

```

***
A restricted Hartree-Fock script using Psi4 and NumPy

import time
import numpy as np
np.set_printoptions(precision=5, linewidth=200, suppress=True)
import psi4

# Memory for Psi4 in GB
psi4.set_memory('500 MB')
psi4.core.set_output_file('output.dat', False)

# Memory for numpy in GB
numpy_memory = 2

mol = psi4.geometry("""
O
H 1 1.1
H 1 1.1 2 104
symmetry c1
""")

psi4.set_options({'basis': 'cc-pvdz',
                  'scf_type': 'pk',
                  'e_convergence': 1e-8})

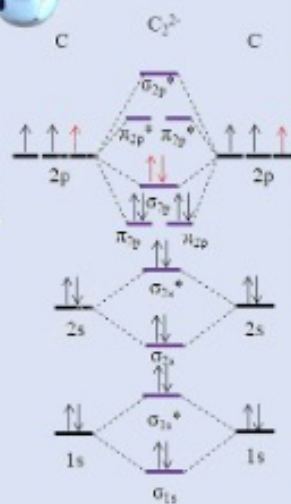
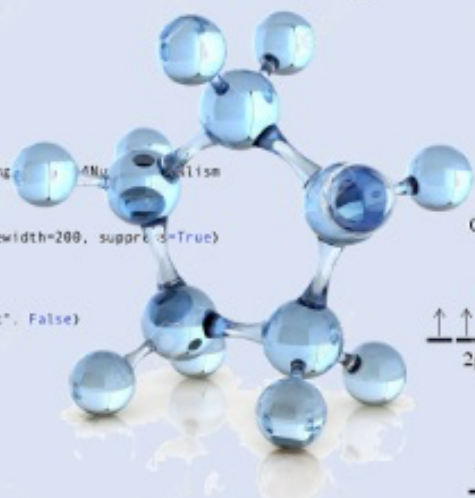
# Set defaults
maxiter = 40
E_conv = 1.0E-6
D_conv = 1.0E-3

# Integral generation from Psi4's MintsHelper
wfn = psi4.core.Wavefunction.build(mol, psi4.core.get_global_option("BASIS"))
t = time.time()
mints = psi4.core.MintsHelper(wfn.basisset())
S = np.asarray(mints.ao_overlap())

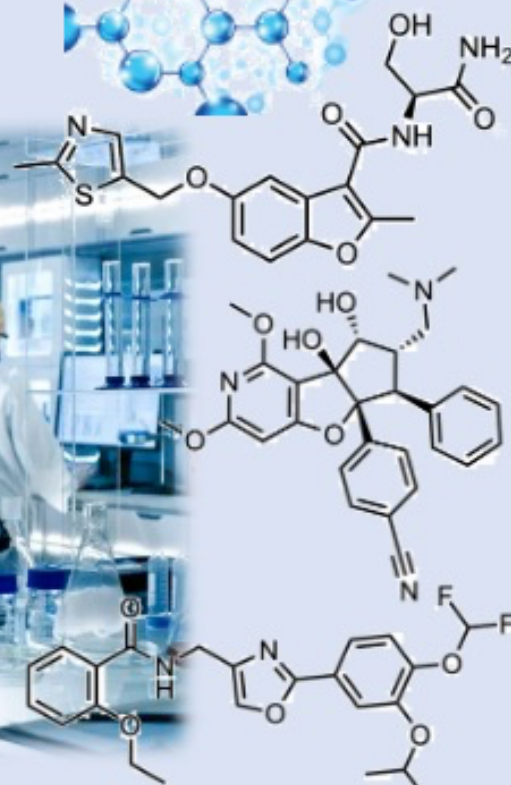
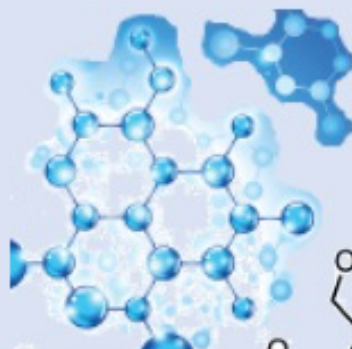
# Get nbf and ndocc for closed shell molecules
nbf = S.shape[0]
ndocc = wfn.nalpha()

print('\nNumber of occupied orbitals: %d' % ndocc)
print('Number of basis functions: %d' % nbf)

```



Química en Springer



$$\begin{aligned}
 \hat{H} = & - \sum_{\alpha=1}^{\alpha=N} \frac{\hbar^2}{2M_{\alpha}} \Delta_{\alpha} - \sum_{i=1}^{i=n} \frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i + \sum_{i,j=1}^{i=n} \sum_{j=1}^{j=n} \frac{e^2}{(4\pi\epsilon\epsilon_0) \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|} + \\
 & + \sum_{\alpha=\beta+1}^{\alpha=N} \sum_{\beta=1}^{\beta=N} \frac{q_{\alpha}q_{\beta}}{(4\pi\epsilon\epsilon_0) \|\vec{R}_{\alpha} - \vec{R}_{\beta}\|} - \sum_{\alpha=1}^{\alpha=N} \sum_{i=1}^{i=n} \frac{q_{\alpha} * e}{(4\pi\epsilon\epsilon_0) \|\vec{r}_i - \vec{R}_{\alpha}\|}
 \end{aligned}$$

La editorial Springer se ha especializado en la edición de obras de ciencia y tecnología. Desde 1842 ha editado publicaciones periódicas revisadas por pares y en el siglo XXI han ampliado y actualizado el alcance de sus obras mediante sus ediciones de libros electrónicos.

