

Junio 2013

José Luis Gázquez Mateos

Currículum Vitae

Profesor Distinguido

Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa
División de Ciencias Básicas e Ingeniería
Departamento de Química, Área de Físicoquímica Teórica

Investigador Nacional Nivel 3 (Nombramiento vigente hasta el 2016)

Especialidad: Físicoquímica Teórica

Datos generales:

Fecha de nacimiento: 7 de diciembre de 1948
Lugar de nacimiento: México D. F.
Nacionalidad: Mexicana

Domicilio trabajo:
San Rafael Atlixco 186
Col. Vicentina, Iztapalapa
09340, México D. F.
Teléfono – 58 04 64 17
Correo electrónico: jlgm@xanum.uam.mx

| Estudios | Institución | Fecha |
|---|---|--------------|
| Ingeniería Química | Facultad de Química UNAM | 1967 – 1971 |
| Maestría en Química (Master of Arts) | The Johns Hopkins University Baltimore, Maryland, E.U.A. | 1971 – 1973 |
| Doctorado en Química (Philosophy Doctor) | The Johns Hopkins University Baltimore, Maryland, E.U.A. | 1973 – 1976 |

Experiencia Profesional

1. Profesor de tiempo completo en el Departamento de Química Teórica de la División de Estudios de Posgrado de la Facultad de Química de la UNAM (de septiembre de 1976 a septiembre de 1982).
2. Profesor de tiempo completo en el Área de Físicoquímica Teórica del Departamento de Química de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería de la UAM-Iztapalapa (de septiembre de 1982 a diciembre de 2001 y de junio de 2005 a la fecha).
3. Jefe del Área de Química Cuántica del Departamento de Química de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería de la UAM-Iztapalapa (de septiembre de 1983 a noviembre de 1985).
4. Asesor de la Compañía W. R. Grace, Research Division, Maryland, E.U.A. (de febrero de 1983 a diciembre de 1986).
5. Jefe del Departamento de Química de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería de la UAM-Iztapalapa (de noviembre de 1985 a octubre de 1989).
6. Director de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería de la UAM-Iztapalapa (de mayo de 1990 a abril de 1994).
7. Rector de la Unidad Iztapalapa de la Universidad Autónoma Metropolitana (de mayo de 1994 a noviembre de 1997).
8. Rector General de la Universidad Autónoma Metropolitana (de diciembre de 1997 a noviembre de 2001).
9. Coordinador Académico de Posgrado, Instituto Mexicano del Petróleo (de enero de 2002 a noviembre de 2002).
10. Director Ejecutivo de Investigación y Posgrado, Instituto Mexicano del Petróleo (de diciembre de 2002 a mayo de 2005).

Distinciones

- Premio Scopus 2007 de la Editorial Elsevier en el área de química.

Este premio se otorgó, por primera vez, a siete científicos mexicanos de diferentes áreas por el reconocimiento a nivel internacional de sus trabajos de investigación, medido a través del número de citas.

- Premio Nacional de Química Andrés Manuel Del Río 2008 en el área de investigación

Este premio lo otorga la Sociedad Química de México desde 1964, con la finalidad de hacer un reconocimiento público nacional a la labor realizada por profesionales de la química que han contribuido de manera extraordinaria a elevar la calidad y el prestigio de la profesión.

- Profesor Distinguido de la Universidad Autónoma Metropolitana

Este nombramiento lo otorga el Colegio Académico de la Universidad Autónoma Metropolitana por sobresalir especialmente en el desempeño de las funciones académicas.

Experiencia Docente

A lo largo de más de 30 años ha impartido en numerosas ocasiones, a nivel licenciatura y a nivel posgrado, cursos relacionados con temas de:

Fisicoquímica general
Termodinámica estadística
Cinética química
Química cuántica
Espectroscopia
Enlace químico
Reactividad química

• Tesis dirigidas de Licenciatura

1. Estudio Comparativo entre diferentes modelos de intercambio estadístico.

María Elba Ortiz Romero-Vargas

Título: Químico

Facultad de Química, UNAM, 1978.

