

Currulum Vitae

| | |
|---------------------------|---|
| Nombre | Joel Ireta Moreno |
| Fecha de nacimiento/Lugar | 28/02/1969, Salamanca Guanajuato, México. |
| Posición | Profesor Titular C en el Departamento de Química de la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. |
| Teléfono | (+52) 55 5804 6413 |
| Correo electrónico | iret@xanum.uam.mx |

Formación

| | |
|-----------|---|
| 1987-1992 | Licenciatura en Química, Universidad de Guanajuato, Guanajuato, México. |
| 1993-1995 | Maestría en Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Distrito Federal, México. |
| 1995-1999 | Doctor en Ciencias, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Distrito Federal, México. |
| 2000-2001 | Becario de la fundación Alexander von Humboldt para realizar estudios postdoctorales en el instituto Fritz-Haber, Berlin, Alemania. |

Áreas de investigación

El campo de investigación que he venido desarrollando en los últimos 10 años se sustenta en la aplicación de la teoría de los funcionales de la densidad a sistemas complejos usando algoritmos en paralelo en cúmulos de procesadores. Así que la mayoría de mi producción académica se ha obtenido usando supercómputo. En particular, los proyectos de investigación en curso son:

1. Estudio teórico de la estructura y estabilidad de hidrotalcitas.
2. Estudio de las interacciones no covalentes en cristales de péptidos formadores de fibras amiloides.
3. Estudio de la flexibilidad de las proteínas por medio del cálculo de la superficie de energía potencial de polipéptidos modelo.
4. Efectos de la microsolvatación en la geometría y estabilidad de la estructura secundaria de proteínas.
5. Estudio de la naturaleza de las interacciones no covalentes usando la teoría moderna de la polarización.

Distinciones

Nivel 1 en el Sistema Nacional de Investigadores desde 2009.

Publicaciones

i) Artículos publicados en revistas internacionales: 20

ii) Capítulos de libros: 1

i) Artículos publicados:

1. A. Guevara-García, J. Ireta, M. Galván, *Sensing polarization effects through the analysis of the effective C6 dispersion coefficients in NaCl solutions*, J. Phys. Chem. **142**, 014504 (2015).
2. J. Ireta, *Microsolvation effects on the stability of polyalanine in extended and polyproline II conformation*, Int. J. Quantum Chem. **112**, 3612 (2012).
3. F. Aparicio, N. González-Rivas, J. Irereta, A. Rojo, L.I. Escobar, A. Cedillo, M. Galván, *Soft-soft interactions in the protein-protein recognition process: the K⁺ channel-charybdotoxin case*, Int. J. Quantum Chem. **112**, 3618 (2012).
4. J. Ireta, *Microsolvation effect on the twist of β -sheets*, J. Chem. Theory Comput. **7**, 2630 (2011).
5. L. Ismer, J. Ireta, J. Neugebauer, *A density functional theory based estimation of the anharmonic contributions to the free energy of a polypeptide helix*, J. Chem. Phys. **135**, 084122 (2011).
6. Tkatchenko, M. Rossi, V. Blum, J. Ireta, M. Scheffler, *Unraveling the Stability of Polypeptide Helices: Critical Role of van der Waals Interactions*, Phys. Rev. Lett **106**, 118102 (2011).
7. J. Ireta, M. Scheffler, *Density functional theory study of the conformational space of an infinitely long polypeptide chain*, J. Chem. Phys. **131**, 085104 (2009).
8. E. Penev, J. Ireta, J.-E. Shea, *Energetics of infinite homopolypeptide chains: a new look at commonly used force fields*, J. Phys. Chem. B **112**, 6872-6877 (2008).
9. L. Ismer, J. Ireta, J. Neugebauer, *First principles free energy analysis of helix stability: The origin of the low entropy in π -helices*, J. Phys. Chem. B **112**, 4109-4112 (2008).
10. I. De Gortari, M. Galván, J. Ireta, M. Segall, C. J. Pickard, M. Payne, *Theoretical investigations of oxygen-17 NMR chemical shifts to discriminate among helical forms*, J. Phys. Chem. A **111**, 13099-13105 (2007).
11. J. Ireta, J. Neugebauer, M. Scheffler, A. Rojo, M. Galván, *Structural transitions in the polyalanine alpha-helix under uniaxial strain*, J. Am. Chem. Soc. **49**, 17241-17244 (2005).
12. L. Ismer, J. Ireta, S. Boeck, J. Neugebauer, *Phonon spectra and thermodynamic properties of the infinite polyalanine α helix: A density-functional-theory-based harmonic vibrational analysis*, Phys. Rev. E **71**, 031911 (2005).
13. J. Ireta, J. Neugebauer, M. Scheffler, *On the accuracy of DFT for describing hydrogen bonds: dependence on the bond directionality*, J. Phys. Chem. A **108**, 5692-5698 (2004).
14. J. Ireta, J. Neugebauer, M. Scheffler, A. Rojo, M. Galván, *Density-functional theory study of the co-operativity of hydrogen bonds in finite and infinite α -helices*, in additions and corrections J. Phys. Chem. B **107**, 9616 (2003).

