



Sistema Integral de Información Académica

Coordinación de Planeación, Evaluación y Simplificación de la Gestión Institucional

Reporte individual



TOMAS ROCHA RINZA

Datos Generales

Nombre: TOMAS ROCHA RINZA

Máximo nivel de estudios: DOCTORADO

Antigüedad académica en la UNAM: 16 años

Nombramientos

Vigente: INVESTIGADOR TITULAR C TC Definitivo

Instituto de Química

Desde 01-08-2024

Estímulos, programas, premios y reconocimientos

SNI III 2023 – VIGENTE

SNI II 2019 – 2022

SNI I 2012 – 2018

SNI C 2010 – 2011

PRIDE D 2021 – 2024

PRIDE C 2016 – 2021

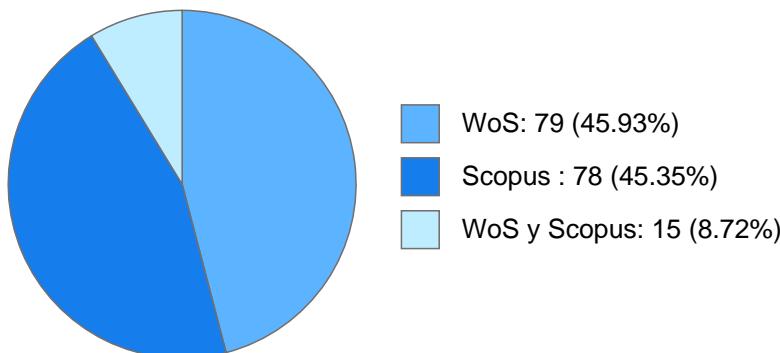
PRIDE B 2011 – 2016

Reporte individual

TOMAS ROCHA RINZA

DOCUMENTOS EN REVISTAS

Histórico de Documentos



#	Título	Autores	Revista	Año
1	Structures and stabilities Ru-doped Agn ($n=1-13$) clusters: Ag ₁₀ Ru a 18-ve cluster superatom	Jose Manuel Guevara Vela TOMAS ROCHA RINZA P. L. Rodriguez-Kessler et al.	INORGANICA CHIMICA ACTA	2025
2	Synthesis of a new water-soluble highly Fe(III)-selective fluorescent chemosensor based on 4 <i>i</i> -H-quinolizin-4-one	JOSE MANUEL GUEVARA VELA CESAR IGNACIO SANDOVAL CHAVEZ ALEJANDRO DORAZCO GONZALEZ et al.	JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE	2025
3	Structural evolution and bonding within molybdenum-doped tin clusters MoSnn ($n=2-15$)	JOSE MANUEL GUEVARA VELA TOMAS ROCHA RINZA Miguel Gallegos et al.	INORGANICA CHIMICA ACTA	2025
4	Effect of Explicit Hydration on the Cisplatin Reaction Mechanism with Adenine and Guanine	JOSE MANUEL GUEVARA VELA TOMAS ROCHA RINZA Jesus Ivan Salazar-Barrientos et al.	Molecules	2025
5	Does Aromaticity Play a Role in Electronic and Structural Properties of YB _n ($n=2-14$) Clusters?	JOSE MANUEL GUEVARA VELA NANCY LAURA COSTALES GARCIA TOMAS ROCHA RINZA et al.	Chemphysche Chem	2024
6	Aqueous microsolvation of bivalent Cu, Zn and Cd. Quantum chemical topology analyses of cooperativity, anticooperativity and covalency	JOSE MANUEL GUEVARA VELA TOMAS ROCHA RINZA Bahena-Méndez C.E.	JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS	2024

Reporte individual

TOMAS ROCHA RINZA

7	Synthesis of Functionalized Tetrasubstituted Allenes by the Addition of Bis(trimethylsilyl)ketene Acetals to Ynones Catalyzed by Gold(I)	MORELIA EUNICE LOPEZ REYES JOSE MANUEL GUEVARA VELA TOMAS ROCHA RINZA et al.	JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY	2024
8	Structure and isomerization behavior relationships of new push-pull azo-pyrrole photoswitches	JOSE MANUEL GUEVARA VELA TOMAS ROCHA RINZA RUBEN ALFREDO TOSCANO et al.	ORGANIC & BIOMOLECULAR CHEMISTRY	2024
9	New global minimum conformers for the Pt ₁₉ and Pt ₂₀ clusters: low symmetric species featuring different active sites	Jose Manuel Guevara Vela TOMAS ROCHA RINZA Miguel Gallegos et al.	JOURNAL OF MOLECULAR MODELING	2024
10	Atoms in molecules in real space: a fertile field for chemical bonding	NANCY LAURA COSTALES GARCIA TOMAS ROCHA RINZA JOSE MANUEL GUEVARA VELA et al.	PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS	2023
11	Wave function analyses of scandium-doped aluminium clusters, Al _n Sc (n=1-24), and their CO ₂ fixation abilities	JOSE MANUEL GUEVARA VELA ARTURO SAUZA DE LA VEGA TOMAS ROCHA RINZA et al.	PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS	2023
12	On the structure and electronic properties of Pt _n clusters: new most stable structures for n=16-17	JOSE MANUEL GUEVARA VELA TOMAS ROCHA RINZA Peter L. Rodriguez-Kessler et al.	PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS	2023
13	Stronger-together: The cooperativity of aurophilic interactions	JOSE MANUEL GUEVARA VELA TOMAS ROCHA RINZA MARCOS FLORES ALAMO et al.	CHEMICAL COMMUNICATIONS	2022
14	Computation of photovoltaic and stability properties of hybrid organic-inorganic perovskites via convolutional neural networks	JOSE MANUEL GUEVARA VELA ARTURO SAUZA DE LA VEGA GIBRAN FUENTES PINEDA et al.	THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS	2022
15	Towards an atomistic understanding of polymorphism in molecular solids	ARTURO SAUZA DE LA VEGA TOMAS ROCHA RINZA Leonardo J. Duarte et al.	PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS	2022
16	Partition of the electronic energy of the PM7 method via the interacting quantum atoms approach	HUGO SALAZAR LOZAS JOSE MANUEL GUEVARA VELA TOMAS ROCHA RINZA et al.	PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS	2022
17	A QCT View of the Interplay between Hydrogen Bonds and Aromaticity in Small CHON Derivatives	JOSE MANUEL GUEVARA VELA TOMAS ROCHA RINZA Gallegos M. et al.	Molecules	2022