2. Modelos estadísticos aplicados a átomos y moléculas.

Eduardo Antonio Hernández Pérez

Título: Ingeniero Químico

Facultad de Química, UNAM, 1980.

3. Análisis de un modelo relativista simple para cálculos atómicos y moleculares.

Arturo Joaquín Aguilar Ancona

Título: Químico

Facultad de Química, UNAM, 1981.

4. Teoría de funcionales locales de la densidad.

Juvencio Robles García

Título: Químico

Facultad de Química, UNAM, 1981.

• Tesis dirigidas de Maestría

1. Cálculo de energías atómicas a través del desarrollo Z^{-1} .

María Elba Ortiz Romero-Vargas

Título: Maestría en Química, especialidad Fisicoquímica

Facultad de Química, UNAM, 1983.

2. Electronegatividad y dureza de átomos en el método de Kohn-Sham.

Juvencio Robles García

Título: Maestría en Química, especialidad Fisicoquímica

Facultad de Química, UNAM, 1984.

3. Desarrollo de un funcional no local de intercambio a partir de la densidad de energía cinética de un sistema de partículas no interactuantes.

Miguel Ángel Morales Cortés

Título: Maestría en Química

División de Ciencias Básicas e Ingeniería, UAM-Iztapalapa, 1989.

4. Construcción de un funcional de intercambio a través de una aproximación a la matriz de densidad de primer orden.

José Andrés Cedillo Ortíz

Título: Maestría en Física

División de Ciencias Básicas e Ingeniería, UAM-Iztapalapa, 1989.

• **Tesis dirigidas de Doctorado**

1. Reactividad química: El punto de vista de la teoría de funcionales de la densidad.

Marcelo Enrique Galván Espinosa

Título: Doctor en Ciencias

División de Ciencias Básicas e Ingeniería, UAM-Iztapalapa, 1988.

2. Coeficientes de respuesta independientes del tiempo en átomos y moléculas.

Alberto Marcial Vela Amieva

Título: Doctor en Ciencias

División de Ciencias Básicas e Ingeniería, UAM-Iztapalapa, 1988.

Premio Weizmann a la mejor tesis doctoral en el Área de Ciencias Naturales y Exactas de la Academia Mexicana de Ciencias (1990).

3. Criterios globales de reactividad química en la teoría de funcionales de la densidad.

María Elba Ortíz Romero-Vargas

Título: Doctor en Ciencias

División de Ciencias Básicas e Ingeniería, UAM-Iztapalapa, 1990.

4. Reactividad química y el principio local de ácidos y bases duros y blandos.

Francisco Méndez Ruíz

Título: Doctor en Ciencias

División de Ciencias Básicas e Ingeniería, UAM-Iztapalapa, 1993.

5. Transformaciones de Legendre en la teoría de funcionales de la densidad.

José Andrés Cedillo Ortíz

Título: Doctor en Ciencias

División de Ciencias Básicas e Ingeniería, UAM-Iztapalapa, 1994.

6. Estudio teórico de la reactividad de cúmulos metálicos.

Ana María Martínez Vázquez

Título: Doctor en Ciencias

División de Ciencias Básicas e Ingeniería, UAM-Iztapalapa, 1995.

Premio del Instituto de Investigación en Materiales a la mejor tesis doctoral (1996).

Publicaciones

Artículos de Investigación (1 - 59)

