

1. DATOS PERSONALES

- a. Nombre y apellido: ROSANA MARIA LOBAYAN DE BONCZOK.
- b. Correo electrónico: rmlb@exa.unne.edu.ar

2. BREVE SÍNTESIS DEL CURRÍCULUM

Actualmente se desempeña como Profesor Adjunto Ordinario de la asignatura Mecánica Cuántica I y en la Universidad de la Cuenca del Plata como Profesor Titular Interino. Ha realizando tareas docentes, en la FACENA UNNE desde el año 1985. Desde el año 1998 con Dedicación Exclusiva (ganada por concurso: Programa de Mejoramiento de las Dedicaciones de la UNNE) para realizar tareas de Investigación (se discontinua en 2001 por razones personales de índole familiar). Ha dictado clases teóricas en las materias Física I (Mecánica) y Mecánica I y II. Se ha desempeñado como Profesor Adjunto adscripto a las cátedras de Física Computacional (2006) y Mecánica Calor y Termodinámica (2007).

Ha obtenido el grado de Doctor de la Universidad Nacional del Nordeste en la especialidad Física en el año 1997. Ha realizado numerosos cursos de postgrado y obtenido una beca de pregrado de SECyT y tres becas de postgrado de CONICET. Ha obtenido la MENCIÓN DE HONOR de la FCENyA UNNE Promoción 1989. Ha sido integrante de Proyectos de investigación desde 1994. Actualmente es Directora del programa STRESS OXIDATIVO-ALIMENTOS FUNCIONALES ANPCyT-UCP y del Proyecto de Investigación: "*Topología de la descomposición de la densidad electrónica en contribuciones de apareamiento y cumulante (efectos de correlación electrónica)*", SECyT-UNNE.

Posee 23 publicaciones con referato: 2 en revistas nacionales y 21 en revistas internacionales y dos trabajos actualmente en revisión. Ha realizado 19 publicaciones sin referato y 62 presentaciones a congresos nacionales e internacionales. Ha dictado conferencias en reuniones científicas y ha asistido a 21 congresos nacionales e internacionales. Ha co-dirigido una beca de pre-grado, SECyT-UNNE y una de Post-grado categoría Iniciación otorgada por SECyT-UNNE en temas de Física Molecular. Actualmente dirige dos becas de doctorado de ANPCyT y es directora de una beca tipo II de CONICET en temas de Física Molecular, desarrollando trabajos científicos en colaboración con grupos de investigación de primer nivel (UNLP, UBA, Universidad del País Vasco). Además es directora de dos Tesis de Doctorado en curso.

Ha dictado en colaboración el curso "Química Cuántica para Químicos y Bioquímicos" destinado a post-graduados de: Licenciatura en Química, Bioquímica y Farmacia y el SEMINARIO DE ACTUALIZACIÓN DISCIPLINAR I (para profesores de Física) correspondiente al plan de estudio de la carrera de LICENCIATURA EN ENSEÑANZA DE LAS CIENCIAS EXPERIMENTALES de la FACENA y el curso de posgrado "ELEMENTOS DE QUÍMICA CUÁNTICA" en la UCP.

Se ha desempeñado como integrante de tribunal en Concursos para proveer cargos o para para la evaluación de Carrera Docente de cargos de PROFESOR ADJUNTO, JEFE DE TRABAJOS PRACTICOS y AUXILIARES DE DOCENCIA DE PRIMERA para Cátedras de Física de la FACENyA UNNE, y en otras dos oportunidades como Miembro Titular de la comisión asesora para el concurso de Adscripciones en las asignaturas: "Química Física II" "Estructura de la materia I" y "Estructura de la materia II".

Se ha desempeñado como integrante de las comisiones evaluadoras de varias actividades científicas y es evaluador de publicaciones primarias en Revistas Internacionales.

Ha realizado varias actividades de divulgación científica o pedagógica (exposiciones y seminarios) en el Departamento de Física, en el Área de Química Física (FACENA, UNNE), en la Facultad de Ingeniería de la UCP y en Colegios Secundarios.

Ha realizado tareas de gestión como miembro de algunas comisiones (Comisión de organización de la Reunión de Comunicaciones Científicas y Tecnológicas de la UNNE, Comisión de Carrera del Profesorado en Física y Comisión Responsable del análisis de la articulación de los Trabajos Prácticos de las Ciencias Básicas de la carrera de Ingeniería en Alimentos de la UCP). Fue miembro titular del Consejo Consultivo de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de la Cuenca del Plata y Jefe del Departamento de Orientación Básica de la misma Facultad habiéndose desempeñado también como decana interina de la Facultad de Ingeniería de la UCP. Actualmente se desempeña como Directora de la Carrera de Licenciatura en Ciencias Físicas de la FACENyA UNNE.

3 FORMACION ACADEMICA

a. TITULO DE GRADO: LICENCIADA EN CIENCIAS FISICAS

LUGAR: Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura de la Universidad Nacional del Nordeste. (MENCION DE HONOR FACENyA UNNE Promoción 1989). FECHA: 1989.

b. Títulos de Posgrado:

DOCTORADO: Doctor de la Universidad Nacional del Nordeste en la especialidad Física. TITULO DE LA TESIS:

"RELACION ENTRE ESTRUCTURAS ELECTRONICAS MOLECULARES Y CONSTANTES DE ACOPLAMIENTO DE SPIN DE RMN A LO LARGO DE LA TABLA PERIODICA".

INSTITUCION OTROGANTE: Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura Universidad Nacional del Nordeste. RES. C.S. 660/98 y C.D. 3616/98.

FECHA DE DEFENSA: 29-12-1997. CALIFICACION: Sobresaliente con mención especial.

La Carrera del Doctorado de la UNNE en la especialidad Física fue ACREDITADA por la CONEAU por Res. N 114/04 el 25 de abril de 2004.

c. CURSOS DE ACTUALIZACION Y DE POSGRADOS

1. ORGANIZACION FUNCIONAL DE LOS TRABAJOS PRACTICOS EN FISICA.

FACENyA UNNE. Dictado por la Lic. M. S. Aguirre FACENyA UNNE. Duración: 36 horas didácticas, 09-92 al 13-92. Certificado: Aprobación.

2. PARAMETROS MAGNETICOS Y ESTRUCTURA MOLECULAR I.

FACENyA UNNE. Dictado por: Dr. Ruben H. Contreras FCEN UBA. Duración: 6 horas semanales (15 semanas), segundo cuatrimestre 1992. Certificado: Aprobación.

3. METODOS DE LA FISICA MOLECULAR TEORICA.

FACENyA UNNE. Dictado por: Dr. G. A. Aucar FACENyA UNNE. Duración: 70 horas, segundo cuatrimestre 1994. Certificado: Aprobación.

4. PARAMETROS MAGNETICOS Y ESTRUCTURA MOLECULAR II.

FACENyA UNNE. Dictado por: Dr. Ruben H. Contreras FCEN UBA. Duración: 50 horas, 20-02-95 al 01-12-95. Certificado: Aprobación.

5. TEORIA CUANTICA DE SISTEMAS EXTENDIDOS.

FACENyA UNNE. Dictado por: Dr. H. Grinberg FCEN UBA. Duración: 61 horas semanales, 27-11-95 al 02-12-95. Certificado: Aprobación.

6. SIMULACION NUMERICA EN LA FISICA.

FACENyA UNNE. Dictado por: Dr. Mario Jakas Universidad de La Laguna Tenerife. Duración: 70 horas, 10-96. Certificado: Aprobación.

7. EPISTEMOLOGIA.

Facultad de Humanidades UNNE. Dictado por: Dr. Ricardo Gomez, Mgter. Antonio Castorina y Prof.

Juan Samaja. Duración: 130 horas, 07-12-95 al 23-3-96. Certificado: Aprobación.

8. *WORKSHOP INTRODUCTION TO GAUSSIAN: THEORY AND PRACTICE.*

Silicon Graphics Buenos Aires, Argentina. Dictado por: Prof. Gustavo Scuseria, Rice University, Prof. George A. Peterson, Wesleyan University, Dr. Douglas J. Fox, Gaussian, Inc., Dr. Carlos Sosa, Silicon Graphics Inc., Dr. Roberto Gomperts, Silicon Graphics, Inc. Duración: 50 horas, 14-07-97 al 17-07-97. Certificado: Aprobación.

9. *DOCENCIA UNIVERSITARIA: TEORIA Y PRACTICA.*

UNNE. Duración: 150 horas, 9-09-99 al 19-11-99. CERTIFICADO: Aprobación.

10. *INTRODUCCION A LA QUIMICA MEDICINAL.*

UNNE. Dictado por: Dr. Daniel Henriz. Duración: 25 horas, 03-04-01 al 07-04-01. Certificado: Aprobación.

11. *QUIMICA CUANTICA AVANZADA Y TEORIA DE COLISIONES.*

UNNE. Dictado por: Dr. Gerardo Delgado Barrios. Duración: 120 horas, 26-11-01 al 12-12-01. Certificado: Aprobación.

12. *TEORIA DE LAS COLISIONES.*

UNNE. Dictado por: Dr. Gerardo Delgado Barrios. Duración: 105 horas, 18-10-02 al 29-11-02. Certificado: Aprobación.

13. *CURSO TALLER: FORMULACIÓN DE PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN, Curso teórico con análisis de casos.*

UNNE. Dictado por: Dr. Jorge Guillermo TEZON (CONICET). FECHA: 17-05-04 al 18-05-04. Duración: dos (2) días. 18 horas presenciales, teóricas-prácticas. Certificado: Asistencia.

OTROS CURSOS Y JORNADAS:

14 *MECANICA Y TERMODINAMICA ESTADISTICA.*

FACENyA UNNE. Materia Curricular optativa cursada como alumna vocacional con posterioridad a la obtención del título de grado. Dictado por el Dr. E. Custidiano FACENyA UNNE. Duración: 120 horas, 04-91 al 07-91. Certificado: Aprobación.

15. *RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR.*

UNNE. Dictado por: Dr. Rubén H. Contreras, FCEN UBA. Duración: dos jornadas. Octubre de 1985. Certificado: Asistencia.

16. *RMN Y ESTRUCTURA MOLECULAR.*

79a. Reunión de la Asociación Física Argentina. Villa Giardino Pcia. de Córdoba. Dictado por: Dr. M. Ruiz de Aza FCEN UBA. Duración: 6 horas, Octubre de 1994. Certificado: Asistencia.

17. *FUNCIONALES DE LA DENSIDAD.*

XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Dictado por: Prof. Eduardo Ludeña (IVIC, Caracas Venezuela). Duración: una semana, ocho horas semanales, 1-09-02 al 8-9-02. Certificado: Asistencia.

18. Jornadas "MÉTODOS ANALÍTICOS, CROMATOGRAFICOS Y ELECTROFORETICOS. APLICACIONES FARMACEUTICAS, AMBIENTALES Y EN ALIMENTOS. STRESS OXIDATIVO", aprobadas por disposición 011/2007, realizadas los días 21 y 22 de Agosto de 2007 en la Universidad de la Cuenca del Plata, a cargo de: Dr. Arturo Vitale (UNLP-CONICET) y Dr. Alicia Pomilio (FBIB UBA-CONICET). Certificado: Asistencia.

19. *CAPACITACION DOCENTE SOBRE BASE DE DATOS ESPECIALIZADAS PROQUEST*, dictado por Ing. Esteban Okret. Fecha: 11-10-07. Certificado: Asistencia.

20. *UNA REFLEXION COMPARTIDA SOBRE LAS PRACTICAS EVALUATIVAS.* Dictado por Lic. Graciela Sanchez, Fecha: 19-04-08, 3-05-08; 17-05-08. Disposición 114/8. Certificado: Aprobación.

21. SEMINARIO "INTRODUCCION A LA GESTION DEL DESARROLLO DE PRODUCTOS".

dictado por el Dr. Rossetti German. Fecha: 29-05-08. Disposición 7/8. Certificado: Asistencia.