Dentro de las disciplinas científicas cubiertas por Springer está la química, por ser mi área de especialidad académica he querido comentar algunos de los libros de química publicados en los últimos cuatro lustros que me han parecido de especial relevancia por su temática y profundidad.

A este efecto y con base en su impacto, he clasificado las publicaciones que voy a comentar en tres categorías: divulgación, innovación y especificidad.

La categoría de **divulgación** comprende obras que presentan al profesional aspectos de la química que resaltan su presencia, rol o impacto particular dentro de procesos, disciplinas o metodologías que hacen manifiesta su vigencia y aplicabilidad. Sirven de base para mostrar la presencia de la química en procesos tecnológicos o en nuevas formas de comprender los fenómenos de la materia y sus transformaciones.

En la categoría de **innovación** coloco obras tomando en consideración a textos que destaquen aspectos actuales en los que se exponen nuevas tecnologías o visiones en los que la química presenta propuestas concretas o alternativas a los retos o desafíos que presenta la contemporaneidad a las ciencias y a la sociedad llevando su alcance y potencialidad a las fronteras del conocimiento o la técnica.

Por su parte de la categoría **especificidad** la he apartado para las obras que se enfocan en temas de complejidad más avanzada, o que a mí así me lo parecen desde mi humilde y cada vez más vetusta visión, destacando especialmente tópicos tanto teóricos como experimentales de particular complejidad en las que se esbozan, exploran o trazan nuevos límites al conocimiento tal y como se tiene definido a la fecha.

Las obras de cada categoría se presentan sin ningún orden específico por lo que no reflejan de un conteo regresivo ni de una ponderación basada en valores o importancia.

Divulgación

Computational Chemistry
Errol G. Lewars. 2011

Organic Reaction Mechanisms
Mar Gómez Gallego, Miguel A. Sierra. 2004

Statistical Methods for Quality Assurance
Stephen B. Vardeman, J. Marcus Jobe. 2016

Metrology in Chemistry.
Lecture Notes in Chemistry 151
Ewa Bulska. 2004

Misconceptions in Chemistry
Hans-Dieter Barke, Al Hazari y Sileshi Yitbarek. 2009

150 Years of the Periodic Table.
A Commemorative Symposium
Carmen J. Giunta, Vera V. Mainz, Gregory S. Girolami. 2021

Applied Chemistry.
A Textbook for Engineers and Technologists
O.V. Riussak y H.D. Gesser. 2013

Organic Mechanisms
Reactions, Stereochemistry and Synthesis
Reinhard Bruckner. 2010

Chemical Equilibria in Analytical Chemistry.
The Theory of Acid-Base, Complex, Precipitation and Redox Equilibria.
A Commemorative Symposium
Fritz Scholz, Heike Kahlert. 2019

Named Reactions.
A Collection of Detailed Mechanisms and Synthetic Applications
Jie Jack Li. 2009

Innovación

Innovations in Green Chemistry and Green Engineering
Paul T. Anastas. 2013

Handbook of Quality Assurance for the Analytical Chemistry Laboratory
James P. Dux. 1990

Food Analysis
S. Suzanne Nielsen. 2017

NMR - from spectra to structures.
An experimental approach
Terence N. Mitchell, Burkhard Costisella. 2007

Single-Walled Carbon Nanotubes
Preparation, Properties and Applications
Yan Li, Shigeo Maruyama. 2019

Polymeric Gene Delivery Systems.
Yiyun Cheng J. 2018

Sonochemistry.
From Basic Principles to Innovative Applications
Juan Carlos Colmenares y Gregory Chate. 2017

Applications of MALDI-TOF Spectroscopy.
Stefanie Mädler, Elisabetha Boeri Erba. 2013

Design and Analysis of Experiments.
Angela Dean, Daniel Voss y Danel Draguljić. 2019

Supramolecular Chemistry.
Fundamentals and Applications- Advanced Textbook
Katsuhiko Ariga y Toyoki Kunitake. 2006

Especificidad

X-ray and Neutron Techniques for Nanomaterials Characterization
Challa S.S.R. Kumar. 2016

Electroanalytical Methods.
Guide to Experiments and Applications
Zbigniew Stojek. 2010

The Jahn-Teller Effect
Fundamentals and Implications for Physics and Chemistry
Horst Köppel, David R. Yarkony y Heinz Barentzen. 2009