1. Piecewise Polynomial Electronic Wavefunctions
J. L. Gázquez y H. J. Silverstone
Journal of Chemical Physics 67, 1887-1898 (1977).
Citado por otros autores 54 veces.
2. Electron-Gas Exchange for Atoms
J. L. Gázquez y J. Keller
Physical Review A 16, 1358-1362 (1977).
Citado por otros autores 31 veces.
3. 2-Parameter Statistical-Model for Atoms
J. L. Gázquez y R. G. Parr
Journal of Chemical Physics 68, 2323-2326 (1978).
Citado por otros autores 18 veces.
4. Simple Electrostatic Models for Vibrating Unsymmetrical Triatomic-Molecules and Triatomic Ions
J. L. Gázquez, N. K. Ray y R. G. Parr
Theoretica Chimica Acta 49, 1-11 (1978).
Citado por otros autores 7 veces.
5. Electron Gas Model for Inhomogeneous Systems
J. L. Gázquez, E. Ortíz y J. Keller
International Journal of Quantum Chemistry S13, 377-385 (1979).
Citado por otros autores 8 veces.
6. Space Partitioning in Multiple-Scattering Techniques .1. Hydrogen Molecular Ion and Hydrogen Molecule
A. Garritz, J. L. Gázquez, M. Castro y J. Keller
International Journal of Quantum Chemistry 15, 731-744 (1979).
Citado por otros autores 3 veces.
7. Universal Dissociation-Energy Relationships for Diatomic-Molecules
J. L. Gázquez y R. G. Parr
Chemical Physics Letters 66, 419-422 (1979).
Citado por otros autores 6 veces.
8. Self-Consistent-Field Electron-Gas Local-Spin-Density Model Including Correlation for Atoms
J. Keller y J. L. Gázquez
Physical Review A 20, 1289-1291 (1979).
Citado por otros autores 20 veces.
9. Local Electron-Electron Energy Density Functionals
J. L. Gázquez y J. Robles
Journal of Chemical Physics 74, 5927-5928 (1981).
Citado por otros autores 7 veces.
10. Self-Interaction and Interelectronic Exchange in the Electron-Gas Model for Atoms
J. L. Gázquez y E. Ortíz

- Chemical Physics Letters 77, 186-189 (1981).
Citado por otros autores 2 veces.
11. The Weizsacker Term in Density Functional Theory
J. L. Gázquez y E. V. Ludeña
Chemical Physics Letters 83, 145-148 (1981).
Citado por otros autores 28 veces.
 12. Charge-Transfer Complex Between Maleic-Anhydride and Pyridine
J. A. Chamizo, G. Mendoza-Díaz y J. L. Gázquez
Polymer 22, 129-131 (1981).
Citado por otros autores 1 vez.
 13. Statistical Atomic Models with Minimal-Basis-Set-Type Electron-Densities
E. Hernández y J. L. Gázquez
Physical Review A 25, 107-112 (1982).
Citado por otros autores 9 veces.
 14. On the Atomic Kinetic-Energy Functionals with Full Weizsacker Correction
J. L. Gázquez y J. Robles
Journal of Chemical Physics 76, 1467-1472 (1982).
Citado por otros autores 66 veces.
 15. Approximate Relativistic Calculations Within the One-Center Approximation for the Series
Ch₄ to PbH₄
A. Aguilar-Ancona, J. L. Gázquez y J. Keller
Chemical Physics Letters 96, 200-203 (1983).
Citado por otros autores 6 veces.
 16. Electron-Gas Models and Density Functional Theory
J. L. Gázquez
En Density Functional Theory, Editado por J. Keller y J. L. Gázquez, Lecture Notes in
Physics 187, p. 229-258 (Springer-Verlag, Berlin, 1983).
Citado por otros autores 5 veces.
El libro ha sido citado en forma genérica por autores
que no participaron en él 40 veces.
 17. Electronegativities and Hardnesses of Open-Shell Atoms
J. L. Gázquez y E. Ortíz
Journal of Chemical Physics 81, 2741-2748 (1984).
Citado por otros autores 63 veces.
 18. Simulated Transition-State for the Hartree-Fock and Hartree-Fock-Slater Methods
J. L. Gázquez, E. Ortíz y J. Robles
Chemical Physics Letters 109, 394-397 (1984).
 19. Z-1 Perturbation Expansion and the Leading Correction to the Thomas-Fermi Energy
E. Ortíz y J. L. Gázquez
Physical Review A 31, 3489-3491 (1985).
Citado por otros autores 2 veces.
 20. Thomas-Fermi Limit and Leading Corrections for Atoms and Ions
J. L. Gázquez y E. Ortíz
Journal of Chemical Physics 82, 5565-5570 (1985).
Citado por otros autores 3 veces.