22. Seminario: A NEW REACTIVITY SELECTIVITY DESCRIPTOR: THEORETICAL STUDY AND APPLICATIONS TO THE SELECTIVITY OF SOME CHEMICAL REACTIONS. Dictado por el Dr. Andre Grand, 08 y 09 de Mayo de 2008. Res N 1414/08 FACENA. Certificado de Asistencia.

23. TALLER "ESTEREOQUIMICA. STRESS OXIDATIVO Y ANTIOXIDANTES NATURALES", aprobada por disposición 022/2009, realizado el 18 y 19 de agosto de 2009 en la Universidad de la Cuenca del Plata, a cargo de: Dr. Arturo Vitale (UNLP-CONICET) y Dr. Alicia Pomilio (FBIB UBA-CONICET). Certificado: Asistencia.

24. TALLER "NUEVAS ESTRATEGIAS DIDACTICAS-PEDAGOGICAS. TECNICAS PARA DINAMIZAR LA ENSEÑANZA-APRENDIZAJE. TECNICAS DE TRABAJO INTELECTUAL Y DINAMICAS DE GRUPO". dictado por el Dr. Duran Jara Diego Pablo. Fecha: 19-06-10. Certificado: Asistencia.

4. TRAYECTORIA DOCENTE

a. PROFESOR TITULAR

- Física II, Ingeniería en Alimentos, UNIVERSIDAD DE LA CUENCA DEL PLATA (Autorización definitiva otorgada por Decreto N 091/2006 del Poder Ejecutivo Nacional), Interino, 2005, 2006, 2007, 2008, 2009, 2010 y 2011 Res 012/05, Res 005/06, 036/07, 028/8, 055/09. Cargo ganado por concurso.

- Física I, Ingeniería en Alimentos, UNIVERSIDAD DE LA CUENCA DEL PLATA, (Autorización definitiva otorgada por Decreto N 091/2006 del Poder Ejecutivo Nacional) Interino, 2005, 2006, 2007, 2008, 2009, 2010 y 2011, Res 185/05, 232/06, 077/07, 147/08, 191/09. Cargo ganado por Entrevista.

b. PROFESOR ADJUNTO

-Mecánica Cuántica I, FACENyA UNNE, Profesor Adjunto con Dedicación Simple por Concurso RES. CD 289/11. Asimilada al Régimen de Dedicación Exclusiva por RES. 2795/12.

-Mecánica Cuántica I, FACENyA UNNE, Profesor Adjunto con Dedicación Simple contratado por Concurso RES. CD 590/09, renovado por RES. CD. 2149/10.

-Mecánica Calor y Termodinámica, FACENyA UNNE, Adscripto como Profesor Adjunto por RES. CD 1269/07, Aprobación de informe por RES. CD 607/08.

-Física Computacional: FACENyA UNNE, Adscripto como Profesor Adjunto por RES. CD 2654/06, Aprobación de informe por RES. CD 789/07.

c. JEFE DE TRABAJOS PRACTICOS

-Mecánica Calor y Termodinámica, FACENyA UNNE, Ordinario. 12-06 al 12-14. RES. CD 0468/10.

-Mecánica Analítica, FACENyA UNNE, carga docente segundo cuatrimestre 2009. RES. CD 0553/09.

-Calor y Termodinámica y Laboratorio de Calor y Termodinámica, FACENyA UNNE, por concurso de Titulo y Antecedentes. RES. CD 337/02, 678/02. 20/06/02 al 31/12/06.

-Electricidad, Magnetismo, Óptica y Sonido (2002) y Mecánica Calor y Termodinámica (2003 y 2004) FACENyA UNNE, por concurso de Titulo y Antecedentes RES. CD 337/02, 678/02. 20/06/02 al 31/12/06.

-Física I (MECANICA), FACENyA UNNE, Ordinario. 03-93 al 08-01. RES. CD 028/93 y CS 120/97. Desde el año 1998 con Dedicación Exclusiva (ganada por concurso) para realizar tareas de Investigación en el Marco del Programa de Mejoramiento de las Dedicaciones de la Universidad Nacional del Nordeste, Res. CS 826/97. Se discontinua por razones personales de índole familiar.

-Física I (MECANICA), FACENyA UNNE, Interino. 04-90 al 03-93.

d. AYUDANTE DE PRIMERA

-Física I (MECANICA), FACENyA UNNE. Interino, 01-90 al 04-90. Res. CD 345/89,340/89, 337/90, 128/91.

e. AYUDANTE DE SEGUNDA.

Otros cargos en FACENyA UNNE (como Ayudante de Docencia de Segunda):

4. Cátedra: Física I (Mecánica). 06/88 a 01/90. RES 134/88, 427/88.

3. Cátedra: Física V (Física Moderna). 11/87 a 11/88. RES 331/87, 045/89.

2. Cátedra: Física II (Óptica y Sonido). 10/85 a 10/86. RES 1007/85, 330/87.

1. Cátedra: Física IV (Electricidad y Magnetismo). 09/85 a 09/86. RES 879/85.

f. OTROS

-Colaboración en el dictado de la Asigantura Mecánica Analítica. Res. 553/09.

-Dictado de clases teóricas (bajo supervisión del Prof. Titular de la Cátedra) de la materia MECANICA CALOR Y TERMODINAMICA Primer cuatrimestre de 2003, 2004 y 2005.

-A cargo del desarrollo de las clases de Trabajos Prácticos de un grupo de alumnos del primer año de la carrera de Ingeniería Electricista y el dictado de algunos temas designados por la misma cátedra (Situaciones problemáticas en Cinemática y Movimiento Armónico). Período: Primer cuatrimestre de 2001.

-Desarrollo de los prácticos de Mecánica II

Período: primer cuatrimestre de 1997 y 1998.

-Dictado de clases teóricas (bajo supervisión del Prof. Titular de la Cátedra) de la materia Mecánica II.1998.

-Dictado de clases teóricas (bajo supervisión del Prof. Titular de la Cátedra) de la materia Física I (Mecánica).1996.

-Desarrollo de los prácticos de Mecánica I

Período: primer cuatrimestre de 1990.

g. DOCENCIA EN POSGRADO

-Seminario: CARACTERIZACIÓN TEÓRICA DE QUINONAS Y SEMIQUINONAS DE (-)-EPICATEQUINA Universidad de la Cuenca del Plata, Disertante en colaboración con Ing. Erika Bentz y María Celia Perez Schmit, Duración: 3 horas. 14 de abril de 2011.

-Seminario: ESTUDIO DE LA REACCIÓN DE QUERCETINA CON LOS RADICALES SUPERÓXIDO ($\cdot\text{O}_2^-$) Y OXIDRILLO ($\cdot\text{OH}$). Disertante en colaboración con Ing. Erika Bentz y María Celia Perez Schmit, Universidad de la Cuenca del Plata, Duración: 3 horas. 12 de mayo de 2011.

-Curso de posgrado: ELEMENTOS DE QUIMICA CUANTICA. Disertante. Disposición N 025/2008. Duración del curso: 96 hs. presenciales, 48 hs. no presenciales. 10/08- 04/09.

-Dictado de todas las clases teóricas y parte de las clases prácticas del SEMINARIO DE ACTUALIZACION DISCIPLINAR I (para profesores de Física) correspondiente al plan de estudio de la carrera de LICENCIATURA EN ENSEÑANZA DE LAS CIENCIAS EXPERIMENTALES de la FACENA. Res. 560/03. Atención de clases de Tutoría.

Duración total del curso: 60 horas, 3-04-01 al 7-04-01.

-Dictado en colaboración del curso "Química Cuántica para Químicos y Bioquímicos" destinado a post-graduados como: Licenciados en Química, Bioquímicos, Farmacéuticos y egresados de carreras afines. Res. C.D. 410/99.

5. PRODUCCION EN DOCENCIA

a. INNOVACION PEDAGÓGICA (OTRA ACTIVIDAD PEDAGÓGICA CON APROBACIÓN INSITUCIONAL).

-Coordinadora Disciplinar en el Taller "Articulación Universidad-Nivel Medio / Polimodal, realizado el día 22 de abril de 2006, aprobado por Disposición N° 006/06 de la UNIVERSIDAD DE LA CUENCA DEL PLATA (Autorización definitiva otorgada por Decreto N 091/2006 del Poder Ejecutivo Nacional).

-Participación en "Seminario: El laboratorio en la enseñanza de la Física". Jornadas de actualización y profundización de los conceptos de los núcleos centrales a desarrollar en el dictado de las asignaturas: Mecánica Calor y Termodinámica, Calor y Termodinámica, Laboratorio de Calor y Termodinámica y Termodinámica. Destinado a los docentes afectados al dictado de las mencionadas materias. Departamento de Física. Área Mecánica y Termodinámica Estadística, segundo cuatrimestre 2003. Universidad Nacional del Nordeste. Facultad de Ciencias Exactas, Naturales y Agrimensura. RESOLUCIÓN N° 2618/03 C.D.

b. MATERIAL DIDÁCTICO SISTEMATIZADO:

- GUIAS DE PROBLEMAS DE MECANICA CUANTICA I.
- GUIAS DE PROBLEMAS DE FISICA I. (En colaboración)
- GUIAS ESPECIALIZADAS (para alumnos de las Licenciaturas en Química y en Física) de LABORATORIOS DE FISICA I (MECANICA). (En colaboración)
- GUIAS DE TRABAJOS PRACTICOS DE LA MATERIA MECANICA I.
- GUIAS DE TRABAJOS PRACTICOS DE LA MATERIA MECANICA II.
- GUIAS DE PROBLEMAS RESUELTOS DE FISICA I (MECANICA). (En colaboración)
- GUIAS DE PROBLEMAS DE LA MATERIA MECANICA CALOR Y TERMODINAMICA 2003 y 2004 para los temas de Mecánica.
- GUIA DE TRABAJOS PRACTICOS DE LABORATORIO DE LA MATERIA MECANICA CALOR Y TERMODINAMICA 2003. (En colaboración)
- GUIA DE TRABAJOS PRACTICOS DE LA MATERIA LABORATORIO CALOR Y TERMODINAMICA año 2003. (En colaboración)
- GUIA DE TRABAJOS PRACTICOS DE LABORATORIO DE LA MATERIA MECANICA CALOR Y TERMODINAMICA 2004. (En colaboración)

6. INTEGRANTE DE JURADOS Y ACTIVIDADES DE EVALUACIÓN

a. INTEGRANTE TRIBUNAL DE CONCURSO DOCENTE:

-Integrante Suplente Jurado Concurso dispuesto por Res. N° 0268/12 C.D., para proveer de un cargo de AUXILIAR DOCENTE DE PRIMERA para la Cátedra MECANICA CALOR Y TERMODINAMICA de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, UNNE.

-Jurado Titular del Jurado para la evaluación de Carrera Docente de cargos de Profesor Adjunto por Res. N° 011/12 C.S., para evaluar a un docente en desempeño de un cargo de PROFESOR ADJUNTO con dedicación EXCLUSIVA en la Asignatura MECANICA Y TERMODINAMICA de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, UNNE. Fecha clase de oposición: 29/05/12.

-Jurado Titular del Jurado para la evaluación de Carrera Docente de cargos de Auxiliares de Docencia dispuesto por Res. N° 0963/11 C.D., para evaluar a un docente en desempeño de una

JEFATURA DE TRABAJOS PRACTICOS con Dedicación Semiexclusiva en la Asignatura MECANICA ANALITICA de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, UNNE. Fecha clase de oposición: 23/2/12.

-Integrante Titular Jurado Concurso dispuesto por Res. N° 0535/11 C.D., para proveer de un cargo de JEFE DE TRABAJOS PRACTICOS para la Cátedra ELECTRICIDAD MAGNETISMO OPTICA Y SONIDO de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, UNNE. Fecha clase de oposición: 27/10/11.

-Integrante Titular Jurado Concurso dispuesto por Res. N° 0535/11 C.D., para proveer de un cargo de AUXILIAR DOCENTE DE PRIMERA para la Cátedra ELECTRICIDAD MAGNETISMO OPTICA Y SONIDO de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, UNNE. Fecha clase de oposición: 10/11/11.