Sistema Integral de Información Académica

Coordinación de Planeación, Evaluación y Simplificación de la Gestión Institucional



Reporte individual

TOMAS ROCHA RINZA

18	Binding Energy Partition of Promising IRAK-4 Inhibitor (Zimlovisertib) for the Treatment of COVID-19 Pneumonia	JOSE MANUEL GUEVARA VELA TOMAS ROCHA RINZA Zapata-Acevedo C.A. et al.	Chemphysche m	2022
19	Synthesis and characterization of organotin(IV) semiconductors and their applications in optoelectronics	TOMAS ROCHA RINZA MARCOS HERNANDEZ RODRIGUEZ ELIZABETH GOMEZ PEREZ et al.	JOURNAL OF PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLIDS	2021
20	Fluorination effects in XPhos gold(I) fluorothiolates	LUIS GUILLERMO MORENO ALCANTAR ALBERTO FERNANDEZ ALARCON MARCOS FLORES ALAMO et al.	Inorganics	2021
21	The nature of the intermolecular interaction in (H ₂ X)(2) (X = O, S, Se)	ALBERTO FERNANDEZ ALARCON JOSE MANUEL GUEVARA VELA TOMAS ROCHA RINZA et al.	PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS	2021
22	Cooperativity and Anticooperativity in Ion-Water Interactions: Implications for the Aqueous Solvation of Ions	ARTURO SAUZA DE LA VEGA TOMAS ROCHA RINZA JOSE MANUEL GUEVARA VELA	Chemphysche m	2021
23	On the Relationship between Hydrogen Bond Strength and the Formation Energy in Resonance-Assisted Hydrogen Bonds	JOSE MANUEL GUEVARA VELA NANCY LAURA COSTALES GARCIA TOMAS ROCHA RINZA et al.	Molecules	2021
24	Thermodynamics from Lagrangian theory and its applications to nanosize particle systems	TOMAS ROCHA RINZA Eduardo Hernandez-Huerta Ruben Santamaria	MOLECULAR PHYSICS	2021
25	Water clusters as bifunctional catalysts in organic chemistry: the hydrolysis of oxirane and its methyl derivatives	ARTURO SAUZA DE LA VEGA HUGO SALAZAR LOZAS MARCOS HERNANDEZ RODRIGUEZ et al.	ORGANIC & BIOMOLECULAR CHEMISTRY	2021
26	Structural Diversity and Argentophilic Interactions in Small Phosphine Silver(I) Thiolate Clusters	MARTHA ALEJANDRA CABALLERO MUÑOZ JOSE MANUEL GUEVARA VELA ALBERTO FERNANDEZ ALARCON et al.	EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY	2021
27	Bifunctional squaramides with benzyl-like fragments: analysis of CHMIDLINE HORIZONTAL ELLIPSIS pi interactions by a multivariate linear regression model and quantum chemical topology dagger	EDDY IVANHOE JIMENEZ GUTIERREZ TOMAS ROCHA RINZA MARCOS HERNANDEZ RODRIGUEZ et al.	Organic Chemistry Frontiers	2021
28	Efficient implementation of the interacting quantum atoms energy partition of the second-order Moller-Plesset energy	JOSE MANUEL GUEVARA VELA TOMAS ROCHA RINZA Jose Luis Casals-Sainz et al.	JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY	2020
29	Directing the Crystal Packing in Triphenylphosphine Gold(I) Thiolates by Ligand Fluorination	LUIS GUILLERMO MORENO ALCANTAR TOMAS ROCHA RINZA MARCOS FLORES ALAMO et al.	INORGANIC CHEMISTRY	2020



Sistema Integral de Información Académica

Coordinación de Planeación, Evaluación y Simplificación de la Gestión Institucional