21. Interatomic Interactions in Density Functional Theory
A. Vela, A. Cedillo y J. L. Gázquez
International Journal of Quantum Chemistry 29, 937-948 (1986).
Citado por otros autores 1 vez.
22. Behavior of the Chemical-Potential of Neutral Atoms in the Limit of Large Nuclear-Charge
J. L. Gázquez, A. Vela y M. Galván
Physical Review Letters 56, 2606-2609 (1986).
Citado por otros autores 6 veces.
23. Fukui Function - Spin-Density and Chemical-Reactivity
M. Galván, J. L. Gázquez y A. Vela
Journal of Chemical Physics 85, 2337-2338 (1986).
Citado por otros autores 10 veces.
24. Gradient Expansion of the Exchange Energy from An Approximate Density-Potential Relation
M. Galván y J. L. Gázquez
Journal of Chemical Physics 85, 4203-4204 (1986).
Citado por otros autores 1 vez.
25. An Exchange Energy Functional Based on the Dirac and the Fermi-Amaldi Approximations
A. Cedillo, E. Ortíz, J. L. Gázquez y J. Robles
Journal of Chemical Physics 85, 7188-7192 (1986).
Citado por otros autores 3 veces.
26. Oxygen Vacancy Model in Strong Metal Support Interaction
M. G. Sanchez y J. L. Gázquez
Journal of Catalysis 104, 120-135 (1987).
Citado por otros autores 176 veces.
27. Fukui Function, Electronegativity and Hardness in the Kohn-Sham Theory
J. L. Gázquez, A. Vela y M. Galván
En Electronegativity, Editado por K. D. Sen y C. K. Jorgensen, Structure and Bonding 66, p. 79-97 (Springer-Verlag, Berlin, 1987).
Citado por otros autores 50 veces.
El libro ha sido citado en forma genérica por autores que no participaron en él 184 veces.
28. Atoms and ions in the limit of large nuclear charge
J. L. Gázquez, M. Galván, E. Ortíz y A. Vela
En Density Matrices and Density Functionals, Editado por R. M. Ehrdal y V. H. Smith, p. 643-662 (Reidel Publishing Company, Dordrecht, Holland, 1987).
Citado por otros autores 2 veces.
29. Binding-Energies of Atoms and Ions - the Z-1 Perturbation Expansion and the Thomas-Fermi Limit
J. L. Gázquez y A. Vela
Physical Review A 38, 3264-3270 (1988).
Citado por otros autores 2 veces.
30. Extended Huckel Parameters from Density Functional Theory
A. Vela y J. L. Gázquez
Journal of Physical Chemistry 92, 5688-5693 (1988).
Citado por otros autores 100 veces.