Structure determination of organic compounds.
Tables of spectral data.
E. Pretsch, P. Bühlmann, C. Affolter. 2004

Group Theory Applied to Chemistry
Amout Jozef Ceulemans. 2014

Inorganic Chemistry in Tables.
Nataliya Turova. 2011

Density Functional Theory in Quantum Chemistry.
Takao Tsuneda. 2014

Handbook of Trace Analysis
Fundamentals and Applications.
Irena Baranowska. 2015

Zintl Ions.
Principles and Recent Developments
Thomas Fässler. 2019

Helicene Chemistry
Chuan-Feng Chen, Yun Shen. 2017

Divulgación

1- Computational Chemistry –

Errol G. Lewars.

2011



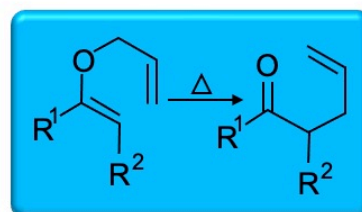
Desde que se otorgara el premio Nobel de química a John Pople en 1998 por el “Desarrollo de métodos computacionales en química cuántica”, muchos químicos pensaron que la química perdió en parte su carácter de ciencia experimental y han sido muchas las investigaciones que se han hecho en esta rama.

Verbigracia, la química computacional se utiliza ampliamente en la industria farmacéutica para explorar las interacciones de fármacos potenciales con biomoléculas, por ejemplo, acoplando un fármaco candidato al sitio activo de una enzima. También se utiliza para investigar las propiedades de los sólidos en ciencia de los materiales. Pero no reemplaza al experimento, que sigue siendo el árbitro final de la verdad sobre la Naturaleza.

2- Organic Reaction Mechanisms –

Mar Gómez Gallego, Miguel A. Sierra.

2004



Este libro escrito por catedráticos de la Universidad Complutense de Madrid presenta un análisis exhaustivo de los mecanismos de reacción de 40 casos de interacciones orgánicas divididos en tres niveles de complejidad en los que se examinan las condiciones de reacción y los mecanismos propuestos para la explicación de la obtención de algunos productos no esperados mediante mecanismos usuales como por ejemplo la Solvólisis de sales de vinilyodonio (caso 35) teniendo en cuenta la participación de grupos vecinos. Con lo que entran en acción la estereoquímica y los intermedios reactivos.

De igual modo el caso 28 explica el control preciso de la estereoquímica de los productos de reacción en la reacción de cierre de anillo electrocíclico disrotatorio desaromatizante con la ayuda de los datos experimentales.



3- Quality Assurance in Analytical Chemistry

Bernd W. Wenclawiak, Michael Koch y Evsevios Hadjicostas (Editors).

2010

En este libro se hace un vuelo rasante sobre los conceptos de sistemas de gestión de la calidad, certificación de sistemas, acreditación de laboratorios, normas de sistemas de gestión de la calidad, metrología, herramientas estadísticas para gestión y análisis de datos así como sus aplicaciones en química analítica.

Me hubiera sido de mucha utilidad conocerlo unos 22 años antes de su publicación cuando cruzaba el puente entre la universidad y el mundo corporativo, cosa que evidentemente era imposible cuando hice mi ingreso a un laboratorio de la industria con métodos de ensayo acreditados, pero la obra constituye una buena forma de minimizar la brecha que existe entre la academia y la industria y sobre la cual debemos trabajar los profesionales del área.



4- Metrology in Chemistry. (Lectures Notes in Chemistry 101)

Ewa Bulska.

2004

El campo de la metrología ha tenido un auge creciente en los últimos 30 años, período en que se ha redefinido el kilogramo, última unidad de medida que faltaba desvincular de objetos no reproducibles, se han ido incorporando conceptos como el de incertidumbre de la medición, parámetro que a diferencia de hace sólo medio siglo, ahora acompaña inclusive a las masas atómicas en la tabla periódica, por lo que la química no ha sido una excepción a este interés y han aumentado las investigaciones y nacieron publicaciones especializadas como como Accreditation and Quality Assurance dirigida por Paul De Bievre hasta su fallecimiento ocurrido el 14 de abril de 2016 y donde he podido aprender y mantenerme al día en estos tópicos que forman parte de mi acervo profesional.

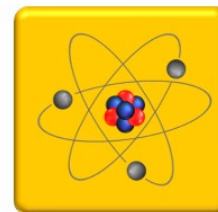
5- Misconceptions in Chemistry

Hans-Dieter Barke, Al Hazari y Sileshi Yitbarek.

2009

El profesor Hans-Dieter Barke, del departamento de química y farmacia de la Universidad de Münster unió su pluma a la de Al Hazari de la Universidad de Knoxville en Tennessee y Sileshi Yitbarek de la Universidad de Addis Abeba en Etiopía para dar lugar a este libro que está enfocado a la identificación de las percepciones erróneas o inexactas a las que se enfrentan los profesores y estudiantes de química tanto de nivel secundario como de inicios de pregrado y presenta enfoques para superarlos y/o corregirlos. Los tratamientos conceptuales y las explicaciones están bien realizados y los experimentos son muy creativos desde el punto de vista pedagógico.