Reporte individual

TOMAS ROCHA RINZA

30	On the strength of hydrogen bonding within water clusters on the coordination limit	ANA KAREN CASTOR VILLEGAS JOSE MANUEL GUEVARA VELA TOMAS ROCHA RINZA et al.	JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY	2020
31	Synthesis and photophysical properties of conformationally restricted difluoroboron β -diketonate complexes of 1-indanone derivatives	TOMAS ROCHA RINZA RUBEN ALFREDO TOSCANO CECILIO ALVAREZ Y TOLEDANO et al.	Tetrahedron	2020
32	Interacting Quantum Atoms-A Review	JOSE MANUEL GUEVARA VELA TOMAS ROCHA RINZA Evelio Francisco et al.	Molecules	2020
33	Photochemistry in Real Space: Batho- and Hypsochromism in the Water Dimer	ALBERTO FERNANDEZ ALARCON JOSE MANUEL GUEVARA VELA TOMAS ROCHA RINZA et al.	CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL	2020
34	DFT performance in the IQA energy partition of small water clusters	TOMAS ROCHA RINZA JOSE MANUEL GUEVARA VELA Fernando Jimenez-Gravalos et al.	THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS	2020
35	The effect of chiral N-substituents with methyl or trifluoromethyl groups on the catalytic performance of mono- and bifunctional thioureas	SIMON HERNANDEZ ORTEGA TOMAS ROCHA RINZA MARCOS HERNANDEZ RODRIGUEZ et al.	ORGANIC & BIOMOLECULAR CHEMISTRY	2019
36	Latin American contributions to quantum chemical topology	FERNANDO CORTES GUZMAN TOMAS ROCHA RINZA J. JESUS HERNANDEZ TRUJILLO et al.	INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY	2019
37	Stability of doubly and triply H-bonded complexes governed by acidity-basicity relationships	EDDY IVANHOE JIMENEZ GUTIERREZ MARCOS HERNANDEZ RODRIGUEZ TOMAS ROCHA RINZA et al.	CHEMICAL COMMUNICATIONS	2019
38	Partition of electronic excitation energies: the IQA/EOM-CCSD method	JOSE MANUEL GUEVARA VELA NANCY LAURA COSTALES GARCIA TOMAS ROCHA RINZA et al.	PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS	2019
39	Stability and trans Influence in Fluorinated Gold(I) Coordination Compounds	LUIS GUILLERMO MORENO ALCANTAR HUGO CESAR HERNANDEZ TOLEDO JOSE MANUEL GUEVARA VELA et al.	EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY	2018
40	A detailed atomistic molecular simulation study on adsorption-based separation of CO ₂ using a porous coordination polymer	TOMAS ROCHA RINZA Zarabadi-Poor P.	RSC ADVANCES	2018
41	Acidity and basicity interplay in amide and imide self-association	EDDY IVANHOE JIMENEZ GUTIERREZ BEATRIZ QUIROZ GARCIA MARCOS HERNANDEZ RODRIGUEZ et al.	CHEMICAL SCIENCE	2018

Reporte individual

TOMAS ROCHA RINZA

42	Simple method to estimate relative hydrogen bond basicities of amides and imides in chloroform	EDDY IVANHOE JIMENEZ GUTIERREZ MARCOS HERNANDEZ RODRIGUEZ TOMAS ROCHA RINZA et al.	JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE	2018
43	Cooperative and anticooperative effects in resonance assisted hydrogen bonds in merged structures of malondialdehyde	JOSE MANUEL GUEVARA VELA NANCY LAURA COSTALES GARCIA TOMAS ROCHA RINZA et al.	PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS	2017
44	The bifunctional catalytic role of water clusters in the formation of acid rain	MARCOS HERNANDEZ RODRIGUEZ TOMAS ROCHA RINZA Romero-Montalvo, Eduardo et al.	CHEMICAL COMMUNICATIONS	2017
45	Evolution of electron density towards the conical intersection of a nucleic acid purine	TOMAS ROCHA RINZA FERNANDO CORTES GUZMAN JORGE PEON PERALTA et al.	CHEMICAL PHYSICS LETTERS	2017
46	Performance of the RI and RIJCOSX approximations in the topological analysis of the electron density	JOSE MANUEL GUEVARA VELA TOMAS ROCHA RINZA Martin Pendas, Angel	THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS	2017
47	pi-Backbonding and non-covalent interactions in the JohnPhos and polyfluorothiolate complexes of gold(I)	LUIS GUILLERMO MORENO ALCANTAR JOSE MANUEL GUEVARA VELA TOMAS ROCHA RINZA et al.	DALTON TRANSACTIONS	2017
48	Structural effects of trifluoromethylation and fluorination in gold(I) BIPHEP fluorothiolates	LUIS GUILLERMO MORENO ALCANTAR JOSE MANUEL GUEVARA VELA TOMAS ROCHA RINZA et al.	NEW JOURNAL OF CHEMISTRY	2017
49	Design and application of a bifunctional organocatalyst guided by electron density topological analyses	EDDY IVANHOE JIMENEZ GUTIERREZ TOMAS ROCHA RINZA MARCOS HERNANDEZ RODRIGUEZ et al.	CATALYSIS SCIENCE & TECHNOLOGY	2017
50	Hydrogen-Bond Weakening through pi Systems: Resonance-Impaired Hydrogen Bonds (RIHB)	JOSE MANUEL GUEVARA VELA MARCOS HERNANDEZ RODRIGUEZ TOMAS ROCHA RINZA et al.	CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL	2017
51	Where Does Electron Correlation Lie? Some Answers from a Real Space Partition	JOSE MANUEL GUEVARA VELA TOMAS ROCHA RINZA Jose Luis Casalz-Sainz et al.	Chemphyschem	2017
52	Bifunctional Thioureas with alpha-Trifluoromethyl or Methyl Groups: Comparison of Catalytic Performance in Michael Additions	TOMAS ROCHA RINZA MARCOS HERNANDEZ RODRIGUEZ Jimenez, Eddy I. et al.	JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY	2016
53	The nature of resonance-assisted hydrogen bonds: A quantum chemical topology perspective	TOMAS ROCHA RINZA Manuel Guevara-Vela, Jose Romero-Montalvo, Eduardo et al.	PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS	2016
54	Hydrogen bond cooperativity and anticooperativity within the water hexamer	RODRIGO CHAVEZ CALVILLO TOMAS ROCHA RINZA Manuel Guevara-Vela, Jose et al.	PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS	2016