31. Chemical-Reactivity in Spin-Polarized Density Functional Theory
M. Galván, A. Vela y J. L. Gázquez
Journal of Physical Chemistry 92, 6470-6474 (1988).
Citado por otros autores 66 veces.
32. On the Oscillatory Behavior of the Chemical-Potential of Neutral Atoms
A. Vela, M. Galván y J. L. Gázquez
International Journal of Quantum Chemistry, 329-335 (1988).
Citado por otros autores 3 veces.
33. New Nonlocal Exchange-Energy Functional from A Kinetic-Energy-Density Pade-
Approximant Model
A. Cedillo, J. Robles y J. L. Gázquez
Physical Review A 38, 1697-1701 (1988).
Citado por otros autores 12 veces.
34. A New Approach to 2Nd Order Corrections Based on Density Functional Theory
J. L. Gázquez y A. Vela
International Journal of Quantum Chemistry, 71-76 (1988).
Citado por otros autores 6 veces.
35. Static response functions in density functional theory
J. L. Gázquez, A. Cedillo y A. Vela
Condensed Matter Theories 4, 163-167 (1989).
Citado por otros autores 1 vez.
36. A Relationship Between the Static Dipole Polarizability, the Global Softness, and the Fukui
Function
A. Vela y J. L. Gázquez
Journal of the American Chemical Society 112, 1490-1492 (1990).
Citado por otros autores 104 veces.
37. Chemical-Reactivity in Density Functional Theory - the N-Differentiability Problem
J. L. Gázquez, M. Galván y A. Vela
Theochem-Journal of Molecular Structure 69, 29-38 (1990).
Citado por otros autores 7 veces.
38. Structural phase transitions in cesium halides
A. Cedillo, A. Vela y J. L. Gázquez
En Density Functional Methods in Chemistry, Editado por J. K. Labanowski y J. W.
Andzelm, p. 293-306 (Springer-Verlag, New York, 1991).
Citado por otros autores 1 vez.
39. Local Softness and Chemical-Reactivity of Maleimide - Nucleophilic-Addition
F. Méndez, M. Galván, A. Garritz, A. Vela y J. L. Gázquez
Theochem-Journal of Molecular Structure 96, 81-86 (1992).
Citado por otros autores 29 veces.
40. Hardness and softness in density functional theory
J. L. Gázquez
En Chemical Hardness, Editado por K. D. Sen y D. M. P. Mingos, Structure and Bonding
80, p. 27-43 (Springer-Verlag, Berlin, 1993).
Citado por otros autores 81 veces.
El libro ha sido citado en forma genérica por autores
que no participaron en él 103 veces.

41. Relationship Between Energy and Hardness Differences
J. L. Gázquez, A. Martínez y F. Méndez
Journal of Physical Chemistry 97, 4059-4063 (1993).
Citado por otros autores 83 veces.
42. Hardness Functional
R. G. Parr y J. L. Gázquez
Journal of Physical Chemistry 97, 3939-3940 (1993).
Citado por otros autores 72 veces.
43. The Fukui Function of An Atom in A Molecule - A Criterion to Characterize the Reactive Sites of Chemical-Species
F. Méndez y J. L. Gázquez
Proceedings of the Indian Academy of Sciences-Chemical Sciences 106, 183-193 (1994).
Citado por otros autores 28 veces.
44. The Hard and Soft Acids and Bases Principle - An Atoms in Molecules Viewpoint
J. L. Gázquez y F. Méndez
Journal of Physical Chemistry 98, 4591-4593 (1994).
Citado por otros autores 182 veces.
45. Chemical-Reactivity of Enolate Ions - the Local Hard and Soft Acids and Bases Principle Viewpoint
F. Méndez y J. L. Gázquez
Journal of the American Chemical Society 116, 9298-9301 (1994).
Citado por otros autores 125 veces.
46. On the conjoint gradient correction to the Hartree-Fock kinetic and exchange energy density functionals
J. L. Gázquez y J. Robles
International Journal of Quantum Chemistry 57, 3-6 (1996).
Citado por otros autores 1 vez.
47. The hard and soft acids and bases principle
J. L. Gázquez
Journal of Physical Chemistry A 101, 4657-4659 (1997).
Citado por otros autores 23 veces.
48. Bond energies and hardness differences
J. L. Gázquez
Journal of Physical Chemistry A 101, 9464-9469 (1997).
Citado por otros autores 34 veces.
49. Activation energies and softness additivity
J. L. Gázquez
Journal of Physical Chemistry A 101, 8967-8969 (1997).
Citado por otros autores 16 veces.
50. A hardness and softness theory of bond energies and chemical reactivity
J. L. Gázquez
En Theoretical Organic Chemistry, Editado por C. Párkányi, Theoretical and Computational Chemistry Series 5, p. 135-152 (Elsevier, Amsterdam, 1998).
Citado por otros autores 6 veces.
51. Chemical reactivity of hypervalent silicon compounds: The local hard and soft acids and bases principle viewpoint