Materia, sus estados, naturaleza y estructura del enlace químico son algunos de los tópicos cubiertos en este volumen por lo que es de utilidad para estudiantes que inician su recorrido por la química y sus fundamentos.



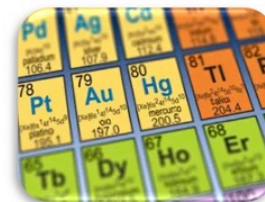
6- 150 Years of the Periodic Table –

Carmen J. Giunta, Vera V. Mainz, Gregory S. Girolami.

2021

He de confesar que esperé la publicación de este volumen para hacer el cierre del disco de respaldo de mi biblioteca digital de Springer en química. Carmen Giunta y Vera Mainz son parte del comité editor del bulletin for the History of Chemistry de la American Chemical Society, de la que tengo el honor de formar parte.

El volumen recoge 18 ponencias presentadas en el simposio “150 años de la tabla periódica” celebrado en la Reunión Nacional de la ACS de otoño de 2019 en San Diego, California con motivo de la celebración del sesquicentenario de la tabla periódica en 2019 por resolución de la Unesco. Es una interesante fuente para asomarse a los orígenes de la ley periódica, los avances que llevaron a su aceptación, las familias químicas que el sistema tuvo dificultades para integrar y la ampliación del sistema periódico para incluir elementos sintéticos.



7- Applied Chemistry. A Textbook for Engineers and Technologists

O.V. Roussak y H.D. Gesser.

2013



Tal y como señalan los autores en el prefacio, este libro está destinado a estudiantes de ingeniería que no lo han de ser del ámbito químico, los tecnólogos suelen cuestionar la razón de la presencia de un curso de química en su pensum.

Hay muchas respuestas a esta pregunta, pero la más importante es que el ingeniero profesional debe saber cuándo consultar a un químico y disponer de las herramientas adecuadas para poder comunicarse eficazmente con él. Cuando esto no se hace, las consecuencias pueden ser desastrosas para el proceso, el producto o un usuario final debido a un diseño defectuoso, una mala elección de materiales o factores de seguridad inadecuados.

El volumen busca ser una referencia primaria para tecnólogos en áreas y especialidades alejadas de la química.

8- Organic Mechanisms. Reactions, stereochemistry and synthesis

Reinhard Bruckner.

2010



Si hay un campo de la química que ejerce influjo y fascinación en quienes se adentran en sus vastas complejidades es el de la síntesis orgánica, los mecanismos que se siguen para conformar nuevos compuestos. La farmacia ha abrazado esta disciplina para convertirla en tecnología al servicio de la salud. Este libro muestra las reglas que se siguen para la constitución de moléculas orgánicas y su aplicación en la industria y permite hacerse una idea de los mecanismos teóricos que se siguen en la síntesis orgánica y como se aplican en la práctica.

Se trata de un robusto volumen de 883 páginas y 17 capítulos en los cuales se barren desde los conceptos de enlace químico la hasta alquienilaciones, arilaciones y alquienilaciones mediadas por metales de transición pasando por las clásicas reacciones de sustitución nucleofílica S_N1 y S_N2 ; en carbonos carboxílicos.

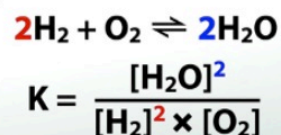
9- Chemical Equilibria in Analytical Chemistry. The Theory of Acid–Base, Complex, Precipitation and Redox Equilibria.

Fritz Scholz. Heike Kahlert

2019

Este volumen recoge la teoría de formación de los complejos ácido-base y la precipitación y su aplicación en química analítica. Equilibrio químico, ácido-base, formación de equilibrios complejos, equilibrios de solubilidad, equilibrios de Henderson-Hasselbalch para pH, productos de solubilidad (Kps) para precipitados y la ecuación de Nernst y equilibrios redox. Éstos cálculos son fundamentales para explicar la formación de numerosas especies de equilibrio en solución y que permiten la caracterización o síntesis de diversos materiales y sustancias.

En cada capítulo y sección, se destacan las partes más importantes del mecanismo bajo estudio y se dan ejemplos destacados visualmente. Este libro también incluye referencias, para ampliar fácilmente la comprensión de los tópicos cubiertos.



10-Name Reactions –

Jie Jack Lie.

2009

Este libro presenta una compilación de reacciones orgánicas que tienen en común el tener un nombre, es decir han sido bautizadas. Están organizadas en orden alfabético y para cada una se presenta su mecanismo de reacción detallado, aplicaciones en síntesis orgánica y una bibliografía en la que se lista su uso en publicaciones científicas en síntesis que resulta de mucha utilidad.