Sistema Integral de Información Académica

Coordinación de Planeación, Evaluación y Simplificación de la Gestión Institucional



Reporte individual

TOMAS ROCHA RINZA

55	Fermi and Coulomb correlation effects upon the interacting quantum atoms energy partition	TOMAS ROCHA RINZA Ruiz, Isela Matito, Eduard et al.	THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS	2016
56	Electron correlation in the interacting quantum atoms partition via coupled-cluster lagrangian densities	RODRIGO CHAVEZ CALVILLO TOMAS ROCHA RINZA Jose Holguin-Gallego, Fernando et al.	JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY	2016
57	Partitioning the DFT exchange-correlation energy in line with the interacting quantum atoms approach	TOMAS ROCHA RINZA Francisco, E. Casals-Sainz, J. L. et al.	THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS	2016
58	Dynamical correlation within the Interacting Quantum Atoms method through coupled cluster theory	RODRIGO CHAVEZ CALVILLO TOMAS ROCHA RINZA GarciaRevilla, Marco et al.	COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY	2015
59	Stilbene photoisomerization driving force as revealed by the topology of the electron density and QTAIM properties	Luis GutierrezArzaluz TOMAS ROCHA RINZA FERNANDO CORTES GUZMAN	COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY	2015
60	Electron density analysis of aromatic complexes in excited electronic states: The benzene and naphthalene excimers	Jesus JaraCortes TOMAS ROCHA RINZA J. JESUS HERNANDEZ TRUJILLO	COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY	2015
61	Assessment of Hydrophobic Interactions and Their Contributions Through the Analysis of the Methane Dimer	Victor Duarte Alaniz TOMAS ROCHA RINZA GABRIEL EDUARDO CUEVAS GONZALEZ BRAVO	JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY	2015
62	Electronic Structure and Noncovalent Interactions within Ion-Radical Complexes of N-(2-Furylmethyl)aniline Molecular Ions	Wilmer E. Vallejo Narvaez TOMAS ROCHA RINZA	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A	2015
63	Ultrafast excited state hydrogen atom transfer in salicylideneaniline driven by changes in aromaticity	Luis GutierrezArzaluz FERNANDO CORTES GUZMAN TOMAS ROCHA RINZA et al.	PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS	2015
64	Erratum: Properties of atoms in electronically excited molecules within the formalism of TDDFT (Journal of Computational Chemistry (2014) 35 (820-828))	ERIC IVAN SANCHEZ FLORES RODRIGO CHAVEZ CALVILLO GABRIEL EDUARDO CUEVAS GONZALEZ BRAVO et al.	JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY	2015
65	Assessment of hydrophobic interactions and their contributions through the analysis of the methane dimer	TOMAS ROCHA RINZA GABRIEL EDUARDO CUEVAS GONZALEZ BRAVO Duarte Alaniz V.	JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY	2014



Sistema Integral de Información Académica

Coordinación de Planeación, Evaluación y Simplificación de la Gestión Institucional



Reporte individual

TOMAS ROCHA RINZA

66	Properties of atoms in electronically excited molecules within the formalism of TDDFT	ERIC IVAN SANCHEZ FLORES RODRIGO CHAVEZ CALVILLO GABRIEL EDUARDO CUEVAS GONZALEZ BRAVO et al.	JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY	2014
67	Dynamic molecular graphs: "hopping" structures	FERNANDO CORTES GUZMAN TOMAS ROCHA RINZA Jose Manuel Guevara Vela et al.	CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL	2014
68	Hydrogen-bond cooperative effects in small cyclic water clusters as revealed by the interacting quantum atoms approach	Jose Manuel Guevara Vela RODRIGO CHAVEZ CALVILLO J. JESUS HERNANDEZ TRUJILLO et al.	CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL	2013
69	Performance of popular XC-functionals for the description of excitation energies in GFP-like chromophore models	TOMAS ROCHA RINZA List, Nanna Holmggaard Olsen, Jogvan Magnus et al.	INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY	2012
70	Application of Electron Delocalization Indicators in the Study of Electrophilic Aromatic Substitution Reactions	TOMAS ROCHA RINZA Garcia-Revilla, Marco	CURRENT ORGANIC CHEMISTRY	2011
71	Unraveling the similarity of the photoabsorption of deprotonated p-coumaric acid in the gas phase and within the photoactive yellow protein	TOMAS ROCHA RINZA Sneskov K. Christiansen O. et al.	PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS	2011
72	Absorption tuning of the green fluorescent protein chromophore: synthesis and studies of model compounds	TOMAS ROCHA RINZA Nielsen, Mogens Brondsted Andersen, Lars H.	MONATSHEFTE FUR CHEMIE	2011
73	Valence Shell Charge Concentration (VS _{CC}) Evolution: A Tool to Investigate the Transformations within a VS _{CC} Throughout a Chemical Reaction	FERNANDO CORTES GUZMAN ANA MARIA GOMEZ RAMIREZ TOMAS ROCHA RINZA et al.	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A	2011
74	The role of cell geometry over transport and reaction processes	TOMAS ROCHA RINZA Freyre-Fonseca V. Valdés-Parada F.J. et al.	Chemical Engineering Transactions	2011
75	Spectroscopic Implications of the Electron Donor-Acceptor Effect in the Photoactive Yellow Protein Chromophore	TOMAS ROCHA RINZA Christiansen, Ove Rahbek, Dennis B. et al.	CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL	2010
76	Gas Phase Absorption Studies of Photoactive Yellow Protein Chromophore Derivatives	TOMAS ROCHA RINZA Rajput O.C.J. Gopalan A. et al.	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A	2009
77	Photoabsorption studies of neutral green fluorescent protein model chromophores in vacuo	TOMAS ROCHA RINZA Rajput J. Rahbek D.B. et al.	PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS	2009