- F. Méndez, M. D. Romero y J. L. Gázquez
Journal of Chemical Sciences 117, 525-531 (2005).
Citado por otros autores 5 veces.
52. Molecular fragments in density functional theory
J. L. Gázquez, A. Cedillo, B. Gomez y A. Vela
Journal of Physical Chemistry A 110, 4535-4537 (2006).
Citado por otros autores 7 veces.
53. A Quantum Chemical Study of the Inhibitive Properties of 2-Pyridyl-Azoles
B. Gómez, N. V. Likhanova, M. A. Domínguez-Aguilar, R. Martínez-Palou, A. Vela y J. L. Gázquez
Journal of Physical Chemistry B 110, 8928-8934 (2006).
Citado por otros autores 33 veces.
54. Electrodonating and electroaccepting powers
J. L. Gázquez, A. Cedillo y A. Vela
Journal of Physical Chemistry A 111, 1966-1970 (2007).
Citado por otros autores 35 veces.
55. Chemical hardness and the discontinuity of the Kohn-Sham exchange-correlation potential
J. L. Gázquez, J. Garza, F. D. Hinojosa y A. Vela
Journal of Chemical Physics 126, 214105-1-214105-8 (2007).
Citado por otros autores 2 veces.
56. Perspectives on the Density Functional Theory of Chemical Reactivity
J. L. Gázquez
Journal of the Mexican Chemical Society 52, 3-10 (2008).
Citado por otros autores 40 veces.
57. Chemical reactivity concepts in density functional theory
J. L. Gázquez
En Chemical Reactivity Theory: A Density Functional View, Editado por P. K. Chattaraj, p. 7-22 (CRC Press, Boca Ratón, 2009).
58. Simple charge transfer model for one electron oxidation and reduction processes:
Describing reactive sites in benzocarbazolediones and gallates
A. Vázquez-Mayagoitia, J. Garza, R. Vargas, C. Frontana, M. Gómez, I. González y J. L. Gázquez
Journal of Molecular Structure-Theochem 943, 59-64 (2010).
59. Simple Charge Transfer Model for Metallic Complexes
J. Z. Ramírez-Ramírez, R. Vargas, J. Garza y J. L. Gázquez
Journal of Physical Chemistry A 114, 7945-7951 (2010).
Citado por otros autores 2 veces.
60. Non-empirical improvement of PBE and its hybrid PBE0 for general description of molecular properties
Jorge M. del Campo, José L. Gázquez, S. B. Trickey y Alberto Vela
Journal of Chemical Physics 136, 104108 (2012).
Citado por otros autores 2 veces.
61. Improved constraint satisfaction in a simple generalized gradient approximation exchange functional
Alberto Vela, Juan C. Pacheco-Kato, José L. Gázquez, Jorge M. del Campo y S. B. Trickey
Journal of Chemical Physics 136, 144115 (2012).
-

62. A new meta-GGA exchange functional based on an improved constraint-based GGA
Jorge M. del Campo, José L. Gázquez, S. B. Trickey y Alberto Vela
Chemical Physics Letters 543, 179-183 (2012).
63. The Reduced Density Gradient in Atoms
Jorge M. del Campo, José L. Gázquez, Rodrigo J. Alvarez-Mendez y Alberto Vela
International Journal of Quantum Chemistry 112, 3594-3598 (2012).
64. Analysis of the generalized gradient approximation for the exchange energy
José L. Gázquez, Jorge M. del Campo, S. B. Trickey, Rodrigo J. Alvarez-Mendez, and
Alberto Vela
En Concepts and Methods in Modern Theoretical Chemistry, Vol. 1, Editado por S.K.
Ghosh and P.K. Chattaraj, 295-311 (CRC Press, Boca Ratón, 2013).
65. Local hardness equalization and the principle of maximum hardness
José L. Gázquez, Alberto Vela y Pratim K. Chattaraj
Journal of Chemical Physics, en prensa (2013).