-Integrante Titular Jurado Concurso dispuesto por Res. N° 0069/08 C.D., para proveer de un cargo de AUXILIAR DOCENTE DE PRIMERA para la Cátedra de MECANICA CALOR Y TERMODINAMICA de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, UNNE. Fecha clase de oposición: 15/05/08.

-Miembro Titular de la comisión asesora para el concurso de Adscripciones en las asignaturas: "Química Física II" "Estructura de la materia I" dispuesto por Res. N° 194/2004 C.D.

-Miembro Titular de la comisión asesora para el concurso de Adscripciones en las asignaturas: "Química Física II" "Estructura de la materia I" y "Estructura de la materia II" dispuesto por Res. N° 476/03 C.D.

-Concurso dispuesto por Res. N° 246/98 C.D., para proveer dos cargos de JEFE DE TRABAJOS PRACTICOS para la Cátedra de FISICA III de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, UNNE. Fecha clase de oposición: 12/03/99.

-Concurso dispuesto por Res. N° 246/98 C.D., para proveer de un cargo de JEFE DE TRABAJOS PRACTICOS para la Cátedra de FISICA TEORICA II de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, UNNE. Fecha clase de oposición: 11/03/99.

b. INTEGRANTE DE OTRAS COMISIONES EVALUADORAS DE ACTIVIDADES CIENTÍFICAS, ACADEMICAS Y TÉCNICAS:

-EVALUADOR DE PUBLICACIONES PRIMARIAS DE REVISTAS INTERNACIONALES.

-Referatos solicitados por la Oficinas Editoriales de las revistas

Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. Elsevier Editorial.

The Journal of Physical Chemistry.

Journal of Molecular Structure.

Journal of Computational Chemistry.

Journal of Molecular Sciences IJMS. Section: Physical Chemistry, Theoretical and Computational Chemistry.

-Evaluador de trabajos científicos presentados por la Universidad de la Cuenca del Plata en el IX Salão de Iniciação Científica - Ed. Internacional, VIII Mostra Científica - Ed. Internacional y II Feira de Extensão - Ed. Internacional PUCRS/UNIPAMPA/UCPRA del 3 a 16 de noviembre 2009, Uruguayana, Brasil. RES N 284/2009, Universidad de la Cuenca del Plata.

-Miembro de la comisión de selección de becarios del proyecto IP-PRH N 79/035-2008, difusión de la convocatoria, recepción de curriculums, entrevistas preliminares, evaluación de antecedentes, y emisión del dictamen final. Encomendada a estas funciones por disposición de la Facultad de

Ingeniería N 016/2008, Universidad de la Cuenca del Plata.

-Evaluación de los trabajos científicos de la Sección CIENCIAS EXACTAS para ser publicados en las actas de la REUNION DE COMUNICACIONES CIENTIFICAS Y TECNOLOGICAS DE LA UNNE, 1999, presentados por los docentes y/o investigadores de la FACENA UNNE (funciones cumplidas como Miembro de la COMISION DE ORGANIZACION de la mencionada Reunión, RES. NO 2349/99).

7. INVESTIGACION CIENTÍFICA O DESARROLLO TECNOLÓGICO

a. DIRECCION DE PROGRAMA

-Director del programa STRESS OXIDATIVO-ALIMENTOS FUNCIONALES ANPCyT-UCP, Res CS N 276/08, UCP y Res 201/08 Directorio ANPCyT.

b. DIRECTOR DE PROYECTOS DE INVESTIGACION

Proyecto de Investigación: "*Topología de la descomposición de la densidad electrónica en contribuciones de apareamiento y cumulante (efectos de correlación electrónica)*". PI F014-11, SECyT-UNNE. Periodo de desarrollo: 1-1-2012, 31-12-2013. RES. C.S. Nº 852/11.

Proyecto IP-PRH N 79/035-2008 Procianidinas A y B en la preservación de jugos naturales. Stress Oxidativo. Programa: IP-PRH 2007, Ideas-Proyecto: Proyectos de radicación de investigadores y formación de Doctores en áreas estratégicas. FONCyT ANPCyT. Periodo 2008-2012.

Proyecto "*Procianidinas A y B en la preservacion de jugos naturales. Stress oxidativo*", UNIVERSIDAD DE LA CUENCA DEL PLATA, Res N 276/08. Periodo 2008-2012.

Proyecto "*Triptaminas, precursores y derivados, su bioactividad y propiedades en alimentos. Stress oxidativo*". UNIVERSIDAD DE LA CUENCA DEL PLATA. Res N 276/08. Periodo 2008-2012.

Proyecto "*Aspectos locales y no locales de la distribución electrónica. Modelo de enlaces complejos*", UNIVERSIDAD DE LA CUENCA DEL PLATA, RES 048/06, 018/07, y 277/08. 2006-2009.

Proyecto "*Estudio de Procianidinas A y B*", UNIVERSIDAD DE LA CUENCA DEL PLATA, Categoría: Investigadora Científica Superior. Res N^o 245/2005, 031/06, 048/07. Periodo 2005-2008

c. INTEGRANTE DE PROYECTOS DE INVESTIGACION

Proyecto de Investigación: "*Efectos de muchos cuerpos en sistemas extendidos. Aplicaciones en mecánica estadística y en teoría de estructura electrónica*" (PIP No 5098/05). CONICET. PIP No. 11220090100061. Período: 2010-2012.

Proyecto de Investigación; "*Efectos de muchos cuerpos en sistemas extendidos. Aplicaciones en mecánica estadística y en teoría de estructura electrónica*" (X-017). Universidad de Buenos Aires. Departamento de Física. Período: 2008-2010

Proyecto de Investigación: "*Efectos de muchos cuerpos en sistemas extendidos. Aplicaciones en mecánica estadística y en teoría de estructura electrónica*" (PIP No 5098/05). CONICET. Período: 2005-2006.

Proyecto de Investigación: "*Efectos de muchos cuerpos en sistemas extendidos. Aplicaciones en mecánica estadística y en teoría de estructura electrónica*" (X-024). Universidad de Buenos Aires. Departamento de Física. Período: 2004-2007.

Proyecto Incentivado 17F079 "*Catálisis Computacional: Topología de la Densidad de Carga Electrónica en Carbocationes y Estudio de Interacciones*". PI 640. SECyT-UNNE 01/07/01-01/07/2004.

Proyecto Incentivado 17F050 "*Estudio de Interacciones intra e intermoleculares en base a la distribución topológica de la densidad electrónica*" PI 426. SECyT-UNNE 01/05/99-01/07/2001.

"*Efectos electrónicos relativistas y de no conservación de la paridad en propiedades moleculares eléctricas y magnéticas de respuesta lineal*". PI Nº 307, SECyT UNNE. Periodo: marzo 1996- septiembre 1998. RES C.S. Nº 632/96.

"*Mecanismos electrónicos que definen los tensores de acoplamiento indirecto entre espines nucleares y de apantallamiento magnético de RMN*". PI Nº228, SECyT-UNNE. Periodo de desarrollo: 1995. RES. C.S. Nº 307/95

"*Mecanismos electrónicos que definen los parámetros espectroscópicos de la Resonancia Magnética Nuclear*" PI Nº33/02/03, SECyT-UNNE. Periodo de desarrollo: 30 de junio 1992 a 30 de junio 1994.

d. BECARIO. BECAS EN ORDEN CRONOLOGICO DE OBTENCION

1. Beca de pregrado de la Secretaría General de Ciencia y Técnica UNNE. Tema: "*ADITIVIDAD EN COMPUESTOS MULTICICLICOS PARA EL ACOPLAMIENTO DE RMN J(13C-13C)*". Período: 08/88 al 08/89.-

2. Beca de Iniciación del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET). Tema: "*ESTUDIO DE LA ASIMETRIA EN ACOPLAMIENTOS DE ESPIN NUCLEAR J(13C-19F) PARA DIFERENTES COMPUESTOS MOLECULARES*". Período: 07/90 al 03/92.

3. Beca de Perfeccionamiento del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET). Tema: "*EFFECTOS ELECTRONICOS SOBRE LOS PARAMETROS DE RMN EN MOLECULAS QUE CONTIENEN ATOMOS PESADOS*". Período: 04/92 al 03/94.

4. Beca Post-doctoral del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET). Tema: "*APLICACIONES DE LOS METODOS CLOPPA-X (X = MNDO, AM1 Y PM3) AL NIVEL RPA Y TDA EN FAMILIAS DE COMPUESTOS QUE INCLUYAN COMPUESTOS ORGANO-METALICOS NO SATURADOS*". Período: 04/95 al 04/96.

e. SUBSIDIOS PARA INVESTIGACION

-Apoyo económico otorgado por la Sria. Gral. de Ciencia y Técnica de la Universidad Nacional del Nordeste, para el desarrollo del Proyecto acreditado por Resolución Nº 2265/2012.

-Subsidio para la Adecuación y/o Mejora de Infraestructura PRAMIN 2008. Presentación correspondiente al PFDT Nº 54 financiada por Resolución Directorio ANPCyT Nº 160/2008, en el marco de la convocatoria exclusiva para las Instituciones Beneficiarias que resultaron adjudicatarias de proyectos correspondientes a las convocatorias PME 2006, PME IP-PAE 2006 y IP-PRH 2007. Construcción de un laboratorio.

-Programa: IP-PRH 2007 –Ideas-Proyecto: Proyectos de radicación de investigadores y formación de Doctores en áreas estratégicas. FONCyT ANPCyT. Otorgado 2008. Monto: dos becas doctorales por cuatro años y gastos asociados a cursos y presentaciones a congresos de los becarios.