Con el advenimiento de la era digital el contenido de este libro se utilizó para configurar el núcleo de la página web www.organic-chemistry.org/namedreactions. La alimentación de esta información a la inteligencia artificial facilita muchísimo las propuestas teóricas de mecanismos de síntesis orgánica el libro es una verdadera obra de referencia angular en esta disciplina.



Innovación

1- Innovations in Green Chemistry and Green Engineering

Paul T. Anastas y Julie Zimmermann.

2013.



En las últimas décadas ha crecido el interés por reducir el impacto de los productos químicos en el medio ambiente. En respuesta a ello, surge la química verde que busca sustituir productos altamente nocivos para los ecosistemas mediante el uso de reactivos o solventes con menor impacto en la biósfera, ese es el enfoque de este libro encaminado a mostrar las últimas tendencias en esta materia para el momento de la publicación, buscando el uso de mecanismos o procesos químicos más respetuosos con el medio ambiente.

El libro está constituido por 10 artículos académicos que cubren tópicos tales como transformaciones catalíticas verdes, química verde con energía de microondas, baterías orgánicas y dióxido de carbono súper crítico como solvente verde, entre otros.

2- Handbook of Quality Assurance for the Analytical Chemistry Laboratory

James P. Dux.

1990



Este volumen resume las técnicas de aplicación en laboratorios de control de la calidad en química analítica tocando aspectos tales como cartas de control, muestreo, gestión documental, métodos de análisis, programa de aseguramiento de la calidad, auditorías, instalaciones para las diversas actividades de manufactura, control de procesos y determinación de parámetros críticos, buenas prácticas de laboratorio y acreditación.

El contenido del volumen está alineado con las exigencias de la serie de normativas ISO para laboratorios tales como ISO/IEC-17025, ISO/IEC-15189, e ISO 9001 entre otras sirviendo como guía para la implementación de sistemas de gestión de la calidad en laboratorios para los profesionales responsables del área.

3- Food Analysis.

S. Suzanne Nielsen-Book.

2017



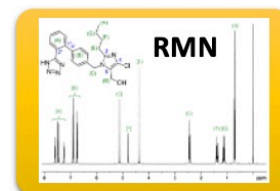
La industria alimenticia siempre ha requerido de los servicios del análisis químico, en este amplio volumen de 647 páginas se presentan actualizaciones en métodos y técnicas contemporáneas para el análisis de alimentos a través de la determinación de parámetros esenciales en la caracterización de alimentos.

Su contenido abarca tópicos que van desde los métodos oficiales de análisis, regulaciones gubernamentales, etiquetado, evaluación de data analítica, muestreo y preparación de muestras y técnicas de análisis como espectrometría de masas; espectroscopías ultravioleta, visible, de fluorescencia, infrarroja; de absorción atómica, resonancia magnética nuclear, cromatografía HPLC, análisis composicional de productos, caracterización química y ensayos asociados y análisis de componentes y de propiedades de alimentos. Toda una ejemplificación de la aplicación de la química analítica al servicio de la industria alimenticia.

4- NMR - from spectra to structures. An experimental approach.

Terence N. Mitchell, Burkhard Costisella.

2007



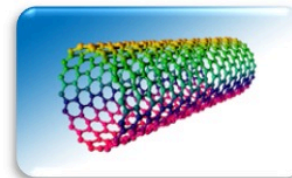
Dentro de las técnicas instrumentales de análisis para la elucidación de estructuras moleculares por métodos espectroscópicos la resonancia magnética nuclear es una de las más relevantes, en este libro se presentan equipos y técnicas actualizadas en este campo que permiten ampliar la visión del químico analítico en cuanto a los recursos disponibles para efectuar estos análisis.

Este libro pretende proporcionar las herramientas necesarias para resolver estructuras orgánicas con la ayuda de espectros de RMN. Contiene una serie de problemas que forman la Parte 2 del libro y que, para ayudar al principiante, también contienen información importante no relacionada con la RMN. Para mí fue un grato recuerdo de mis estudios de la materia en mi pregrado a la vez que una necesaria actualización en el área.

5- Single-Walled Carbon Nanotubes. Preparation, Properties and Applications.

Yang Li, Shigeo Maruyama.

2019



Dentro de los materiales más prometedores desarrollados en los últimos años se encuentran los nanotubos de carbono. Este libro está conformado por 11 trabajos que cubren temas acerca de la síntesis, preparación, propiedades y dispositivos, aplicación e industrialización de estos compuestos.

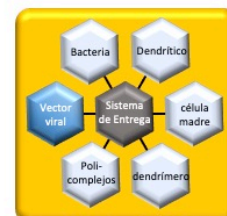
A la escala nanométrica del proceso de síntesis se ha observado y discutido el estrecho contacto entre el tubo en crecimiento y la nanopartícula metálica que permite que la materia prima molecular se descomponga, produciendo carbono atómico que luego se incorpora a la pared del tubo.

