiliary density perturbation theory**, *Int. J. Quantum Chem.* 112 (2012) 3461–3471.
- [11] G. Geudtner, P. Calaminici, J. Carmona-Espíndola, J. M. del Campo, V. D. Dominguez-Soria, R. Flores-Moreno, G. U. Gamboa, A. Gourso, A. M. Köster, J. U. Reveles, T. Mineva, J. M. Vasquez-Perez, A. Vela, B. Zuñiga-Gutierrez, D. R. Salahub, **demon2k**, *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science* 2 (2012) 548–555.
- [12] R. Flores-Moreno, J. Carmona-Espíndola, A. M. Köster, **Calculation of hyperpolarizabilities with auxiliary density perturbation theory**, *AIP Conference Proceedings* 1642 (2015) 60–68.
- [13] J. Carmona-Espíndola, R. Flores-Moreno, A. M. Köster, **Time-dependent auxiliary density perturbation theory**, *J. Chem. Phys.* 133 (2010) 084102–084102–10.
- [14] S. V. Shedge, J. Carmona-Espíndola, S. Pal, A. M. Köster, **Comparison of the auxiliary density perturbation theory and the noniterative approximation to the coupled perturbed kohn-sham method: Case study of the polarizabilities of disubstituted azoarene molecules**, *J. Phys. Chem. A* 114 (2010) 2357–2364.

LIBROS

- Computational and Experimental Chemistry Developments and Applications, (Apple Academic Press, Waretown USA, 2014).

PLATICAS, SEMINARIOS & POSTERS

- Poster: CAPDD, FUNCIONAL GGA DE INTERCAMBIO Y CORRELACIÓN CON EL CORRECTO COMPORTAMIENTO ASINTOTICO EN EL POTENCIAL Y EFECTOS DE LA DISCONTINUIDAD EN LA DERIVADA.
Javier Carmona-Espíndola, José L. Gázquez, Alberto Vela and Sam Trickey.
DECIMO SEXTA REUNION MEXICANA DE FISICOQUIMICA TEORICA,
Noviembre 16-18, 2016, Puebla, México.
- Poster: Diseño de funcionales de energía cinética libres de orbitales.
Héctor Francisco, Javier Carmona-Espíndola and José L. Gázquez
DECIMO SEXTA REUNION MEXICANA DE FISICOQUIMICA TEORICA,
Noviembre 16-18, 2016, Puebla, México.
- Presentación: Exchange energy functionals in the Generalized Gradient Approximation
José L. Gázquez, Javier Carmona-Espíndola, Alberto Vela and Sam Trickey.
DFT Days V: Talks on Theoretical Chemistry,
Marzo 16-17, 2017, Santiago, Chile.
- Presentación: Analysis of GGA exchange energy functionals with correct asymptotic behavior of the corresponding potential
José L. Gázquez, Javier Carmona-Espíndola, Alberto Vela and Sam Trickey.
Sanibel Symposium,
Febrero 19-24, 2017, St. Simons Island, GA, USA.
- Presentación: Funcionales de intercambio del tipo GGA con el comportamiento asintótico correcto en el potencial.
Javier Carmona-Espíndola, José L. Gázquez, Alberto Vela and Sam Trickey.
DECIMO QUINTA REUNION MEXICANA DE FISICOQUIMICA TEORICA,
Noviembre 17-19, 2016, Mérida Yucatán, México.
- Poster: Diseño de un nuevo funcional para la energía cinética en la

aproximación de gradiente generalizado.

Héctor Francisco, Javier Carmona-Espíndola and José L. Gázquez
DECIMO QUINTA REUNION MEXICANA DE FISICOQUIMICA
TEORICA,
Noviembre 17-19, 2016, Mérida Yucatán, México.

- Poster: La dureza local en la teoría de funcionales de la densidad.
Carlos Augusto Polanco Ramírez, Marco Franco-Pérez,
Javier Carmona-Espíndola and José L. Gázquez
DECIMO QUINTA REUNION MEXICANA DE FISICOQUIMICA
TEORICA,
Noviembre 17-19, 2016, Mérida Yucatán, México.
- Presentación: Exchange energy functionals in the generalized
gradient approximation
José L. Gázquez, Javier Carmona-Espíndola, Alberto Vela and Sam Trickey.
Current Topics in Theoretical Chemistry Conference,
Septiembre 26-30, 2016, Trujillo, Peru.
- Poster: FUNCIONAL DE INTERCAMBIO DE TIPO GGA CON EL
COMPORTAMIENTO ASINTÓTICO CORRECTO EN EL POTENCIAL:
EFECTO DE LA TEMPERATURA EN EL CÁLCULO DE
POLARIZABILIDADES
Javier Carmona Espíndola, José L. Gázquez, A. Vela
and Sam B. Trickey
DECIMO CUARTA REUNION MEXICANA DE FISICOQUIMICA
TEORICA,
Noviembre 19-21, 2015, Guadalajara, México.
- Presentación: Exchange Energy Functionals With Correct Asymptotic
Behavior of The Corresponding Potential
José Luis Gázquez, J. Carmona Espíndola, Alberto Vela
and Sam B. Trickey
Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression CHITEL
Julio 26-31, 2015, Torino, Italia.
- Poster: FUNCIONAL DE INTERCAMBIO HIBRIDO GLOBAL CON EL
COMPORTAMIENTO ASINTTICO CORRECTO EN EL POTENCIAL
Asintótico Correcto en el Potencial
Javier Carmona Espíndola, José L. Gázquez, A. Vela
and Sam B. Trickey
DECIMO TERCERA REUNION MEXICANA DE FISICOQUIMICA

TEORICA,
Noviembre 5-8, 2014, Morelia, México.