8. PRODUCCION EN INVESTIGACION CIENTÍFICA

a. PUBLICACIONES CON REFERATO

25. R. M. Lobayan , M. C. Perez Schmit, A. Jubert, A. Vitale, *SOLVENT EFFECTS ON THE CONFORMATIONAL SPACE OF TRYPTAMINE. STRUCTURAL AND ELECTRONIC ANALYSIS*. Submitted 2012.
24. N. Comelli, P. Duchowicz, R. M. Lobayan, A. Jubert, E. Castro, *QSPR STUDY OF VALPROIC ACID AND ITS FUNCTIONALIZED DERIVATIVES*, *Molecular Informatics*, 31, 181-188, 2011.
23. R. M. Lobayan, E. N. Bentz, Alicia H. Jubert, Alicia B. Pomilio, *CHARGE DELOCALIZATION EFFECTS INDUCED BY SUBSTITUTION IN Z ISOMERS OF (4 α →6'',2 α →O→1'')-PHENYLFLAVANS SUBSTITUTED WITH R=H, OH AND OCH₃. EFFECTS ON BOND DISSOCIATION ENTHALPIES AND IONIZATION POTENTIALS*. Submitted.
22. R. M. Lobayan , M. C. Perez Schmit, A. Jubert, A. Vitale, *CONFORMATIONAL AND STEREOELECTRONIC INVESTIGATION OF TRYPTAMINE. AN AIM/NBO STUDY*. DOI: 10.1007/s00894-011-1271-5, *J. of Molecular Modeling*, 2011, 18:2577–2588.
21. R. M. Lobayan, E. N. Bentz, Alicia H. Jubert, Alicia B. Pomilio, *STRUCTURES AND ELECTRONIC PROPERTIES OF Z ISOMERS OF (4 α →6'',2 α →O→1'')-PHENYLFLAVANS SUBSTITUTED WITH R=H, OH AND OCH₃ CALCULATED IN AQUEOUS SOLUTION WITH PCM SOLVATION MODEL*. DOI: 10.1007/S00894-011-1188-Z, 18, 1667-1676, *J. of Molecular Modeling*, 2012.
20. R. M. Lobayan, R. C. Bochicchio, A. Torre, L. Lain, *ELECTRONIC STRUCTURE AND THE EFFECTIVELY UNPAIRED ELECTRON DENSITY TOPOLOGY IN VERTEX CLOSO-BORANES: NONCLASSICAL TWO ELECTRON THREE-CENTER BONDING*, *J. Chem. Theory Comput.* 7, 979–987, 2011.
19. N. C. Comelli, R. M. Lobayan, Alicia H. Jubert, Eduardo A. Castro. *QUANTUM MECHANICAL DESCRIPTION OF THE INTRINSIC STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF VALPROIC ACID AND NEW DERIVATIVES*. *J. Phys. Chem. A.* 115, 1686–1700, 2011.
18. M. C. Perez Schmit, A. Jubert, A. Vitale, R. M. Lobayan, *ELECTRONIC STRUCTURE AND CONFORMATIONAL PROPERTIES OF 1H-INDOLE-3-ACETIC ACID*, *J. of Molecular Modeling*, 17, 1227-1239, 2010.
17. R. M. Lobayan , M. C. Perez Schmit, A. Jubert, A. Vitale, *THEORETICAL STUDIES AND VIBRATIONAL SPECTRA OF 1H-INDOLE-3-ACETIC ACID CONFORMERS. EXPLORATORY CONFORMATIONAL ANALYSIS OF DIMERIC SPECIES*. *J. of Molecular Modeling*, 17, 1381-1392, 2010.
16. E. N. Bentz, Alicia H. Jubert, Alicia B. Pomilio, R. M. Lobayan, *THEORETICAL STUDY OF Z ISOMERS OF A-TYPE DIMERIC PROANTHOCYANIDINS SUBSTITUTED WITH R=H, OH AND OCH₃. STABILITY AND REACTIVITY PROPERTIES*, *J. of Molecular Modeling*, 16, 1895-1909, 2010.
15. R. M. Lobayan, R. C. Bochicchio, D. R. Alcoba, L. Lain, A. Torre, *TOPOLOGY OF THE EFFECTIVELY PAIRED AND UNPAIRED ELECTRON DENSITIES IN OPEN SHELL SYSTEMS*, *J. Phys. Chem. A*, Vol. 114, 1200-1206, 2010, 6 páginas.
14. R. M. Lobayan, R. C. Bochicchio, L. Lain, A. Torre, *TOPOLOGY OF THE EFFECTIVELY PAIRED AND UNPAIRED ELECTRON DENSITIES FOR COMPLEX BONDING PATTERNS: THE THREE-CENTER TWO-ELECTRON BONDING CASE*, *J. Chem. Theory Comput.* 2009, 5, 2030–2043, 13 páginas
13. R. M. Lobayan, Alicia H. Jubert, Martín G. Vitale, Alicia B. Pomilio, *CONFORMATIONAL AND ELECTRONIC (AIM/NBO) STUDY OF UNSUBSTITUTED A-TYPE DIMERIC PROANTHOCYANIDIN*, *J. of Molecular Modeling*, DOI 10.1007/s00894-008-0389-6, 2008, 15, 537, 2009.
12. R.M.Lobayan, R.Bochichio, L.Lain, A.Torre, *LAPLACIAN FIELD OF THE EFFECTIVELY UNPAIRED ELECTRON DENSITY: DETERMINATION OF MANY BODY EFFECTS ON ELECTRON DISTRIBUTIONS*. *J. Chem. Phys. Chem. A* 111, 3166, 2007. 7 páginas.
11. R.M.Lobayan, R.Bochichio, L.Lain, A.Torre, *ELECTRON DENSITY TOPOLOGY IN MOLECULAR SYSTEMS: PAIRED AND UNPAIRED DENSITIES*. *J. Chem. Phys.* 123, 144116, 2005. 9 páginas.

10. R.M.Lobayan, G.L.Sosa, A. H. Jubert, N.M.Peruchena, *SOME ELECTRONIC CORRELATION EFFECTS IN THE TOPOLOGICAL ANALYSIS OF THE LAPLACIAN OF THE ELECTRONIC CHARGE DENSITY IN C-n-BUTONIUM CATIONS*. J. Phys. Chem. A. 109, 181-190, 2005. 10 paginas
9. N.G.Fidanza, G.L.Sosa, R.M.Lobayan, N.M.Peruchena. *TOPOLOGICAL ANALYSIS OF THE ELECTRONIC CHARGE DENSITY IN NUCLEOSIDE ANALOGUES DERIVATIVES OF THE AZT. EFFECTS OF INTRAMOLECULAR H-BONDS*. J. Molec. Struct. (Theochem) 722, 65-78, 2005. 14 paginas.
8. R.M.Lobayan, G.L.Sosa, A. H. Jubert, N.M.Peruchena, *EXPLORATORY TOPOLOGICAL STUDY OF THE LAPLACIAN OF THE ELECTRON DENSITY IN n-BUTONIUM CATIONS*. J. Phys. Chem. A, 108, 4347-4356, 2004. 9 paginas.
7. N.G.Fidanza, M. Zamora, F.D.Suvire, G.L.Sosa, R.M.Lobayan, R.D.Enriz, N.M.Peruchena, *ESTUDIO CONFORMACIONAL Y ELECTRONICO DE LA LAMIVUDINA (3TC)*. FACENA (Revista con referato de la FACENyA, UNNE). Tomo 17, 79-94 (2003). 15 paginas.
6. N.G.Fidanza, F.D.Suvire, G.L.Sosa, R.M.Lobayan, R.D.Enriz, N.M.Peruchena, *A SEARCH FOR C-H...O TYPE HYDROGENS BONDS IN LAMIVUDINE (3TC). AN EXPLORATORY CONFORMATIONAL AND ELECTRONIC ANALYSIS*. J. Molec. Struct. (Theochem). 543, 185-193, 2001. 8 paginas.
5. R.M.Lobayan de Bonczok, G.A.Aucar, *NMR-K REDUCED COUPLING CONSTANT CALCULATION WITHIN THE CLOPPA-PM3 APPROACH. II: SHORTCOMINGS AND HOW TO OVERCOME THEM*. J. Molec. Struct. (Theochem), 452, 13-23, (1998). 10 paginas.
4. R.M.Lobayan de Bonczok, G.A.Aucar, *NMR-K REDUCED COUPLING CONSTANT CALCULATION WITHIN THE CLOPPA-PM3 APPROACH. I: GENERAL RESULTS*. J. Molec. Struct. (Theochem), 452, 1-11, (1998). 10 páginas.
3. R.M.Lobayan, G.A.Aucar, R.H.Contreras, *INTERPRETACION DEL SIGNO DE LA CONSTANTE DE ACOPLAMIENTO INDIRECTO ENTRE ESPINES NUCLEARES SEGUN EL MODELO CLOPPA*. FACENA (Revista con referato de la FACENyA, UNNE), Tomo 12, 15-31, (1996). 16 paginas.
2. C.G.Giribet, M.C.Ruiz de Azua, R.H.Contreras, R.M.Lobayan de Bonczok, G.A.Aucar, S.B.Gomez, *POLARIZATION PROPAGATOR ANALYSIS OF THE THROUGH-SPACE TRANSMISSION OF THE SPIN-SPIN COUPLING CONSTANTS BY OVERLAP OF LONE PAIRS*. J. Molec. Struct. (Theochem), 300, 467-477, (1993). 10 paginas.
1. R.H.Contreras, M.C.Ruiz de Azua, C.G.Giribet, G.A.Aucar y R.M.Lobayan de Bonczok, *POLARIZATION PROPAGATOR ANALYSIS OF SPIN-SPIN COUPLING CONSTANTS*. Artículo de Review. J. Molec. Struct. (Theochem), 284, 249-269, (1993). 20 paginas.

b. PUBLICACIONES CON EVALUACION DE COMISIONES ORGANIZADORAS DE EVENTOS CIENTIFICOS

19. E. N. Benzt, R.M.Lobayan, *"Contribución diferencial de los distintos confórmers Z de (4→6'', 2α→O→1'')- fenilflavanos sustituidos según R=H, OH Y OCH₃ y corrimientos químicos en espectros de Resonancia Magnética Nuclear (RMN)"* Resumen extendido publicado en Libro de Resúmenes de la II Jornadas de Investigación en Ingeniería del NEA y Países Limítrofes, junio de 2012, ISBN: N° ISBN:978-950-42-0142-7. Universidad Tecnológica Nacional Facultad Regional Resistencia, Chaco.
18. M. C. Perez Schmidt, A. Vitale, A. H. Jubert y R. Lobayan, *"Análisis Conformacional Exploratorio y Estudio Electrónico de la Triptamina en vacío"*. Resumen extendido publicado en Libro de Resúmenes de la I Jornada Regionales de Investigación en Ingeniería, noviembre de 2010, ISBN: 978-950-42-0130-4, Universidad Tecnológica Nacional Facultad Regional Resistencia, Chaco.
17. M. C. Perez Schmidt, A. Vitale, A. H. Jubert y R. Lobayan, *"Análisis Teórico Comparativo de la Capacidad Captadora de Radicales Libres de los Confórmers del Ácido Indolacético"*. Resumen

extendido publicado en Libro de Resúmenes "XIII JORNADAS DE CIENCIA Y TECNOLOGIA", Universidad Nacional de Formosa, Formosa.

16. E. N. Benzt, A. B. Pomilio, A. H. Jubert y R. Lobayan, "Análisis conformacional y de las barreras rotacionales en Proantocianidina Dimérica Tipo A sustituida con $R = OH$ y $R = OCH_3$ " Resumen extendido publicado en Libro de Resúmenes de la I Jornada Regionales de Investigación en Ingeniería. noviembre de 2010, ISBN: 978-950-42-0130-4, Universidad Tecnológica Nacional Facultad Regional Resistencia, Chaco.

15. E. N. Benzt, A. B. Pomilio, A. H. Jubert y R. Lobayan, "Variación del Momento Dipolar molecular en vacío y en solución en el espacio conformacional de Proantocianidinas Diméricas Tipo A sustituidas con $R = H$, OH y OCH_3 ". Resumen extendido publicado en Libro de Resúmenes "XIII JORNADAS DE CIENCIA Y TECNOLOGIA", Universidad Nacional de Formosa, Formosa.

14. M. C. Perez Schmidt, A. Vitale, A. H. Jubert y R. Lobayan, "Especies Radicales del Ácido Indolacético. Estudio Estructural y Electrónico de su Espacio Conformacional". Resumen extendido publicado en: CD del XXVIII Congreso Argentino de Química (2010).

13. E. N. Benzt, A. B. Pomilio, A. H. Jubert y R. Lobayan, "Efecto del solvente en el estudio de las propiedades electrónicas de proantocianidinas diméricas tipo A sustituidas". Resumen extendido publicado en: CD del XXVIII Congreso Argentino de Química (2010).

12. R.M. Lobayan, A. B. Pomilio y A. H. Jubert "Estudio AIM-NBO de enantiomeros 2S4S y 2R4R de procianidinas tipo A", Revista electrónica Hífen, Uruguiana, v. 32 - nº 61 - I Semestre -ISSN 1983-6511, Pontificia Universidade Católica do Rio Grande do Sul (PUCRS) (2008).

11. R.M.Lobayan, R.Bochichio, A.Torre, L.Lain, "Información contenida en las densidades apareadas y desapareadas. Interacciones deficientes en electrones en boranos", Revista electrónica Hífen, Uruguiana, v. 32 - nº 61 - I Semestre - ISSN 1983-6511, Pontificia Universidade Católica do Rio Grande do Sul (PUCRS) (2008).

10. Rosana M. Lobayan, Diana Gregoret, Alicia B. Pomilio, Alicia H. Jubert, "Estudio conformacional y electrónico de enantiomeros 2S4S y 2R4R de procianidinas tipo A". Resumen extendido publicado en: CD de XXVII Congreso Argentino de Química (2008).

9. *Formulación local de las densidades apareadas y desapareadas en sistemas moleculares. Aplicaciones a la molécula N2 en conformaciones de equilibrio y fuera de el.* R. Lobayan,. Artículo de 4 pag. Publicado en: Actas de la Reunión de Comunicaciones Científicas y Tecnológicas de la Universidad del Nordeste, IV, (2005).

Publicación electrónica: <http://www.unne.edu.ar/Web/cyt/com2005> trabajo de Exactas E-007.