Sistema Integral de Información Académica

Coordinación de Planeación, Evaluación y Simplificación de la Gestión Institucional



Reporte individual

TOMAS ROCHA RINZA

78	Linear response coupled cluster study of the benzene excimer	TOMAS ROCHA RINZA Christiansen O.	CHEMICAL PHYSICS LETTERS	2009
79	The nature of benzene-cation interactions from the topology of the electron distribution	TOMAS ROCHA RINZA J. JESUS HERNANDEZ TRUJILLO	CHEMICAL PHYSICS LETTERS	2006
80	A theoretical study of singlet low-energy excited states of the benzene dimer	TOMAS ROCHA RINZA De Vico L. Veryazov V. et al.	CHEMICAL PHYSICS LETTERS	2006



Sistema Integral de Información Académica

Coordinación de Planeación, Evaluación y Simplificación de la Gestión Institucional

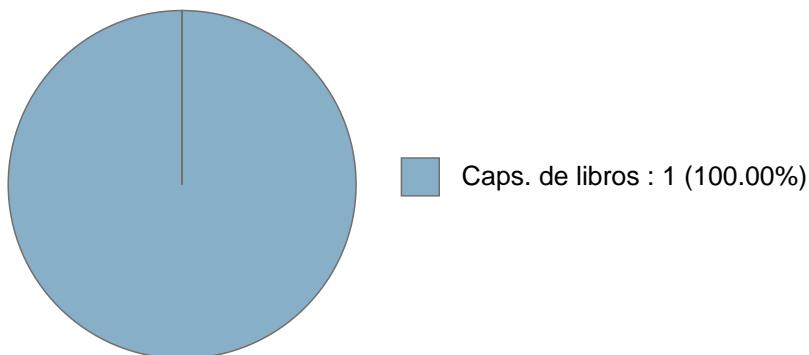
Reporte individual



TOMAS ROCHA RINZA

LIBROS Y CAPITULOS CON ISBN

Obras con registro ISBN



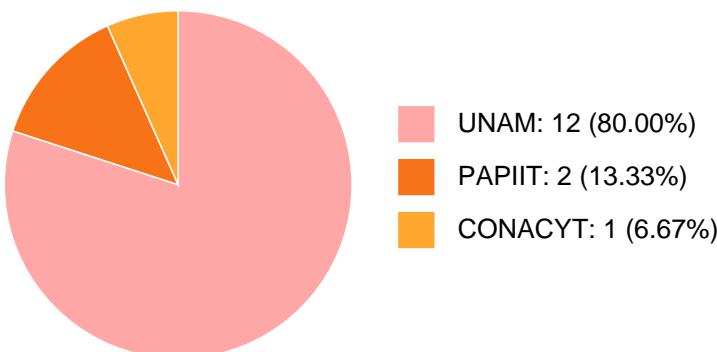
#	Título	Autores	Alcance	Año	ISBN
1	Applications of the quantum theory of atoms in molecules and the interacting quantum atoms methods to the study of hydrogen bonds	JOSE MANUEL GUEVARA VELA ALBERTO FERNANDEZ ALARCON TOMAS ROCHA RINZA	Capítulo de un Libro	2022	9780323908917

Reporte individual

TOMAS ROCHA RINZA

PARTICIPACIÓN EN PROYECTOS

Histórico de participación en proyectos



#	Nombre	Participantes	Fuente	Fecha inicio	Fecha fin
1	Aplicaciones del método de átomos cuánticos interactuantes: Implementación y aplicaciones.	TOMAS ROCHA RINZA	Presupuesto de la UNAM asignado a la Dependencia	01-01-2016	01-04-2021
2	Obtención de matriz de uno y dos electrones dependientes del espín basadas en el Lagangiano de cúmulos acoplados.	TOMAS ROCHA RINZA	Presupuesto de la UNAM asignado a la Dependencia	01-07-2015	01-04-2020
3	Correlación dinámica en el método de átomos cuánticos interactuantes: implementación y aplicaciones.	TOMAS ROCHA RINZA	Recursos CONACYT	01-08-2016	13-03-2020
4	Partición de la energía electrónica en interacciones no covalentes en estado basal y excitado.	TOMAS ROCHA RINZA	Recursos PAPIIT	01-01-2018	31-12-2020
5	Partición de la energía electrónica de métodos semiempíricos.	TOMAS ROCHA RINZA	Presupuesto de la UNAM asignado a la Dependencia	07-01-2019	31-12-2022
6	Aplicación del método IQA/EOM-CCSD al estudio del solvatochromismo.	TOMAS ROCHA RINZA	Presupuesto de la UNAM asignado a la Dependencia	07-01-2019	31-12-2022
7	Codificación en Deep learning de moléculas orgánicas.	TOMAS ROCHA RINZA	Presupuesto de la UNAM asignado a la Dependencia	28-01-2019	31-12-2022