- Presentación: An accurate exchange GGA functional with correct asymptotic behavior in its exchange potential
José Luis Gázquez, J. Carmona Espíndola, Alberto Vela
and Sam B. Trickey
10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemist, WATOC.
Octubre 5-10, 2014, Santiago, Chile.
- Presentación: GGA exchange with correct asymptotic behavior of its potential
Alberto Vela, J. Carmona Espíndola, José Luis Gázquez,
and Sam B. Trickey
14th *deMon* DEVELOPERS WORKSHOP
Abril 27-30, 2014, Los Cabos, Baja California, México.
- Presentación: Funcional de Intercambio GGA con el Comportamiento Asintótico Correcto en el Potencial
Javier Carmona Espíndola, José L. Gázquez, A. Vela
DUODÉCIMA REUNION MEXICANA DE FISICOQUIMICA TEORICA,
Noviembre 14-16, 2013, Queretaro, México.
- Poster: TDADPT aplicada al cálculo de espectros de Fotoabsorción
Javier Carmona Espíndola, Andreas M. Köster
UNDECIMA REUNION MEXICANA DE FISICOQUIMICA TEORICA,
Noviembre 8-10, 2012, Toluca, México.
- Presentación: First-Principle Calculations of Structure, Binding Energy and Polarizability of Fullerenes
Javier Carmona Espíndola, Patrizia Calaminici, Gerald Geudtner,
Andreas M. Köster
NOVENA REUNION MEXICANA DE FISICOQUIMICA TEORICA,
Noviembre 11-13, 2010, Pachuca Hidalgo, México.
- Poster: First-Principle Calculations of Structure, Binding Energy and Polarizability of Fullerenes
P. Calaminici, G. Geudtner, J. Carmona-Espíndola, A. M. Köster
CECAM, Approximate Quantum-Methods:

Advances, Challenges and Perspectives
September 20-24, 2010, University of Bremen, Germany.

- Presentación: Dynamic Polarizabilities and Hyperpolarizabilities
Javier Carmona Espíndola, Roberto Flores Moreno, Andreas M. Köster
10th *deMon* DEVELOPERS WORKSHOP
Mayo , 2010, Belo Horizonte, Brazil.
- Poster: Hiperpolarizabilidades Dinamicas en el Contexto de TDADPT
Javier Carmona Espíndola, Andreas M. Köster, Roberto Flores-Moreno
OCTAVA REUNION MEXICANA DE FISICOQUIMICA TEORICA,
Noviembre 12-14, 2009, Colima, México.
- Poster: First-Principle Calculations of Structure, Binding
Energy and Polarizability of Fullerenes
Andreas M. Köster, Javier Carmona Espíndola, Patrizia Calaminici,
Gerald Geudtner
DFT 2009
September, 2009, Lyon, France.
- Presentación: Polarizabilities from Auxiliary Density Perturbation Theory
Javier Carmona Espíndola
9th *deMon* DEVELOPERS WORKSHOP
Febrero 16-19, 2009, Pune, India.
- Poster: Polarizabilidades Estaticas Y Dinamicas en el contexto de ADPT
Javier Carmona Espíndola, Andreas M. Köster
JOVENES EN LA INVESTIGACION QUIMICA
Noviembre 19-21, 2008, CINVESTAV D.F., México.
- Presentación: Static and Dynamic Polarizabilities in the framework of
Auxiliary Density Perturbation Theory
Javier Carmona Espíndola
SEPTIMA REUNION MEXICANA DE FISICOQUIMICA TEORICA,
Noviembre 13-15, 2008, Veracruz, México.
- Poster: Kernel Numérico de Intercambio y Correlación
Javier Carmona Espíndola, Andreas M. Köster
SEXTA REUNION MEXICANA DE FISICOQUIMICA TEORICA,
Noviembre 14-16, 2007, Hidalgo, México.

EXPERIENCIA LABORAL

01/10/2016 - presente	Cátedra CONACyT UAMI, Transferencia electrónica en fotocátalisis y fotoelectrocátalisis
01/08/2012 - 31/08/2016	Postdoctorado, UAM-Iztapalapa, Desarrollo de funcionales para la Teoría de Funcionales de la Densidad.
01/03/2012 - 31/07/2012	Postdoctorado, UAM-Iztapalapa, Programación en GPUs.

IDIOMAS

Español (lenguaje materno)
Ingles (95 %)

EXPERIENCIA COMPUTACIONAL

- Manejo de fortran, C, CUDA, paralelizacion de alto rendimiento en MPI.
 - Alta experiencia en varios sistemas operativos (Windows, Fedora, Centos, Debian).
 - Desarrollo de los programas deMon, nwChem, mexica.
 - Contribuciones al software deMon2k:
A.M. Koster, G. Geudtner, P. Calaminici, M.E. Casida,
J. Carmona-Espindola, V.D. Dominguez, R. Flores-Moreno,
G.U. Gamboa, A. Goursot, T. Heine, A. Ipatov, F. Janetzko,
J.M. del Campo, J.U. Reveles, J.M. Vasquez-Perez, A. Vela,
B. Zuniga-Gutierrez and D.R. Salahub.
-