Li y Maruyama presentan aspectos relacionados con la preparación de estas estructuras, su síntesis y las aplicaciones, ¡toda una tecnología de frontera!

6- Polymeric Gene Delivery Systems. –

Yiyun Cheng J.

2018.



El tema central de esta compilación de una docena de artículos especializados es lo que Paracelso llamaría iatroquímica. Se buscan alternativas a la quimioterapia tradicional por el tratamiento de enfermedades genéticas basadas en el uso de polímeros dosificadores de nucleótidos y genes.

La terapia genética es una opción prometedora para el tratamiento de diversas enfermedades, desde infecciones virales hasta trastornos hereditarios y cánceres. Durante las últimas tres décadas, se llevaron a cabo más de 2.000 ensayos clínicos de terapia genética, pero el desarrollo de fármacos de ácidos nucleicos fue mucho más lento de lo que se esperaba inicialmente. Un desafío clave para la terapia genética clínica es la necesidad de materiales eficientes y seguros para introducir ácidos nucleicos en las células diana.

7- Sonochemistry. From basic Principles to Innovative Applications.

Juan Carlos Colmenares y Gregory Chatel.

2017

Este libro está compuesto por 11 artículos especializados sobre el uso de energía ultrasónica del rango de 20 KHz a los 2 MHz sobre soluciones. Esta energía causa fenómenos como la cavitación y formación de micro burbujas que colapsan rápidamente. Éstos estudios revisan aspectos tales como los efectos de estas ondas y las propiedades físico químicas que afectan la cinética de reacción, cambios en mecanismo de reacción así como erosión, cristalización y precipitación de productos.

Se abordan la dinámica de la oscilación de las burbujas, el proceso de difusión rectificada, responsable del crecimiento de las burbujas de cavitación, el colapso casi adiabático de estas que resulta en condiciones de reacción extremas y varias especies químicas generadas dentro de burbujas que colapsan y que son responsables de diversas reacciones redox.



8- Applications of MALDI-TOF Spectroscopy. –

Stefanie Mädler, Elisabetta Boeri Erba.

2013.

Dentro de las nuevas o crecientes mejoras en el campo de la espectrometría de masas está la ionización por distorsión láser asistida por matriz de tiempo de vuelo (MALDI-TOF) por sus siglas en inglés. La técnica ofrece una identificación rápida y precisa de microorganismos en el diagnóstico clínico, la seguridad alimentaria y la biodefensa, detectando factores de virulencia y resistencia.

Sus aplicaciones se extienden a la proteómica (descubrimiento de biomarcadores, análisis de proteínas), la metabolómica, el desarrollo de fármacos, el análisis forense (evidencia biológica) y el control de seguridad (explosivos), aprovechando su capacidad para analizar rápidamente muestras biológicas complejas.

El volumen está dividido en tres partes, con algunos entrecruzamientos. La primera parte comprende análisis biomoleculares grandes, la segunda parte es la aplicación al análisis de moléculas pequeñas y la tercera se centra en la bioinformática.





9- Design and Analysis of Experiments. –

Angela Dean, Daniel Voss y Daniel Dragullic.

2019

Incluyo este libro de la colección de textos de Springer en estadística porque como químico he participado en la supervisión y seguimiento del diseño de experimentos, materia en la cual mantenemos un constante pero sano debate con los estadísticos sobre qué rama debe más aporte al diseño de experimentos. En mi curso sobre ampliación de pensamiento estadístico este amable debate apareció en conversaciones con estudiantes egresados de la escuela de estadística de la Universidad Central de Venezuela mientras discutíamos acerca de cuadros latinos o ANOVA.

Los autores indican que en esta edición se han incluido los experimentos informáticos, un conjunto moderno de herramientas, que se utiliza ampliamente en áreas como la ingeniería biomédica y de materiales, las ciencias físicas y las ciencias biológicas.

10-Supramolecular Chemistry. Fundamentals and Applications. Advanced Textbook. –

Katsuhiko Ariga y Toyoki Kunitake.

2006



El tema de este libro es la química de las moléculas que se superponen sin entrar en una reacción química clásica, esto es la conjugación que conforma estructuras gigantes en las que no hay reacción que derive en enlaces químicos clásicos sólo interacción molecular con. El libro incluye un capítulo sobre la topología supramolecular que permite la construcción de Super moléculas que pueden tener aplicaciones por ejemplo en síntesis farmacológica

Se analiza la química del reconocimiento molecular y describen varios tipos de moléculas huésped y funciones relacionadas. El reconocimiento molecular descrito puede considerarse en muchos sentidos como el tipo más fundamental de química supramolecular, porque toda la química supramolecular se basa en cómo reconocer moléculas, cómo influir en ellas y cómo expresar funciones específicas debidas a interacciones moleculares.

Especificidad

1- X-ray and Neutron Techniques for Nanomaterials Characterization.

Challa S.S. R Kumar.