Sistema Integral de Información Académica

Coordinación de Planeación, Evaluación y Simplificación de la Gestión Institucional



Reporte individual

TOMAS ROCHA RINZA

8	Cúmulos de agua como catalizadores bifuncionales en química orgánica.	TOMAS ROCHA RINZA	Presupuesto de la UNAM asignado a la Dependencia	08-01-2018	31-12-2020
9	Uso del método de átomos cuánticos interactuantes para la caracterización del enlace químico en compuestos de elementos actínidos.	TOMAS ROCHA RINZA	Recursos PAPIIT	01-01-2021	31-12-2023
10	Efectos no aditivos en la solvatación de cationes y aniones en medio acuoso.	TOMAS ROCHA RINZA	Presupuesto de la UNAM asignado a la Dependencia	03-01-2022	31-12-2022
11	Naturaleza de interacciones moleculares en cúmulos moleculares de hidruros de calcógenos.	TOMAS ROCHA RINZA	Presupuesto de la UNAM asignado a la Dependencia	03-01-2022	31-12-2022
12	Partición de la energía electrónica en métodos semiempíricos	TOMAS ROCHA RINZA	Presupuesto de la UNAM asignado a la Dependencia	02-01-2023	31-12-2023
13	Cálculo de propiedades fotovoltaicas y de estabilidad de perovskitas con redes neuronales convolucionales.	TOMAS ROCHA RINZA	Presupuesto de la UNAM asignado a la Dependencia	02-01-2023	31-12-2023
14	Partición de la energía electrónica en la hidratación de iones de metales de transición (Cd(II), Zn(II), Cu(II) y Hg(II))	TOMAS ROCHA RINZA	Presupuesto de la UNAM asignado a la Dependencia	08-01-2024	31-12-2024
15	División de energías de excitación TDDFT en términos intra- e interatómicos	TOMAS ROCHA RINZA	Presupuesto de la UNAM asignado a la Dependencia	08-01-2024	31-12-2024



Sistema Integral de Información Académica

Coordinación de Planeación, Evaluación y Simplificación de la Gestión Institucional

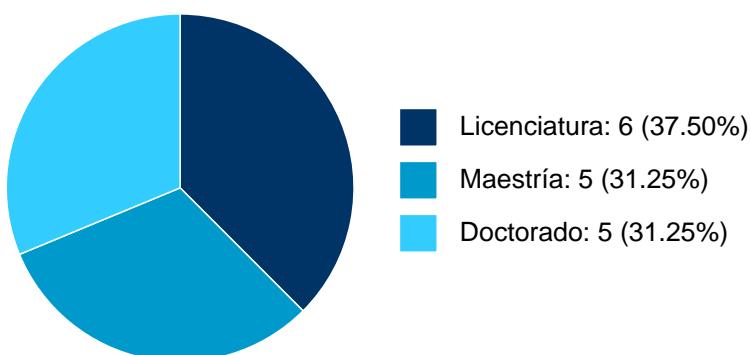


Reporte individual

TOMAS ROCHA RINZA

PARTICIPACIÓN EN TESIS

Histórico de Colaboraciones en Tesis



#	Título del documento	Tipo de Tesis	Sinodales	Autores	Entidad	Año
1	Obtención de nuevos materiales de perovskita como dispositivos fotovoltaicos con aprendizaje automático	Tesis de Doctorado	FERNANDO CORTES GUZMAN,	TOMAS ROCHA RINZA, Aristizabal Ferreira, Víctor Alexander,	Facultad de Química, Instituto de Química,	2024
2	Partición de la energía electrónica de métodos semiempíricos	Tesis de Doctorado	TOMAS ROCHA RINZA, Salazar Lozas, Hugo,	Instituto de Química,	2023	
3	Efectos no aditivos en la interacción de cúmulos de agua con cationes y aniones mono- y divalentes	Tesis de Maestría	TOMAS ROCHA RINZA, Sauza de la Vega, Arturo,	Instituto de Química,	2020	
4	Análisis de átomos cuánticos interactuantes para la aproximación de cúmulos acoplados en distintos estados electrónicos	Tesis de Doctorado	TOMAS ROCHA RINZA, Fernández Alarcón, Alberto,	Instituto de Química,	2020	



Sistema Integral de Información Académica

Coordinación de Planeación, Evaluación y Simplificación de la Gestión Institucional