8. *Effects of Coulomb Correlation at MP2 Level in the Laplacian of the Electronic Charge Density in 2-C-n-Butonium.* R. Lobayan, G.L.Sosa, A.H. Jubert y N.M. Peruchena, Artículo de 4 pag. Publicado en: Actas de la Reunión de Comunicaciones Científicas y Tecnológicas de la Universidad del Nordeste, IV, (2004).

Publicación electrónica: <http://www.unne.edu.ar/Web/cyt/com2004/8-Exactas/E-037.pdf>.

7. *Máximos locales en las capas de valencia de Carbono en cationes n-butonios. Topología del Laplaciano de la Densidad de Carga Electrónica.* R. Lobayan, G.L.Sosa, A.H. Jubert y N.M. Peruchena, Artículo de 4 pag. Publicado en: Actas de la Reunión de Comunicaciones Científicas y Tecnológicas de la Universidad del Nordeste, IV, (2002).

Publicación electrónica: <http://www.unne.edu.ar/cyt/2002/08-Exactas/E-025.pdf>.

6. *Analisis Conformacional del 3TC.* N. G. Fidanza, F. Survire, R. Lobayan, G. L. Sosa, R.D. Enriz y N. M. Peruchena, Artículo de 4 pag. Publicado en: Actas de la Reunión de Comunicaciones Científicas y Tecnológicas (2001). Editorial: Universidad Nacional del Nordeste.

Publicación electrónica: <http://www.unne.edu.ar/cyt/2001/8-exactas/e-023.pdf>

5. *Análisis conformacional y electrónico del 3TC (lamivudina). Estabilizaciones producidas por*

enlaces de hidrógeno. N. G. Fianza, F. Survire, R. Lobayan, G. L. Sosa, R.D.Enriz y N. M. Peruchena, Artículo de 4 pag. Publicado en: Actas de la Reunión de Comunicaciones Científicas y Tecnológicas (2000).Editorial: Universidad Nacional del Nordeste.

Publicación electrónica: <http://www.unne.edu.ar/cyt/2000/8-exactas/e-pdf/e-004.pdf>

4. *Análisis topológico de la distribución de la densidad electrónica semiempírica en clusters que simulan el sitio ácido de una zeolita*, R. M. Lobayan, N. M. Peruchena y A. Jubert, Artículo de 4 pag. Publicado en: Actas de la Reunión de Comunicaciones Científicas y Tecnológicas (2000). Editorial: Universidad Nacional del Nordeste.

Publicación electrónica:<http://www.unne.edu.ar/cyt/2000/8-exactas/e-pdf/e-045.pdf>

3. *Corrección a la distribución de la densidad electrónica semiempírica por adición de Densidades Electrónicas Atómicas*, R. M. Lobayan, N. Okulik, N M. Peruchena, A Jubert y A Sierraalta, Artículo de 4 pag. Publicado en: Actas de la Reunión de Comunicaciones Científicas y Tecnológicas (2000).Editorial: Universidad Nacional del Nordeste.

Publicación electrónica: <http://www.unne.edu.ar/cyt/2000/8-exactas/e-pdf/e-044.pdf>

2. *Aplicabilidad del análisis topológico de la densidad de carga a nivel semiempírico en el antiviral lamivudina (3TC)*. N. G. Fianza, R. Lobayan, G. L. Sosa, N. M. Peruchena, Artículo de 4 pag. Publicado en: Actas de la Reunión de Comunicaciones Científicas y Tecnológicas Tomo IV, (8) 189-192, (1999). ISBN 950-656-047-1. Editorial: EUDENE, Editorial Universitaria de la Universidad Nacional del Nordeste, Corrientes, Argentina, Diciembre de 1999.

Publicación electrónica: <http://www.unne.edu.ar/cyt/exactas/e-0.50.pdf>

1. *Desarrollo en serie del Propagador de Polarización al nivel RPA y esquema de Popple Santry*, C.Gomez, P.Provasi, E.Botek, R.M.Lobayan y G.A.Aucar, Artículo de 4 pag. Publicado en: Actas de la Reunión de Comunicaciones Científicas y Tecnológicas Tomo IV, (8) 33-36, (1998). ISBN 950-656-034-X.

Editorial: EUDENE, Editorial Universitaria de la Universidad Nacional del Nordeste, Corrientes, Argentina, Diciembre de 1998.

c. PRESENTACIONES EN REUNIONES CIENTIFICAS

62. R.M.Lobayan, R.Bochichio, *“Densidades electrónicas apareada y efectivamente desapareada. Enlaces (2c-3e) en sistemas orgánicos: un desafío”*. 97ª Reunión Nacional de la Asociación Física Argentina, del 25 al 28 de septiembre de 2012. Villa Carlos Paz, Córdoba.

61. M. C. Perez Schmidt, A. Vitale, A. H. Jubert y R. Lobayan, *“EFECTO DEL SOLVENTE SOBRE LA ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE LA TRIPTAMINA Y SU RELACIÓN CON LOS POTENCIALES DE IONIZACIÓN”*. XXIX Congreso Argentino de Química Mar del Plata 3 al 5 de octubre de 2012.

60. E. N. Bentz, A. B. Pomilio, A. H. Jubert y R. Lobayan, *“EFECTO DE LA SUSTITUCION CON R=OH Y R=OCH₃ SOBRE LAS ENTALPIAS DE DISOCIACION DE ENLACE Y LOS POTENCIALES DE IONIZACION EN LOS ISOMEROS Z DE (4 α →6'', 2 α →O→1'')-FENILFLAVANO*. XXIX Congreso Argentino de Química Mar del Plata 3 al 5 de octubre de 2012.

59. R. M. Lobayan, *Estudio de interacciones en X4H+ (X=As, P). Topología de la densidad de electrones apareados y efectivamente desapareados*. XVIII Reunión de Comunicaciones Científicas y Tecnológicas, Secretaría General de Ciencia y Técnica de la Universidad Nacional del Nordeste. Junio de 2012 Corrientes, Provincia de Corrientes.

58. E. N. Bentz y R. Lobayan, *“Contribución diferencial de los distintos confórmeros de isómeros Z de (4 α →6'', 2 α →O→1'')-fenilflavanos sustituidos según R = H, OH and OCH₃ y corrimientos químicos en espectros de Resonancia Magnética Nuclear (RMN)”* II Jornadas de Investigación en

Ingeniería del NEA y Países limítrofes". Junio 2012, Universidad Tecnológica Nacional Facultad Regional Resistencia, Chaco.

57. R.M.Lobayan, R.Bochichio, L.Lain, A.Torre, "Enlaces 2e-3c en densidades electrónicas de sistemas orgánicos: descripción topológica local". II Reunión Conjunta SUF-AFA; XII Reunión de la SUF y 96ª Reunión Nacional de la AFA co-organizada entre la Sociedad Uruguaya de Física y la Asociación Física Argentina, del 20 al 23 de septiembre de 2011. Montevideo, Uruguay.

56. E. N. Benz, M. C. Perez Schmidt y R. Lobayan, "Cambios en el Potencial Electroestático Molecular a la luz de un estudio AIM/NBO". II Reunión Conjunta SUF-AFA; XII Reunión de la SUF y 96ª Reunión Nacional de la AFA co-organizada entre la Sociedad Uruguaya de Física y la Asociación Física Argentina, del 20 al 23 de septiembre de 2011. Montevideo, Uruguay.

55. M. C. Perez Schmidt, A. Vitale, A. H. Jubert y R. Lobayan, "Análisis Conformacional y Estudio Electrónico de la Triptamina Considerando el Efecto del Solvente". XVII Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica. Mayo de 2011. Córdoba, Argentina.

54. E. N. Benz, A. B. Pomilio, A. H. Jubert y R. Lobayan, "Estudio ab-initio de las interacciones intramoleculares en el anillo catecol de los isómeros Z1 de $(4\alpha \rightarrow 6'', 2\alpha \rightarrow O \rightarrow 1'')$ -fenilflavano". XVII Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica. Mayo de 2011. Córdoba, Argentina.

53. M. C. Perez Schmidt, A. Vitale, A. H. Jubert y R. Lobayan, "Análisis Conformacional Exploratorio y Estudio Electrónico de la Triptamina en vacío". I Jornada Regional de Investigación en Ingeniería, noviembre de 2010, Universidad Tecnológica Nacional Facultad Regional Resistencia, Chaco.

52. M. C. Perez Schmidt, A. Vitale, A. H. Jubert y R. Lobayan, "Análisis Teórico Comparativo de la Capacidad Captadora de Radicales Libres de los Conformeros del Ácido Indolacético" XIII JORNADAS DE CIENCIA Y TECNOLOGIA, noviembre de 2010, Universidad Nacional de Formosa, Formosa.

51. E. N. Benz, A. B. Pomilio, A. H. Jubert y R. Lobayan, "Análisis conformacional y de las barreras rotacionales en Proantocianidina Dimérica Tipo A sustituida con $R = OH$ y $R = OCH_3$ " I Jornada Regional de Investigación en Ingeniería. noviembre de 2010, Universidad Tecnológica Nacional Facultad Regional Resistencia, Chaco.

50. E. N. Benz, A. B. Pomilio, A. H. Jubert y R. Lobayan, "Variación del Momento Dipolar molecular en vacío y en solución en el espacio conformacional de Proantocianidinas Diméricas Tipo A sustituidas con $R = H, OH$ y OCH_3 " XIII JORNADAS DE CIENCIA Y TECNOLOGIA, 8 y el 12 de Noviembre de 2010, Universidad Nacional de Formosa, Formosa.

49. Nieves C. Comelli, Rosana M. Lobayan, Alicia H. Jubert, Eduardo A. Castro. "Estudio Teórico de las propiedades estructurales y electrónicas intrínsecas del ácido valproico y derivados funcionales". XXVIII Congreso Argentino de Química, Septiembre de 2010 en Lanús Pcia. De Buenos Aires, Argentina.

48. M. C. Perez Schmidt, A. Vitale, A. H. Jubert y R. Lobayan, "Especies Radicales del Ácido Indolacético. Estudio Estructural y Electrónico de su Espacio Conformacional". XXVIII Congreso Argentino de Química, Septiembre de 2010 en Lanús Pcia. De Buenos Aires, Argentina.

47. E. N. Benz, A. B. Pomilio, A. H. Jubert y R. Lobayan, "Efecto del solvente en el estudio de las propiedades electrónicas de proantocianidinas diméricas tipo A sustituidas". XXVIII Congreso Argentino de Química, Septiembre de 2010 en Lanús Pcia. De Buenos Aires, Argentina.

46. Nieves C. Comelli, Rosana M. Lobayan, Alicia H. Jubert, Eduardo A. Castro. "Estudio Teórico de las propiedades estructurales y electrónicas intrínsecas del ácido valproico y derivados funcionales". XXXV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, septiembre 18 al 22 de

2009, San Andrés, Colombia.

45. M. C. Perez Schmidt, A. Vitale, A. H. Jubert y R. Lobayan, *Vibrational Spectra and Theoretical Studies of Indole-3-Acetic Acid Conformers*. 10th Latin American Conference on Physical Organic Chemistry (CLAFQO-10), Octubre 2009, Florianópolis, SC, Brasil.

44. E. N. Benz, A. B. Pomilio, A. H. Jubert y R. Lobayan, *Topological analysis of Z isomers of A-type dimeric proanthocyanidin substituted with R=H, OH, OCH₃. Descriptive and predictive properties of stability and reactivity*. 10th Latin American Conference on Physical Organic Chemistry (CLAFQO-10), Octubre 2009, Florianópolis, SC, Brasil.

43. M. C. Perez Schmidt, A. Vitale, A. H. Jubert y R. Lobayan, *Análisis conformacional exploratorio y estudio de la distribución electrónica del ácido indolacético*. XIV Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica. Abril de 2009. Salta, Argentina.

42. E. N. Benz, A. B. Pomilio, A. H. Jubert y R. Lobayan, *Isómeros Z de proantocianidinas diméricas tipo A sustituidas según R = H, OH y OCH₃. Análisis conformacional y electrónico*. XIV Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica. Abril de 2009. Salta, Argentina.