Número total de citas al conjunto de trabajos anteriores 2,023 (excluyendo autocitas y citas de los coautores, hasta agosto de 2012)

Otras publicaciones

1. Density functional theory: Chemical reactivity and electronic structure.
J. L. Gázquez
KINAM 8, 137-151 (1987).
2. Response functions for atoms, molecules, and solids within density functional theory.
A. Vela y J. L. Gázquez
Lectures on Thermodynamics and Statistical Mechanics. XIX Winter Meeting on Statistical Physics.
Eds. M. López y C. Varea, World Scientific, Singapore, págs.107-125 (1990).
3. Chemical reactivity in the framework of density functional theory.
J. L. Gázquez
American Institute of Physics, Conference Proceedings 342
CAM-94 Physics Meeting, Cancún, México 1994
Editor: A. Zepeda, págs. 140-146 (1995).
4. An Exchange-correlation potential with built-in discontinuity and correct long range behavior
J. L. Gázquez, J. Garza, R. Vargas y A. Vela
American Institute of Physics, Conference Proceedings 979
Recent Developments in Physical Chemistry
3rd Mexican Meeting on Mathematical and Experimental Physics
Editores: E. Díaz-Herrera y E. Juaristi, págs. 11-20 (2008).

Material de apoyo a la docencia

1. I. La interacción radiación-materia: Probabilidades de transición y coeficientes de Einstein. II. Vibraciones en moléculas diatómicas.
J. L. Gázquez
I Escuela de Espectroscopia, Facultad de Química, UNAM, págs. 1-67 (1978).
2. Elementos de estructura y espectros de átomos polielectrónicos.
J. L. Gázquez
II Escuela de Espectroscopia, Facultad de Química, UNAM, págs. 1-143 (1979).
3. Modelos de gas de electrones en sistemas inhomogéneos.
J. L. Gázquez y E. Hernández
Seminario Latinoamericano de Química Cuántica, Ed. J. Keller, págs. 255-337 (1980).

Trabajos de divulgación

1. Al rescate de la electronegatividad
J. L. Gázquez
Contactos 1, 50-54 (1984).
2. Química Teórica
J. L. Gázquez, M. Galván y A. Vela
Cosmos: Enciclopedia de las ciencias y la tecnología en México. Tomo IV: Química
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, págs. 179-203 (2009).

Libros

1. Problemas resueltos de Fisicoquímica de Castellan.

A. Garritz, M. Costas y J. L. Gázquez

Fondo Educativo Interamericano, 543 págs. (1981).

2. Density functional theory.

Eds. J. Keller y J. L. Gázquez

Lecture Notes in Physics, Vol. 187, Springer-Verlag, Berlín, 301 págs. (1983).

Conferencias Plenarias (Por invitación)

1. Electron gas model for molecules containing heavy atoms.
Second Chemical Congress of the North American Continent
Las Vegas, E.U.A., 1980.
2. Electron gas exchange for atoms.
International Workshop on Density Functional Theory
México, México, 1980.
3. Teoría de funcionales de la densidad.
XIX Congreso de la Sociedad Química de México
Irapuato, México, 1984.
4. Teoría de funcionales de la densidad: Reactividad y estructura electrónica.
XVI Reunión de invierno de Física Estadística
Oaxtepec, México, 1987.
5. Binding energies of atoms and ions: The Z^{-1} perturbation expansion and the Thomas-Fermi limit.
International Symposium on Atomic, Molecular, and Solid State Physics, Sanibel Symposia
Marineland, E.U.A., 1988.
6. Análisis teórico del modelo de vacancias de oxígeno en la interacción metal-soporte.
XI Simposio Iberoamericano de Catálisis
Guanajuato, México, 1988.
7. Second-order perturbation theory: A density functional approach.
XII International Workshop on Condensed Matter Theories
Taxco, México, 1988.
8. Reactividad química: El punto de vista de la teoría de funcionales de la densidad.
XVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina
La Plata, Argentina, 1989.
9. Conceptos clásicos en la descripción de reactividad química.
VIII Coloquio de la Academia Mexicana de Química Inorgánica
México, México, 1990.
10. Descripción de átomos en moléculas.
IV Simposio de Estudiantes de Posgrado en Química Fernando Romo.
Zacatecas, México, 1990.
11. The hard and soft acids and bases principle: An atoms in molecules viewpoint.
Thirty Years of Density Functional Theory: Concepts and Applications
Cracovia, Polonia, 1994.
12. Hardness, softness, and chemical reactivity.
CAM 94 Physics Meeting
Cancún, México, 1994.
13. El principio de ácidos y bases duros y blandos.
XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina
Pucón, Chile, 1995.