Reporte individual

TOMAS ROCHA RINZA

5	Estudio del patrón de sustitución en la catálisis bifuncional de cúmulos de agua en la hidrólisis de epóxidos	Tesis de Maestría	TOMAS ROCHA RINZA,	Salazar Lozas, Hugo,	Instituto de Química,	2019
6	Estudio teórico-experimental de las interacciones presentes en los dímeros de amidas e imidas	Tesis de Doctorado	TOMAS ROCHA RINZA,	Vallejo Narváez, Wilmer Esteban,	Instituto de Química,	2018
7	Topología de la densidad electrónica del estado basal y los primeros estados excitados singulete y triplete de C ₆ H ₆ y (C ₆ H ₆) ₂	Tesis de Licenciatura	TOMAS ROCHA RINZA,	Sánchez Flores, Eric Iván,	Instituto de Química,	2017
8	Análisis de propiedades topológicas de la densidad electrónica del cromóforo sintético hbmp1 de la proteína DsRed	Tesis de Licenciatura	TOMAS ROCHA RINZA,	Salazar Lozas, Hugo,	Instituto de Química,	2017
9	Inclusión de correlación dinámica en el método de átomos cuánticos interactuantes mediante el lagrangiano de cúmulos acoplados	Tesis de Doctorado	TOMAS ROCHA RINZA,	Holguin Gallego, Fernando José,	Instituto de Química,	2017
10	Cúmulos de agua como catalizadores bifuncionales en química orgánica : hidrólisis del óxido de etileno	Tesis de Licenciatura	TOMAS ROCHA RINZA,	Sauza de la Vega, Arturo,	Instituto de Química,	2017
11	Ánalisis de la geometría molecular de hidruros triatómicos basado en la metodología de átomos cuánticos interactuantes	Tesis de Maestría	TOMAS ROCHA RINZA,	Aristizabal Ferreira, Víctor Alexander,	Instituto de Química,	2017
12	Estudio teórico de efectos cooperativos y anticooperativos en enlaces de hidrógeno asistidos por resonancia (EHARS)	Tesis de Maestría	TOMAS ROCHA RINZA,	Romero Montalvo, Eduardo Alejandro,	Instituto de Química,	2016



Sistema Integral de Información Académica

Coordinación de Planeación, Evaluación y Simplificación de la Gestión Institucional



Reporte individual

TOMAS ROCHA RINZA

13	Topología de la densidad electrónica en complejos $[m(Co)n]q$, m= Co; Fe, n = 3,4 y 5 en estado formal de oxidación q= 0, -1, -2 y -3	Tesis de Licenciatura	TOMAS ROCHA RINZA,	Tlatelpa Iglesias, Marco Antonio,	Instituto de Química,	2016
14	Estudio teórico de las interacciones presentes en los complejos ión-radical generados en la disociación de los iones moleculares de las n-(2-furilmetil)anilinas-4-sustituidas	Tesis de Maestría	TOMAS ROCHA RINZA,	Vallejo Narváez, Wilmer Esteban,	Instituto de Química,	2014
15	Efectos cooperativos y anticooperativos en interacciones por puente de hidrógeno en distintos arreglos del hexámero de agua	Tesis de Licenciatura	TOMAS ROCHA RINZA,	Mora Gomez, Victor Arturo,	Instituto de Química,	2013
16	Contribuciones aditivas y no aditivas en la energía de interacción de cúmulos de agua cíclicos (h_2o)n n=3-6	Tesis de Licenciatura	TOMAS ROCHA RINZA,	Guevara Vela, José Manuel,	Instituto de Química,	2012



Sistema Integral de Información Académica

Coordinación de Planeación, Evaluación y Simplificación de la Gestión Institucional

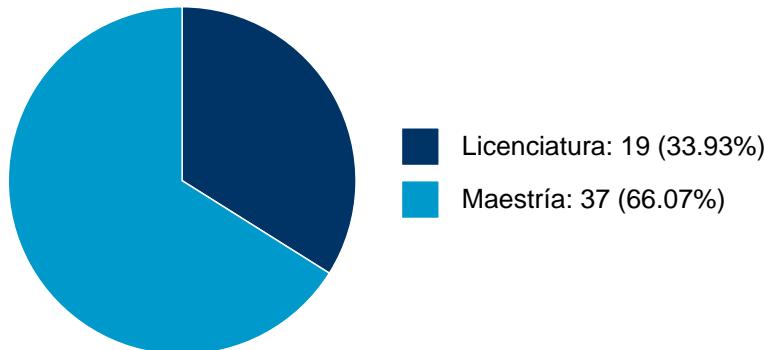


Reporte individual

TOMAS ROCHA RINZA

DOCENCIA IMPARTIDA

Histórico de docencia



#	Nivel titulación	Asignatura	Entidad	Alumnos	Semestre
1	Maestría	TERMODINÁMICA QUÍMICA I	Facultad de Química	15	2024-2
2	Maestría	QUÍMICA CUÁNTICA I	Facultad de Química	1	2024-1
3	Maestría	QUÍMICA CUÁNTICA I	Facultad de Química	6	2023-2
4	Licenciatura	EQUILIBRIO Y CINETICA	Facultad de Química	45	2023-1
5	Licenciatura	ESTRUCTURA DE LA MATERIA	Facultad de Química	38	2022-2
6	Licenciatura	ESTRUCTURA DE LA MATERIA	Facultad de Química	61	2022-1
7	Licenciatura	QUIMICA CUANTICA I	Facultad de Química	40	2021-2
8	Licenciatura	ESTRUCTURA DE LA MATERIA	Facultad de Química	13	2021-1
9	Licenciatura	ESTRUCTURA DE LA MATERIA	Facultad de Química	56	2020-2
10	Licenciatura	QUIMICA CUANTICA I	Facultad de Química	29	2020-1
11	Maestría	TRABAJO DE INVESTIGACIÓN	Facultad de Química	1	2020-1
12	Maestría	TRABAJO DE INVESTIGACIÓN	Facultad de Química	1	2020-1
13	Licenciatura	ESTRUCTURA DE LA MATERIA	Facultad de Química	58	2019-2
14	Maestría	TRABAJO DE INVESTIGACIÓN	Facultad de Química	1	2019-2
15	Maestría	TRABAJO DE INVESTIGACIÓN	Facultad de Química	1	2019-2
16	Maestría	TRABAJO DE INVESTIGACIÓN	Facultad de Química	1	2019-1
17	Maestría	TRABAJO DE INVESTIGACIÓN	Facultad de Química	1	2019-1
18	Maestría	TRABAJO DE INVESTIGACIÓN	Facultad de Química	1	2019-1
19	Licenciatura	ESTRUCTURA DE LA MATERIA	Facultad de Química	31	2019-1
20	Licenciatura	QUIMICA CUANTICA I	Facultad de Química	40	2018-2
21	Maestría	TRABAJO DE INVESTIGACION	Facultad de Química	1	2018-2
22	Maestría	TRABAJO DE INVESTIGACION	Facultad de Química	1	2018-2
23	Maestría	TRABAJO DE INVESTIGACION	Facultad de Química	1	2018-1