41. R.M.Lobayan, R.Bochichio, A.Torre, L.Lain. *Información contenida en las densidades apareadas y desapareadas. Interacciones deficientes en electrones en boranos* VIII Salão de Iniciação Científica - Ed. Internacional, VIII Mostra Científica - Ed. Internacional e I Feira de Extensão - Ed. Internacional. 29 a 31 de octubre 2008, Uruguayana, Brasil.

40. R.M. Lobayan, A. B. Pomilio y A. H. Jubert *Estudio AIM-NBO de enantiomeros 2S4S y 2R4R de procianidinas tipo A*. VIII Salão de Iniciação Científica - Ed. Internacional, VIII Mostra Científica - Ed. Internacional e I Feira de Extensão - Ed. Internacional. 29 a 31 de octubre 2008, Uruguayana, Brasil.

39. R.M.Lobayan, R.Bochichio, A.Torre, L.Lain *Densidades efectivas de apareamiento y desapareamiento en sistemas con enlaces tipo 2e-3c*. 93a. Reunión de la Asociación Física Argentina. Septiembre de 2008. Buenos Aires, Argentina.

38. R.M. Lobayan, D. Gregoret, A. B. Pomilio y A. H. Jubert, *Estudio conformacional y electrónico de enantiomeros 2S4S y 2R4R de procianidinas tipo A*, XXVII Congreso Argentino de Química, Septiembre de 2008 en San Miguel de Tucumán, Argentina.

37. R.M.Lobayan, R.Bochichio, L.Lain, A.Torre, *Efectos de muchas partículas en la distribución electrónica de sistemas moleculares: Laplaciano de la densidad efectivamente desapareada*. 92a. Reunión de la Asociación Física Argentina. Septiembre de 2007. Salta, Provincia de Salta, Argentina.

36. R. Lobayan, , A. B. Pomilio y A. H. Jubert, *Interacciones puente de hidrogeno intramoleculares en Procianidinas A y B*. XIII Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica. Abril de 2007. Tandil, Buenos Aires, Argentina.

35. R.M.Lobayan, R.Bochichio, L.Lain, A.Torre, *Many body effects on electron distribution in molecular systems. Effectively unpaired electron density*. 13th International Conference on Recent Progress in Many-Body Theories QMBT13. Diciembre de 2005. Buenos Aires, Argentina.

34. R.M.Lobayan, R.Bochichio, L.Lain, A.Torre, *Topología de las densidades apareada y no apareada en la distribución electrónica de sistemas moleculares*. 90a. Reunión de la Asociación Física Argentina. Septiembre de 2005. La Plata, Provincia de Buenos Aires, Argentina.

33. R. Lobayan, *Formulacion local de las densidades apareadas y desapareadas en sistemas moleculares. Aplicaciones a la molécula N₂ en conformaciones de equilibrio y fuera de el.* Sesión anual de Comunicaciones Científicas de la Universidad Nacional del Nordeste. Octubre de 2005.

Corrientes, Provincia de Corrientes.

32. R. Lobayan, L. G. Sosa, A. H. Jubert y N. M. Peruchena, *Effects of Coulomb Correlation at MP2 Level in the Laplacian of the Electronic Charge Density in 2-C-n-Butonium.*. Sesión anual de Comunicaciones Científicas de la Universidad Nacional del Nordeste. Octubre de 2004. Corrientes, Provincia de Corrientes.

31. R. Lobayan, L. G. Sosa, A. H. Jubert y N. M. Peruchena, *Puntos críticos de la distribución laplaciana de la densidad electrónica en cationes $n\text{-C}_4\text{H}_{11}^+$* . XIII Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica. Mayo de 2003. Bahía Blanca, Argentina.

30. R. Lobayan, L. G. Sosa, A. H. Jubert y N. M. Peruchena, *Concentraciones y depleciones locales de carga en cationes n -butonios. Estudio topológico ab-initio de la distribución laplaciana.* XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina QUITEL. Octubre de 2002. Montevideo, Uruguay.

29. R. Lobayan, L. G. Sosa, A. H. Jubert y N. M. Peruchena, *Distribución laplaciana de la densidad de carga electrónica en los enlaces de tres centros-dos-electrones en carbocationes.* XXIV Congreso Argentino de Química. Agosto 2002. Corrientes, Provincia de Corrientes.

28. N.G.Fidanza, M. Zamora, F.D.Suvire, G.L.Sosa, R.M.Lobayan, R.D.Enriz, N.M.Peruchena, *Análisis conformacional del 3TC.* Sesión anual de Comunicaciones Científicas de la Universidad Nacional del Nordeste. Octubre de 2001. Corrientes, Provincia de Corrientes.

27. N. Okulik, L. G. Sosa, R. Lobayan y N. M. Peruchena, *Análisis topológico de la densidad de carga electrónica en carbocationes.* XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina QUITEL. Setiembre de 2001. Toulouse, Francia.

26. N. G. Fidanza, R. Lobayan, L. G. Sosa, N. M. Peruchena, *Efecto de sustituyentes sobre enlaces de hidrogeno intramoleculares en análogos de nucleosidos.* XII Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica. Abril de 2001. San Martín de los Andes, Neuquen, Argentina.

25. N. G. Fidanza, F. Suvire, L. G. Sosa, R. Lobayan, N. M. Peruchena, R. D. Enriz, *Análisis conformacional y electrónico del 3TC (Lamivudina).* XXIII Congreso Argentino de Química. Septiembre de 2000. Corrientes, Provincia de Corrientes, Argentina.

24. R. M. Lobayan, N. M. Peruchena, A. Jubert, *Análisis topológico de la distribución de la densidad electrónica semiempírica en clusters que simulan el sitio ácido de una zeolita.* XXIII Congreso Argentino de Química. Septiembre de 2000. Corrientes, provincia de Corrientes, Argentina.

23. R. M. Lobayan, N. Okulik, N. M. Peruchena, A. Jubert, A. Sierraalta, *Corrección a la distribución de la densidad electrónica semiempírica por adición de D.E. atómicas.* XXIII Congreso Argentino de Química, Septiembre de 2000. Corrientes, Provincia de Corrientes, Argentina.

22. N. G. Fidanza, R. M. Lobayan, G. L. Sosa, N. M. Peruchena, *Estudio teórico de la estructura electrónica en análogos de nucleósidos.* XXVII Reunión Anual de la Sociedad Argentina de Biofísica. Noviembre de 1999. La Cumbre, Provincia de Córdoba, Argentina.

21. N. G. Fidanza, R. M. Lobayan, G. L. Sosa, N. M. Peruchena, *Aplicabilidad del análisis topológico de la densidad de carga a nivel semiempírico en el antiviral lamivudina (3TC).* 84a. Reunión de la Asociación Física Argentina. Septiembre de 1999. San Miguel de Tucumán, Provincia de Tucumán, Argentina.

20. C.Gomez, P.Provasi, E.Botek, R.M.Lobayan y G.A.Aucar, *Desarrollo en serie del Propagador de Polarización al nivel RPA y esquema de Popple Santry.* Sesión anual de Comunicaciones Científicas de la Universidad Nacional del Nordeste. Octubre de 1998. Resistencia, Provincia de Chaco.

19. R.M.Lobayan de Bonczok, R. H. Romero y G. A. Aucar, *Efectos relativistas sobre constantes de acoplamiento entre espines nucleares en compuestos con pares libres.* 83a. Reunión de la

Asociación Física Argentina. Septiembre de 1998. La Plata, Provincia de Buenos Aires, Argentina.

18. C.Gomez, P.Provasi, R.M.Lobayan y G.A.Aucar, *Polarizabilidad mutua y efectos electrónicos en moléculas*. 83a. Reunión de la Asociación Física Argentina. Septiembre de 1998. La Plata, Provincia de Buenos Aires, Argentina.

17. R.M.Lobayan, G.A.Aucar y R.H.Contreras, *Calculo de constantes de acoplamiento de espín de RMN al nivel RPA y análisis de cuasi-inestabilidades de Hartree-Fock de tipo no-singlete en compuestos saturados y no saturados*. XXIV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. 20-25 de Septiembre de 1998. Puebla México.

16. R.M.Lobayan de Bonczok, G. A. Aucar, R. H. Contreras, *Origen de la performance irregular en la aplicación de la función de onda de tipo PM3 al cálculo de constantes de acoplamiento de spin indirecto*. 82a. Reunión de la Asociación Física Argentina. Septiembre de 1997. San Luis, Provincia de San Luis, Argentina.

15. C. Gomez, R.M.Lobayan de Bonczok y G. A. Aucar, *El esquema de Pople Santry desde la aproximación de propagadores de polarización*. 82a. Reunión de la Asociación Física Argentina. Septiembre de 1997. San Luis, Provincia de San Luis, Argentina.

14. P.F.Provasi, R.M.Lobayan de Bonczok y G. A. Aucar, R.H. Contreras, *Análisis teórico de la aditividad y origen electrónico del acoplamiento J de RMN en bicicloalcanos sustituidos con átomos pesados*. 81a. Reunión de la Asociación Física Argentina. Septiembre de 1996. Tandil, Provincia de Buenos Aires, Argentina.

13. R.M.Lobayan de Bonczok, G. A. Aucar, R.H. Contreras, *Cuasi-inestabilidades de Hartree-Fock de tipo no-singlete en el cálculo de constantes de acoplamiento de RMN*. 81a. Reunión de la Asociación Física Argentina. Septiembre de 1996. Tandil, Provincia de Buenos Aires.

12. R.M.Lobayan de Bonczok, G. A. Aucar, R.H. Contreras, *Origen electrónico de los acoplamientos $J(Sn, X)$ $X= C, P$ en compuestos vinílicos sustituidos*. 80a. Reunión de la Asociación Física Argentina. Octubre de 1995. San Carlos de Bariloche, Provincia de Río Negro, Argentina.

11. R.M.Lobayan de Bonczok, G. A. Aucar, R.H. Contreras, *Sobre la aplicación de los métodos semiempíricos MNDO, AM1 y PM3 al cálculo de constantes de acoplamiento de RMN*. IX Congreso Argentino de Físicoquímica. Noviembre de 1994. San Luis, Provincia de San Luis, Argentina.

10. R.M.Lobayan de Bonczok, G. A. Aucar, R.H. Contreras, *Efectos de la disminución en la aproximación del propagador de polarización en el cálculo de constantes de acoplamiento de RMN*. 79a. Reunión de la Asociación Física Argentina. Octubre de 1994. Villa Giardino, Provincia de Córdoba, Argentina.

9. N.M.Peruchena, R.M.Lobayan, L.Sosa, G.A.Aucar, R.H.Contreras, *Efectos estructurales sobre las constantes de acoplamiento espín-espín involucrando átomos pesados*. 78a. Reunión de la Asociación Física Argentina. Octubre de 1993. Rosario, Provincia de Santa Fe, Argentina.

8. R.M.Lobayan, S.B.Gomez, G.A. Aucar, R.H. Contreras, *Sobre el efecto de los pares libres de 15N y 19F en acoplamientos Through Space $2,4J(15N-19F)$* . 77a. Reunión de la Asociación Física Argentina. Octubre de 1992. Capital Federal, Provincia de Buenos Aires, Argentina.

7. R.M.Lobayan, N.M.Peruchena, G.A. Aucar, R.H. Contreras, *El signo de los acoplamientos entre espines nucleares como consecuencia de diferencias de fase entre espín-orbitales moleculares localizados*. 77a. Reunión de la Asociación Física Argentina. Octubre de 1992. Capital Federal, Provincia de Buenos Aires, Argentina.

6. R.M.Lobayan, S.B.Gomez, N.M.Peruchena, G.A. Aucar, R.H. Contreras, *Nuevo modelo para interpretar los signos de los acoplamientos de espín nuclear*. 76a. Reunión de la Asociación Física Argentina. Octubre de 1991. San Miguel de Tucumán, Provincia de Tucumán, Argentina.

5. R.M.Lobayan, S.B.Gomez, G.A. Aucar, R.H. Contreras, *Estudio del mecanismo de transmisión TS del acoplamiento de espín nuclear 15N-19F*. 75a. Reunión de la Asociación Física Argentina.