2016

Si alguien necesitaba alguna prueba de que la química tiene un papel fundamental en el desarrollo tecnológico: pues este libro les presenta una clara evidencia. La química analítica se encuentra tras bastidores de numerosos procesos tecnológicos y de actividades industriales.

Técnicas tales como la Nanotomografía en fase de rayos X de sincrotrón para la caracterización del tejido óseo; Imágenes químicas en 3D de materiales biológicos, ambientales y sintéticos a nanoescala mediante espectrotomografía STXM de rayos X suaves o la caracterización de nanoclusters atómicamente precisos mediante espectroscopia de absorción de rayos X forman parte de los trabajos que se presentan en este libro y tal como la espectroscopía de resonancia magnética nuclear trascendieron de la caracterización química hasta la tecnología para la generación de imágenes médicas.



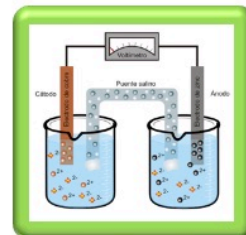
2- Electroanalytical Methods. Guide to Experiment and Applications.

Zbigniew Stojek.

2010

Este es un texto sobre la configuración experimental para ensayos electroquímicos y su uso por parte de los profesionales no formados específicamente en química. El libro persigue presentar a los usuarios de la técnica sin formación en ciencias químicas los fundamentos teóricos de la técnica así como la aplicabilidad sobre todo en el área industrial y tecnológica.

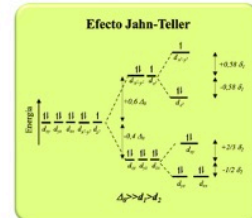
El volumen se concentra en las técnicas más importantes de aplicación en química, biología y tecnología de materiales junto con la información esencial para que sean aplicables a usuarios potenciales que no poseen conocimientos especializados en electroquímica. Se abarcan tópicos como la voltametría cíclica, el uso de la nanobalanza electroquímica de cristal de cuarzo, la espectroscopía de impedancia electroquímica, la cronoamperometría y la cronoculometría.



3- The Jahn-Teller Effect.

Horst Köppel; David R. Yarkony y Heinz Barentzen.

2009



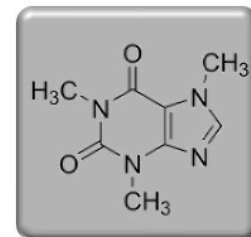
Este libro es la compilación de trabajos de numerosos autores a cada uno de los cuales se le asignó un capítulo y que en conjunto buscan poner al día lector sobre esas distorsiones en la simetría de complejos, en especial de metales de transición. Sin el efecto Jahn-Teller no sería posible explicar los espectros de algunos complejos de metales de transición por lo que un conocimiento aún somero del mismo debe formar parte del pensum de un curso avanzado de química inorgánica.

El volumen es una colección de reseñas realizadas que proporcionan una visión general completa del estado actual del campo, desde las interacciones vibrónicas hasta la interacción del efecto y la superconductividad de alta temperatura incluidos desarrollos recientes que pasan por la relación del efecto Jahn-Teller con el magnetismo molecular.

4- Structure determination of organic compounds. Tables of spectral data.

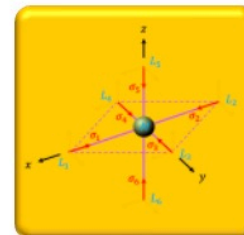
E. Pretsch, P. Bühlmann, C. Affolter.

2004



Este texto es una puesta al día de aquel que publicara en español la extinta Editorial Alhambra en 1980 y que me sirviera de texto para cursar la materia elucidación estructural de compuestos orgánicos por métodos espectroscópicos. Lamento la desaparición de la editorial Alhambra, su Colección Exedra tenía traducciones al español de excelentes libros de autores británicos y estadounidenses, sin embargo, se comprende que en estos tiempos mantener a flote una editorial para un público de nicho es un desafío ingente.

Es igualmente lamentable el deceso de los profesores Wilhelm Simon y Thomas Clerc autores que participaron en la versión de 1980 así como la jubilación del profesor Josep Seibl, sin embargo, el profesor Pretsch de esa misma generación ha seguido llevando el estandarte de este trabajo de interpretación de espectros en análisis químicos.



5- Group Theory Applied to Chemistry.

Arnout Jozef Ceulemans.

2014

La teoría de grupos es una rama de la topología y la geometría que tiene su estructura teórica como cuerpo coherente de conocimiento con un desarrollo propio. En química tiene aplicaciones en la asignación de geometría molecular a especies químicas así como en las transformaciones de simetría que son posibles en una molécula que se describen como operaciones en el álgebra de Lie permitiendo la definición de grupos puntuales de simetría.

Como rama de las matemáticas pues no es extraño que la topología se enfrente a dilemas como la imposibilidad de conocer o medir algunas cantidades como posiciones o direcciones absolutas pero el estudio de la forma de las moléculas en química permite aplicar esta teoría a la comprensión de espectros a partir de los niveles de energía asociados a diferentes geometrías moleculares.