Sistema Integral de Información Académica

Coordinación de Planeación, Evaluación y Simplificación de la Gestión Institucional



Reporte individual

TOMAS ROCHA RINZA

24	Maestría	TRABAJO DE INVESTIGACION	Facultad de Química	1	2018-1
25	Maestría	QUIMICA CUANTICA I	Facultad de Química	9	2018-1
26	Maestría	TRABAJO DE INVESTIGACIÓN	Facultad de Química	1	2017-2
27	Maestría	TRABAJO DE INVESTIGACIÓN	Facultad de Química	1	2017-2
28	Licenciatura	QUIMICA CUANTICA I	Facultad de Química	45	2017-2
29	Maestría	TEMA SELECTO-324455	Facultad de Química	5	2017-1
30	Maestría	TRABAJO DE INVESTIGACION-395582	Facultad de Química	1	2017-1
31	Licenciatura	ESTRUCTURA DE LA MATERIA	Facultad de Química	42	2017-1
32	Licenciatura	QUIMICA CUANTICA I	Facultad de Química	17	2016-2
33	Maestría	TERMODINAMICA QUIMICA I	Facultad de Química	17	2016-2
34	Maestría	TRABAJO DE INVESTIGACION	Facultad de Química	1	2016-2
35	Maestría	TRABAJO DE INVESTIGACION	Facultad de Química	1	2016-1
36	Licenciatura	QUIMICA CUANTICA I	Facultad de Química	27	2016-1
37	Maestría	TEMA SELECTO	Facultad de Química	5	2015-2
38	Maestría	TRABAJO DE INVESTIGACION	Facultad de Química	1	2015-2
39	Licenciatura	QUIMICA CUANTICA I	Facultad de Química	40	2015-2
40	Licenciatura	QUIMICA CUANTICA I	Facultad de Química	14	2015-1
41	Maestría	TRABAJO DE INVESTIGACION	Facultad de Química	1	2015-1
42	Maestría	TRABAJO DE INVESTIGACION	Facultad de Química	1	2015-1
43	Maestría	TRABAJO DE INVESTIGACION	Facultad de Química	1	2014-2
44	Licenciatura	QUIMICA CUANTICA I	Facultad de Química	22	2014-2
45	Maestría	TEMA SELECTO	Facultad de Química	3	2014-2
46	Maestría	TEMAS SELECTOS	Facultad de Química	5	2014-1
47	Maestría	TERMODINAMICA QUIMICA I	Facultad de Química	2	2014-1
48	Maestría	TERMODINAMICA QUIMICA I	Facultad de Química	7	2014-1
49	Curso de Bachillerato	Uso de la química computacional en la enseñanza en el bachillerato	Dirección General Escuela Nacional Preparatoria	0	
50	Maestría	TERMODINAMICA QUIMICA I	Facultad de Química	24	2013-2
51	Maestría	TEMAS SELECTOS	Facultad de Química	4	2013-2
52	Maestría	TEMAS SELECTOS	Facultad de Química	1	2013-1
53	Maestría	TEMAS SELECTOS	Facultad de Química	5	2012-2
54	Maestría	TEMAS SELECTOS	Facultad de Química	8	2012-1
55	Maestría	TEMAS SELECTOS	Facultad de Química	3	2011-2
56	Licenciatura	QUIMICA CUANTICA I	Facultad de Química	11	2011-1
57	Licenciatura	ESTRUCTURA DE LA MATERIA	Facultad de Química	49	2010-2



Sistema Integral de Información Académica

Coordinación de Planeación, Evaluación y
Simplificación de la Gestión Institucional

Reporte individual



TOMAS ROCHA RINZA

PATENTES

No se encuentran registros en la base de datos de patentes asociados a:

TOMAS ROCHA RINZA



Sistema Integral de Información Académica

Coordinación de Planeación, Evaluación y Simplificación de la Gestión Institucional



Reporte individual

TOMAS ROCHA RINZA

FUENTES DE INFORMACIÓN

Internos

#	Información	Fuente	Sistema	Periodo
1	Grupos ordinarios y resumen de historias académicas	DGAE	SIAE	2008-2025
2	Nombramientos, datos generales, estímulos, premios y reconocimientos	DGAPA	RUPA	2008-2025
3	Producción Académica	CH	Humanindex	2008-2021
4	Producción Académica	CIC	SCIC	2000-2017
5	Proyectos	DGPO	SISEPRO	2018-2022
6	Tesis	DGB	TESIUNAM	2008-2025
7	Tutorías en Posgrado	CGEP	SIIPosgrado	2008-2021

Externos

#	Información	Fuente	Sistema	Periodo
8	Documentos Indexados	Elsevier	Scopus	2008-2025
9	Documentos Indexados	Thomson Reuters	WoS	2008-2025
10	Obras con registro ISBN	INDAUTOR	Agencia ISBN	2008-2025
11	Patentes	IMPI	SIGA	2008-2024