Octubre de 1990. La Plata, Provincia de Buenos Aires, Argentina.

4. G.A.Aucar, J.A.González, R.M.Lobayan, N.M.Peruchena, R.H.Contreras, *El par libre del Nitrógeno como fuente de asimetría en acoplamientos 2J(15N - 1H) de acetoximas cis y trans*". 73a. Reunión de la Asociación Física Argentina. Octubre de 1988. Mar del Plata, Provincia de Buenos Aires, Argentina.

3. R.M. Lobayan, S.B. Gomez, E. Botek, G.A. Aucar, R.H. Contreras, *Transmisión Through Space del acoplamiento 15N-19F vía un enlace intermedio y por superposición de pares libres*. II Jornada de Pesquisa da UFSM. Octubre de 1992. Santa Maria, Brasil.

2. N.M. Peruchena, G.A. Aucar, R.M. Lobayan, R.H. Contreras, *Sobre el origen de las asimetrías en los acoplamientos J(13C-19F) para el 1,1-Difluorociclobutano*. VII Congreso Argentino de Fisicoquímica. Abril de 1991. Buenos Aires, Capital Federal, Argentina.

1. N.M.Peruchena; R.M.Lobayan; J.A.González; G.A.Aucar,R.H. Contreras, *Análisis del término dipolar del acoplamiento 4J(13C-19F) en compuestos aromáticos fluorados con el método CLOPPA*. VI Congreso Argentino de Fisicoquímica. Abril 1989. Termas de Río Hondo, Pcia. de Santiago del Estero, Argentina.-

d. CONFERENCIAS O CHARLAS EN REUNIONES CIENTIFICAS

-Conferencia Semiplenaria: *Estudio teórico estructural y del espacio conformacional de Proantocianidinas y Triptaminas, precursores y derivados. interacciones intramoleculares relevantes, efectos estereoelectrónicos y reactividad química*. XXVIII Congreso Argentino de Química realizado del 13 al 16 de setiembre de 2010 en la Universidad Nacional de Lanús, provincia de Buenos Aires.

- Charla: *Estudio teórico de las propiedades estructurales y electrónicas, de las interacciones intramoleculares y de la reactividad química en proantocianidinas tipo A sustituidas y en ácido 1H-Indol-3-Acético*. **4° Seminario sobre la Investigación en las Universidades Privadas** organizado por el **Consejo de Rectores de las Universidades Privadas**, realizado los días 27 y 28 de Abril de 2010, en Capital Federal, provincia de Buenos Aires.

-Charla: *Estudio Teórico de las propiedades estructurales y electrónicas intrínsecas del ácido valproico y derivados funcionales*, Alicia H. Jubert, en colaboración con Nieves C. Comelli, Rosana M. Lobayan y Eduardo A. Castro. XXXV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, septiembre 18 al 22 de 2009, San Andrés, Colombia.

-Charla: *Física del Enlace Químico*. Roberto C. Bochicchio, en colaboración con Rosana M. Lobayan, Diego R. Alcoba, Alicia Torre, Luis Laín, Charla de División Física Atómica y Molecular, 93a. Reunión de la Asociación Física Argentina. Septiembre de 2008. Buenos Aires, Argentina.

-Charla: *Bases teóricas de la reactividad química*. Roberto C. Bochicchio. En colaboración con: Rosana M. Lobayan, Diego R. Alcoba, Alicia Torre, Luis Laín, Charla de División Física Atómica y Molecular 92a. Reunión de la Asociación Física Argentina. Septiembre de 2007. Salta, Provincia de Salta, Argentina.

-Charla: *Efectos de muchas partículas en la distribución electrónica de sistemas moleculares: estructura de las matrices densidad reducidas*. Roberto C. Bochicchio, En colaboración con: Rosana

M. Lobayan, Diego R. Alcoba, Alicia Torre, Luis Laín, Charla de División Física Atómica y Molecular, 90a. Reunión de la Asociación Física Argentina. Septiembre de 2005. La Plata, Provincia de Buenos Aires, Argentina.

-“QUINTAS JORNADAS DE CIENCIA Y TECNICA de la UNIVERSIDAD DE LA CUENCA DEL PLATA”, 7 y 8 de Junio de 2007.

Titulo de las Conferencias:

“Laplaciano de la densidad electrónica desapareada en compuestos modelo”

“Estudio conformacional y electrónico de procianidinas A y B en sus formas simples”

-“CUARTAS JORNADAS DE CIENCIA Y TECNICA de la UNIVERSIDAD DE LA CUENCA DEL PLATA”, 7 de Junio de 2006.

Titulo de la Conferencia:

“Densidades electrónicas apareadas y desapareadas en sistemas moleculares modelo”

-“REUNION DE ESTRUCTURA ELECTRONICA Y TEORIA DE COLISIONES” Facultad de Ciencias Exactas y Naturales UBA, Aula del IAFE, 23 y 24 de Mayo de 1995. (Otros participantes: David Micha, Univ. de Florida, USA; Raul O. Barrachina, Centro Atómico Bariloche; Guillermina Estiu, UNLP; Rubén Contreras, UBA; Eduardo Castro, UNLP; etc.)

Titulo de la conferencia:

“Sobre la aplicabilidad del método PM3-RPA al cálculo de constantes de acoplamiento de RMN”

9. ACTIVIDADES DE EXTENSION Y TRANSFERENCIA

a. DIVULGACION CIENTÍFICA O PEDAGÓGICA

-Charla de divulgación, *“Aplicaciones de la Química Computacional en el Modelado de compuestos antioxidantes”* en Colegios de Nivel Secundario en oportunidad de la IX SEMANA NACIONAL DE LA CIENCIA Y LA TECNOLOGÍA, 11 al 22 de junio de 2012.

-Charla de divulgación, *“Modelado Molecular de compuestos antioxidantes”* en Colegios de Nivel Secundario en oportunidad de la IX SEMANA NACIONAL DE LA CIENCIA Y LA TECNOLOGÍA, 6 al 18 de junio de 2011.

-Charla de divulgación, *“Química Computacional y Modelado Molecular”* en la Expo Tecno 2011. Centro Recreativo Científico Tecnológico, puerto de Barranqueras. Chaco en oportunidad de la IX SEMANA NACIONAL DE LA CIENCIA Y LA TECNOLOGÍA, 6 al 18 de junio de 2011.

-Coordinadora de la actividad: **“Articulación en el dictado de Matemáticas y Física en Ingeniería”** aprobada por disposición 026/2009, realizada el 31 de julio de 2009 en la Universidad de la Cuenca del Plata, a cargo del Dr. Augusto Melgarejo (UNLP).

-Organizadora de la conferencia: **“Como se interpreta la Química desde la Física”**, aprobada por disposición 011/2007, realizada el 8 de julio de 2008 en la Universidad de la Cuenca del Plata, a cargo del Dr. Roberto Bochicchio (UBA).

-Moderadora en las TERCERAS JORNADAS DE CIENCIA Y TECNICA organizada por la Secretaria de Políticas del Conocimiento de la UNIVERSIDAD DE LA CUENCA DEL PLATA, del 8 al 10 de junio de 2005, aprobadas por RES N° 149/2005.

-Participación en las Jornadas de Información Vocacional denominadas DIA DE LAS CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES Y AGRIMENSURA (1995 y 1998):

-Exposición de una charla de título:

"Relación entre estructuras electrónicas moleculares y constantes de acoplamiento de spin de RMN a lo largo de la tabla periódica": Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, UNNE. Departamento de Física. Mayo 1999.

-Dictado de Seminarios:

1."Díadas". Departamento de Física (FACENA), cátedras Física I, Mecánica I y Mecánica II. Abierto a alumnos avanzados y otros docentes del departamento. Noviembre de 1994.

2."Modelo semiclásico para comprender los principios básicos del fenómeno de la Resonancia magnética Nuclear". Departamento de Física (FACENA), cátedras Física I, Mecánica I y Mecánica II. Abierto a alumnos avanzados y otros docentes del departamento. Noviembre de 1996.

3."La formulación de Lagrange-Hamilton en la Teoría Cuántica de Campos" Departamento de Física (FACENA), cátedras Física I, Mecánica I y Mecánica II. Abierto a alumnos avanzados y otros docentes del departamento. Noviembre de 1997.

4."Simulación computacional y fundamentos de Dinámica Molecular". Departamento de Física (FACENA), cátedras Física I, Mecánica I y Mecánica II. Abierto a alumnos avanzados y otros docentes del departamento. Noviembre de 1998.

5. "Base física del modelo de pares electrónicos de Lewis". Departamento de Química (FACENA). Área de Química Física. Abierto a alumnos avanzados y otros docentes del área. Marzo 1999.

6. "Base física del modelo VSEPR (Valence shell electronic pair repulsion) de geometría molecular." Área de Química Física. Abierto a alumnos avanzados y otros docentes del área. Marzo 1999.

b. SERVICIOS ESPECIALES.

-Profesor Responsable (Res. 560/03 CD, contratada por Res. 2503/03 CD) del modulo SEMINARIO DE ACTUALIZACION DISCIPLINAR I (para profesores de Física) correspondiente al plan de estudio de la carrera de LICENCIATURA EN ENSEÑANZA DE LAS CIENCIAS EXPERIMENTALES de la FACENA (Res. 80/03 CS). Carga horaria: 60 horas.

Descripción del servicio: Organización y coordinación (formulación de: descripción, marco de referencia, objetivos, metodología, actividades de aprendizaje, programa analítico, cronograma, evaluación, régimen de promoción), control de la ejecución de sus instancias practicas; coordinación, supervisión y atención de sus instancias tutoriales y evaluativas.

Institución: FACENyA UNNE en el marco del Programa de Ofertas Educativas Especiales de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura. Res. 477/03 y 500/00.

10 FORMACION DE RECURSOS HUMANOS

a. DIRECCION DE TESIS DE DOCTORADO:

-Ing. Química Erika Bentz, Título de tesis: "Reactividad e interacciones intramoleculares en Procianidinas A y B. Estudio conformacional y electrónico", Res. CD N° 813/09, FACENyA UNNE.

-Bioquímica Maria Celia Perez Schimdt, Título de tesis: "Estudio Teórico de las Propiedades

Geométricas, Electrónicas y de la Reactividad Química de Triptaminas, precursores y derivados. Efectos conformacionales y estructurales", Res. CD N° 779/09, FACENyA UNNE.

b. DIRECCION DE BECARIOS

-Dirección Beca Interna de Postgrado Tipo II otorgada a la Ing. Química Erika Bentz, por el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) Convocatoria 2011, Tema: "Estudio teórico de las propiedades estructurales y electrónicas, de las interacciones intramoleculares y de la reactividad química de Proantocianidinas".

-Dirección beca doctoral de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica-UCP PRH 54 2007 otorgada a la Ing. Química Erika Bentz, Tema: "Reactividad e interacciones intramoleculares en Procianidinas A y B. Estudio conformacional y electrónico" Programa: STRESS OXIDATIVO-ALIMENTOS FUNCIONALES, *Procianidinas A y B en la preservacion de jugos naturales* Res. 276/08, UCP.

-Dirección beca doctoral de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica-UCP PRH 54 2007 otorgada a la Bioquímica Maria Celia Perez Schimdt, Tema: "Estudio Teórico de las Propiedades Geométricas, Electrónicas y de la Reactividad Química de Triptaminas, precursores y derivados. Efectos conformacionales y estructurales", Programa: STRESS OXIDATIVO-ALIMENTOS FUNCIONALES, *Triptaminas, precursores y derivados, su bioactividad y propiedades en alimentos* Res. 276/08. Universidad de la Cuenca del Plata.

-Dirección de adscripción al proyecto "Aspectos locales y no locales de la distribución electrónica. Modelo de enlaces complejos", UNIVERSIDAD DE LA CUENCA DEL PLATA, Res. N 277/08, como auxiliar de investigación para iniciar formación de posgrado del Ing. Químico Fabrizio Zelioli.