15. J. Ireta, J. Neugebauer, M. Scheffler, A. Rojo, M. Galván, *Density-functional theory study of the co-operativity of hydrogen bonds in finite and infinite α -helices*, J. Phys. Chem. B **107**, 1432-1437 (2003).
16. F. Aparicio, J. Ireta, A. Rojo, L. Escobar, A. Cedillo, M. Galván, *On the existence of electronic states confined by charge groups in proteins*, J. Phys. Chem. B **107**, 1692-1697 (2003).
17. J. Ireta, F. Aparicio, M. Viniegra, M. Galván, *The role of the protons and the electrostatic potential in the reactivity of the (110) sulfated zirconia surface*, J. Phys. Chem. B **107**, 811-818 (2003).
18. J. Ireta, M. Galván, K. Cho, J.D. Joannopoulos, *Local reactivity of charybdotoxin, a K⁺ channel blocker*, J. Am. Chem. Soc. **120**, 9771-9778 (1998).
19. J. Ireta, M. Galván, *Plane waves basis sets in the description of diatomic anions and valence charge density*, J. Chem. Phys. **105**, 8231-8236 (1996).
20. G. Mendoza-Díaz, J. Ireta-Moreno, *Synthesis and characterization of zinc mixed complexes with nalidixate anion and (N-N) donors*, J. Inorg. Biochem. **54**, 235-246 (1994).

ii) Capítulos en libros

1. M. Galván, J. Ireta, *Impacto y perspectivas del estudio de la estructura electrónica de proteínas* en el libro “La Física Biológica en México: Temas Selectos”, Coordinadores L. García-Colín Scherer, L. Dagdug, P. Miramontes y A. Rojo, El colegio nacional, México, 279-298 (2006).

Supervisión de tesis (concluidas)

- | | |
|------|--|
| 1998 | Director de la tesis de la licenciatura en química de Felipe Aparicio Platas. facultad de ciencias químicas de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. |
| 2001 | Co-director de la tesis de diploma en física “Performance of the PBE functional in the description of proton barriers”, de Lars Ismer, Universidad técnica de Berlín, Berlín Alemania. |
| 2008 | Co-director de la tesis de doctorado en física “Vibrational modes and thermodynamic properties of the secondary structure of proteins: A DFT-GGA based analysis”, de Lars Ismer, Universidad de Paderborn, Paderborn Alemania. |
| 2009 | Co-director de la tesis de la maestría en química “Análisis de cambios conformacionales de polipéptidos y proteínas”, de Cicerón Ayala Orozco, departamento de química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa |
| 2010 | Director de la tesis de la licenciatura en química “Estudio teórico de hidrotalcita usando potenciales ultrasuaves y ondas planas proyectadas”, de Cristina Cautli Mejía, facultad de ciencias químicas de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. |
| 2011 | Director de la tesis de la maestría en química “Estudio teórico de la estructura del material tipo hidrotalcita Mg/Al-OH”, de Cristina Cautli Mejía, departamento de química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. |

Experiencia laboral en la academia

| | |
|------------|--|
| 1990-1992 | Auxiliar técnico en el laboratorio de química de coordinación de la maestría en química de la facultad de química de la Universidad de Guanajuato. |
| 1991-1992 | Profesor asociado de tiempo parcial de física general en la facultad de química de la Universidad de Guanajuato. |
| 1993 | Profesor de física en el colegio de Bachilleres No. 3. Distrito Federal, México. |
| 1993-1996 | Ayudante de postgrado en el área de fisicoquímica teórica de la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. |
| 1997-1999 | Profesor asociado de tiempo parcial en el área de fisicoquímica teórica de la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. |
| 2001-2007 | Científico invitado de la Sociedad Max-Planck, Instituto Fritz-Haber de la sociedad Max-Planck, Alemania. |
| 2007-2010 | Profesor invitado en el departamento de química de la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. |
| Desde 2010 | Profesor titular C de tiempo indeterminado en el departamento de química de la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. |
| Desde 2012 | Coordinador académico del laboratorio de supercómputo y visualización en paralelo de la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. |