6- Inorganic Chemistry in Tables.

Nataliya Turova.

2011

Es admirable la paciencia y el detalle que se evidencian en la confección de las tablas y diagramas que conforman el núcleo de este libro. La profesora Turova de la Universidad M. V. Lomonosóv en Moscú ha compilado en este volumen tablas descriptivas de los estados de oxidación ascendentes de diferentes elementos asociados a la química inorgánica sintetizando y exponiendo sus diferentes cambios típicos en estados de oxidación basados en las reacciones más comunes en las que se pueden ver envueltos dichos elementos.

Los compuestos se organizan de izquierda a derecha correspondiente al aumento del número de oxidación formal del elemento considerado. Para cada estado de oxidación distinto, la posición superior de la columna la ocupa un óxido, sus formas hidratadas, seguidas por las sales básicas (y oxo-) y normales.

7- Density Functional Theory in Quantum Chemistry.

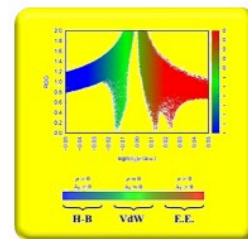
Takao Tsuneda.

2014

Este libro aborda una de las teorías más ampliamente utilizadas en el modelado molecular en química computacional: La teoría del funcional de densidad. estudiar la estructura electrónica, basado en el uso de la densidad electrónica en lugar de funciones de onda complejas, con conceptos clave como el teorema de Hohenberg-Kohn y las ecuaciones de Kohn-Sham.

En el libro se revisan la teoría de los orbitales moleculares como fundamento de las teorías de los estados electrónicos moleculares, el determinante de Slater para la función de onda y el método de Hartree-Fock basado en él.

Aunque desde 2017 han surgido críticas acerca de las implicaciones estadísticas de esta teoría, como el que pudiera estar dando un valor correcto de energías a partir de un motivo incorrecto, se sigue utilizando ampliamente en la descripción de estructuras moleculares y sus propiedades en forma satisfactoria.



8- Handbook of Trace Analysis. Fundamentals and Applications.

Irena Baranowska.

2015

Este volumen cubre la determinación analítica de trazas y Ultra trazas, tomando en consideración factores tales como los materiales de referencia certificados a usar, la descomposición de las muestras los métodos de extracción y su aplicación al análisis de trazas para diagnóstico médico y monitoreo de selectivo de drogas así como análisis forense determinación de compuestos orgánicos orgánicos volátiles y análisis de radionúclidos.

Incluye una guía sobre preparación de muestras, métodos avanzados, evaluación estadística y aplicaciones en medicina, tecnología forense, alimentos y monitoreo ambiental. Conecta conceptos fundamentales con la resolución de problemas reales.

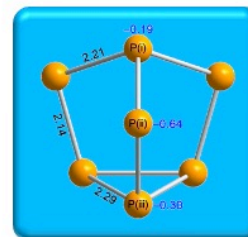
Estas determinaciones ponen a prueba los límites de detección y cuantificación de técnicas y equipos de análisis así como su relación con los errores y las incertidumbres que les están asociadas.



9- Zintl Ions. Principles and Recent Developments.

Thomas Fassler.

2019



Los iones Zintl son compuestos intermetálicos en los que los electrones de Valencia del componente más electropositivo se transfieren al socio más electronegativo conformando compuestos de estructura salina que en muchos casos contienen unidades de cúmulo aniónico de metales del bloque p y semi-metales como bloques de construcción.

Se usan en **tecnología de materiales** para crear semiconductores, aleaciones avanzadas y materiales termoeléctricos, como fuentes de Germanio en baterías de Li-ion y para diseñar materiales con propiedades magnéticas o de conversión de energía, aprovechando sus estructuras covalentes únicas.

Este libro documenta la metamorfosis de los iones Zintl desde objetos virtuosos hasta precursores valiosos para la síntesis de unidades de cúmulos de elementos del grupo principal más grandes de composición y tamaño bien definidos.

10-Helicene Chemistry.

Chuan-Feng Chen, Yun Shen.

2017



Los helicenos son un tipo de compuestos aromáticos policíclicos con estructuras no planas en forma de tornillo formadas por anillos aromáticos ortocondensados.

Se destacan por poseer quiralidad aunque no poseen ni átomos de carbono asimétricos, ni centros quirales. La quiralidad de los helicenos proviene del hecho que las hélices en sentido horario y antihorario no se pueden superponer – lo que constituye un ejemplo de quiralidad inherente.

Con el desarrollo de protocolos sintéticos, la aplicación de helicenos en catálisis asimétrica ha atraído la atención de los químicos. Hasta ahora, se han informado docenas de catalizadores basados en helicenos, los helicenos disponen de propiedades ópticas y electrónicas únicas, con aplicaciones potenciales en electrónica molecular y detección biológica por sus características quirópticas y luminiscentes.