14. A hardness and softness theory of bond and activation energies
Symposium on Density Functional Theory and applications
Durham, E.U.A., 1997.
15. Density functional theory concepts of chemical reactivity
Chemical Congress of North America
Cancún, México, 1997.
16. Chemical reactions: The hardness and softness viewpoint
Chemical Congress of North America
Cancún, México, 1997.
17. Dureza y blandura: Dos conceptos fundamentales en la descripción de la reactividad química
XXIV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina
Puebla, México, 1998.
18. Reactividad química
Materia 2001
México, México, 2001.
19. Teoría de funcionales de la densidad: Reactividad química y catálisis
IX Congreso Mexicano de Catálisis
Tampico, México, 2005.
20. Potencias electrodonadora y electroaceptora
XLI Congreso Mexicano de Química
México, D. F., México, 2006.
21. Reactividad Química en la Teoría de Funcionales de la Densidad
XLIII Congreso Mexicano de Química
Tijuana, B. C., México, 2008.
22. An Analysis of the Chemical Reactivity Concepts of Density Functional Theory
92nd Canadian Chemistry Conference
Atoms in Molecules Symposium
Hamilton, Ontario, Canadá, 2009.
23. Los conceptos de reactividad química de la teoría de funcionales de la densidad: ¿dónde están?, ¿dónde estarán?
Química Teórica en el Siglo XXI
México, D. F., México, 2011.
24. Non-empirical hybrids based on PBE exchange-correlation
XXXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina.
Riviera Maya, Quintana Roo, México, 2011.
25. La teoría de funcionales de la densidad en el desarrollo de la química
30° Congreso Latinoamericano de Química y 47° Congreso Mexicano de Química
Cancún, Quintana Roo, México, 2012.

26 trabajos presentados en eventos internacionales

59 trabajos presentados en eventos nacionales

Otras Actividades

- Miembro de la Comisión Dictaminadora del Departamento de Física de la Facultad de Estudios Superiores-Cuautitlán, 1979-1980.
- Miembro de la Comisión Dictaminadora del Departamento de Química de la Facultad de Estudios Superiores-Cuautitlán, 1981-1982.
- Miembro de la Academia Mexicana de Ciencias desde 1984.
- Vocal del Comité Ejecutivo Nacional de la Sociedad Química de México, 1986-1989.
- Miembro del Comité de Química de la Dirección Adjunta de Formación de Recursos Humanos del CONACYT, de 1986 a 1990.
- Coordinador del Comité de Química de la Dirección Adjunta de Desarrollo Científico del CONACYT, de 1989 a 1990.
- Organizador de la reunión Fronteras de Investigación en Química e Ingeniería Química, auspiciado por La Academia de la Investigación Científica y la National Academy of Sciences de los E.U.A., 22-25 mayo, Tequesquitengo, Morelos, 1989.
- Miembro del Comité de Ciencias Exactas del CONACYT 1991-1993.
- Miembro del Subcomité de Física Atómica y Molecular de la Comisión Dictaminadora del Área I del Sistema Nacional de Investigadores (1996).
- Miembro del Comité del CONACYT para la evaluación del Programa de Apoyo a la Ciencia en México (1997).
- Miembro de la Junta de Gobierno del Centro de Investigación y Estudios Superiores de Ensenada (2001-2005).
- Presidente del Consejo Nacional de la Enseñanza y del Ejercicio Profesional de las Ciencias Químicas (2001-2011).
- Tesorero de la Academia Mexicana de Ciencias (2002-2004).
- Miembro de la Comisión Dictaminadora del Instituto de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México (2004-2010).
- Responsable del Laboratorio Nacional "Delta Metropolitana de Cómputo de Alto Rendimiento" del CONACYT, que enlaza los centros de supercómputo de la UNAM, el Cinvestav y la UAM (2007 a la fecha).