-Codirección de la beca de pre-grado otorgada por SECyT-UNNE al Lic. en Ciencias Físicas Patricio Provasi. Tema: "Origen electrónico del parámetro de RMN, J, en moléculas conteniendo átomos de Sn y Hg". Facultad de Ciencias Exactas Naturales y Agrimensura, UNNE. Fecha: 4 / 12 / 1995. Res. CS N0 602/95 C.S.

-Codirección de la beca de Post-grado categoría Iniciación otorgada por SECyT-UNNE al Lic. en Ciencias Físicas Carlos Alejandro Gómez. Tema: "Análisis teórico de efectos electrónicos y estereo-electrónicos sobre el acoplamiento indirecto entre espines nucleares ". Facultad de Ciencias Exactas Naturales y Agrimensura, UNNE. Fecha: 01 / 07 / 1997. Res. CS N0 452/97.

c. DIRECCION DE PASANTES Y ADSCRIPTOS EN DOCENCIA

9-Dirección Adscripción a la materia Mecánica Cuántica I de la alumna de Licenciatura en Ciencias Físicas Teresita Santa Cruz, año 2011. En curso. Res. 2466/11. FACENA, UNNE.

8-Dirección Adscripción como Ayudante de Primera a la materia Mecánica Cuántica I del Lic. en Ciencias Físicas Carlos A. Gimenez, año 2011. En curso. Res. 2023/11. FACENA, UNNE.

7-Dirección Adscripción a la materia Mecánica Cuántica I de la alumna de Licenciatura en Ciencias

Físicas Lucy Alejandra Valdez, año 2010. Res. 1740/10. FACENA, UNNE.

6-Dirección Adscripción a la materia Mecánica Cuántica I del alumno de Licenciatura en Ciencias Físicas Carlos A. Gimenez, año 2010. Res. 983/10, 509/11. FACENA, UNNE.

5-Dirección Adscripción a la materia Física II del Ingeniero Miguel Vila Pasetto, año 2010. Disposición de aprobación N 026/10-Decanato Facultad de Ingeniería-UCP.

4-Dirección Adscripción a la materia Física II del Ingeniero Químico Fabrizio Zelioli, año 2009. Disposición de aprobación N 24/09-Decanato Facultad de Ingeniería-UCP.

3-Dirección Adscripción a la materia Física I del Ingeniero Químico Fabrizio Zelioli, año 2008. Disposición de aprobación N 046/08-Decanato Facultad de Ingeniería-UCP.

2-Dirección de Adscripción a la materia Física II alumna Diana Gregoret, año 2007. Disposición de aprobación N 016/07- Decanato Facultad de Ingeniería-UCP.

1-Dirección Adscripción a la materia Física I del alumno Gabriel Finten, año 2006. Disposición de aprobación N 028/06- Decanato Facultad de Ingeniería-UCP.

11. ACTIVIDADES DE ACTUALIZACION Y PERFECCIONAMIENTO ASISTENCIA A CONGRESOS Y REUNIONES CIENTIFICAS

a) En carácter de expositor:

21. II Reunión Conjunta SUF-AFA; XII Reunión de la SUF y 96ª Reunión Nacional de la AFA co-organizada entre la Sociedad Uruguaya de Física y la Asociación Física Argentina, del 20 al 23 de septiembre de 2011, Montevideo, Uruguay.
20. XVII Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica. Mayo de 2011, Córdoba, Argentina.
19. I Jornada Regionales de Investigación en Ingeniería. Noviembre de 2010, Universidad Tecnológica Nacional Facultad Regional Resistencia, Chaco.
18. XXVIII Congreso Argentino de Química, Septiembre de 2010 en Lanús, Provincia de Buenos Aires, Argentina.
17. XVI Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica. Mayo de 2009, Salta, Argentina.
16. VIII Salão de Iniciação Científica - Ed. Internacional, VIII Mostra Científica - Ed. Internacional e I Feira de Extensão - Ed. Internacional. Uruguayana, Brasil. Noviembre de 2008.
15. XXVII Congreso Argentino de Química, Septiembre de 2008 en San Miguel de Tucumán, Argentina.
14. 92a. Reunión de la Asociación Física Argentina. Septiembre de 2007. Salta, Provincia de Salta, Argentina.
13. XV Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica. Abril de 2007. Tandil, Buenos Aires, Argentina.
12. "90 REUNION ANUAL DE LA ASOCIACION FISICA ARGENTINA" La Plata, Pcia. de Buenos Aires, Argentina. Octubre 2005.
11. "XXIV CONGRESO INTERNACIONAL DE QUIMICOS TEORICOS DE EXPRESION LATINA"

Montevideo, Uruguay. Septiembre de 2002.

10."XI CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUIMICA I CONGRESO DE FISICOQUIMICA DEL MERCOSUR". Santa Fe, Pcia. de Santa Fe, Argentina. Abril 1999.

9."XXVII REUNION ANUAL DE LA SOCIEDAD ARGENTINA DE BIOFISICA" La Plata, Pcia. de Buenos Aires, Argentina. Noviembre 1998.

8."XXIV CONGRESO INTERNACIONAL DE QUIMICOS TEORICOS DE EXPRESION LATINA" Puebla México. Septiembre de 1998.

7."81 REUNION ANUAL DE LA ASOCIACION FISICA ARGENTINA". Tandil, Pcia. de Buenos Aires, Argentina. Septiembre de 1996.

6."80 REUNION ANUAL DE LA ASOCIACION FISICA ARGENTINA" San Carlos de Bariloche, Pcia. de Rio Negro, Argentina. Octubre 1995.

5."REUNION DE ESTRUCTURA ELECTRONICA Y TEORIA DE COLISIONES". Capital Federal, Pcia. de Buenos Aires, Argentina. Mayo 1995.

4."79 REUNION ANUAL DE LA ASOCIACION FISICA ARGENTINA" Villa Giardino, Pcia. de Cordoba, Argentina. Octubre 1994.

3."77 REUNION ANUAL DE LA ASOCIACION FISICA ARGENTINA". Capital Federal, Pcia. de Buenos Aires, Argentina. Octubre 1992.

2."PRIMER ENCUENTRO CIENTIFICO TECNOLOGICO" (Organizado por IBM Argentina). Capital Federal, Pcia. de Buenos Aires, Argentina. Octubre de 1990.

1."VI CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUIMICA" Termas de Río Hondo, Pcia. de Santiago del Estero, Argentina. Abril 1989.

b) En carácter de coordinador u organizador:

-Seminario: ESTUDIO TEÓRICO DE LA RELACIÓN ENTRE LA ESTRUCTURA ELECTRÓNICA Y LA CINÉTICA DEL METABOLISMO DE LA N,N-DIMETILTRIPTAMINA Y TRIPTAMINA IN VIVO. Universidad de la Cuenca del Plata. Corrientes, 23 de Agosto de 2011.

-Seminario: ESTUDIO DE LAS CARACTERÍSTICAS FUNCIONALES DE LOS ANILLOS CATECOL Y RESORCINOL EN FLAVONOIDES APLICANDO FUNCIONALES DE LA DENSIDAD Universidad de la Cuenca del Plata. 30 de junio de 2011.

-Seminario: ESTUDIO DE LA REACCIÓN DE QUERCETINA CON LOS RADICALES SUPERÓXIDO ($\bullet\text{O}_2^-$) Y OXIDRILLO ($\bullet\text{OH}$). 12 de mayo de 2011.

-Seminario: CARACTERIZACIÓN TEÓRICA DE QUINONAS Y SEMIQUINONAS DE (-)-EPICATEQUINA Universidad de la Cuenca del Plata. 14 de abril de 2011.

-Organizadora y coordinadora del taller: "ESTEREOQUIMICA. STRESS OXIDATIVO Y ANTIOXIDANTES NATURALES", aprobada por disposición 022/2009, realizado el 18 y 19 de agosto de 2009 en la Universidad de la Cuenca del Plata, a cargo de: Dr. Arturo Vitale (UNLP-CONICET) y Dr. Alicia Pomilio (FBIB UBA-CONICET).

-Organizadora de las Jornadas "METODOS ANALITICOS, CROMATOGRAFICOS Y ELECTROFORETICOS. APLICACIONES FARMACEUTICAS, AMBIENTALES Y EN ALIMENTOS. STRESS OXIDATIVO", aprobadas por disposición 011/2007, realizadas los días 21 y 22 de Agosto de 2007 en la Universidad de la Cuenca del Plata. Dr. Arturo Vitale (UNLP-CONICET) y Dr. Alicia Pomilio (FFyB UBA-CONICET).

12 PREMIOS Y MENCIONES ESPECIALES

Mención de Honor FCENyA UNNE Promoción 1989.

Premio UCP: Puntaje de grilla superior a 80 puntos, año 2008.

Premio UCP: Puntaje de grilla superior a 80 puntos, año 2010.

13. TAREAS DE GESTION [como Consejero, Miembro de Comisiones]:

a. Decano

-Decana de la Facultad de Ingeniería en alimentos. Designada con carácter interino para el periodo 19/11/2007 a 28/11/2007, Res 200/2007.

b. Consejero de Facultad

-Miembro del Consejo Consultivo de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de la Cuenca del Plata, Res 091/2007.

-Miembro (suplente) del Consejo Consultivo de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de la Cuenca del Plata, Res 287/2009.

c. Director de Departamento

-Jefe del Departamento de Orientación Básica de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de la Cuenca del Plata, Res 091/2007.

- Jefe (suplente) del Departamento de Orientación Básica de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de la Cuenca del Plata, Res 287/2009.

d. Director de Carrera

-Director de la CARRERA LICENCIATURA EN CIENCIAS FISICAS de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura. RES. 0449/11.

e. Miembro de Comisiones

-Miembro Representante del Departamento de Física de la COMISION DEL CENTRO DE COMPUTOS DE ALTO DESEMPEÑO de la UNNE (CADUNNE). Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, FACENA, UNNE. RES. N 423/12.

-Miembro suplente de la COMISION DE CARRERA DEL PROFESORADO EN FISICA. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, FACENA, UNNE. RES. N 1032/11.

- Miembro de la Comisión de elaboración del proyecto de la carrera Ingeniería en Producción y Administración Agropecuaria. Disposición N° 07/2009. Facultad de Ingeniería, Universidad de la Cuenca del Plata.

-Miembro de la Comisión responsable del análisis de los trabajos prácticos de las Ciencias Básicas de la carrera Ingeniería en Alimentos. Disposición N 09/2007, Facultad de Ingeniería UCP.

-Miembro titular de la COMISION DE CARRERA DEL PROFESORADO EN FISICA. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, FACENA, UNNE. RES. N 113/03 y RES. N 0211/07.

-Miembro suplente de la COMISION DE LA CARRERA LICENCIATURA EN CIENCIAS FISICAS RES. 0216/07.

-Miembro de la COMISION DE ORGANIZACION DE LA REUNION DE COMUNICACIONES CIENTIFICAS Y TECNOLOGICAS DE LA UNNE, 1999. RES. N° 2349/99.

f. Otras responsabilidades de gestión

-Elaboración y gestión de presentación del proyecto IP-PRH N 79/035-2008 Procianidinas A y B en la preservación de jugos naturales. Stress Oxidativo. Disposición N 012/2008 Facultad de Ingeniería, Universidad de la Cuenca del Plata.

-Investigador Responsable del PROGRAMA DE RECURSOS HUMANOS PRH 2007 **EXPEDIENTE PMT III – PFDT N° 54** DE LA AGENCIA NACIONAL DE PROMOCION CIENTIFICA Y TECNOLOGICA STRESS

DRA. ROSANA M. LOBAYAN

OXIDATIVO-ALIMENTOS FUNCIONALES. RES 201/08 del Directorio de la AGENCIA NACIONAL DE PROMOCION CIENTIFICA Y TECNOLOGICA. Res 276/08 CS UCP.

-Gestión convenio Marco (UNLP - Univ. de la Cuenca del Plata UCP) y acuerdo de investigación (FI/UNLP - FI/UCP). Res 276/08 CS UCP.

-Responsable institucional del Convenio firmado entre la Universidad de La Plata y la Universidad de la Cuenca del Plata, Res. 276/08