

Curriculum Vitae

Marc Eduardo Segovia Becker

SNI/Ciencias Naturales y Exactas/Ciencias Químicas -- Categorizado Candidato
Última actualización: 05/09/2009

Áreas de actuación

- 1 Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica
- 2 Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Química Orgánica

Formación académica/Titulación

- 2000-2004** Doctorado - Doctorado en Química
Universidad de la República - Facultad de Química, Uruguay
Título: Estudio computacional de la química atmosférica de los radicales C F 3 O : una contribución a la comprensión de las transformaciones de los hidrofluorocarbonados en la atmósfera Año de obtención: 2004
Tutor: Oscar N. Ventura
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica.
- 1990-1997** Grado - Ingeniería Química
Universidad de la República - Facultad de Ingeniería, Uruguay
Título: Fabricación de Fungicidas derivados de tiocarbamatos Año de obtención: 1997
Áreas del conocimiento: Ingeniería y Tecnología/Ingeniería Química/Ingeniería de Procesos Químicos.

Formación complementaria

- 2009-2009** Cursos de corta duración
Universidad Andrés Bello, Chile
Título: Latin American School on Computational Material Sciences.
- 2002-2002** Cursos de corta duración
University of Amsterdam, Holanda
Título: Molecular Simulation.
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica.
- 2008** Talleres
Dissipative Particle Dynamics: Addressing deficiencies and establishing new frontiers,
Centre European Calcul Atomique et Moleculaire. Suiza
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica.

Idiomas

- Entiende** Portugués(Muy bien) Inglés(Muy bien) Alemán(Bien) Español(Muy bien)
Habla Portugués(Muy bien) Inglés(Muy bien) Alemán(Regular) Español(Muy bien)
Lee Portugués(Muy bien) Inglés(Muy bien) Alemán(Bien) Español(Muy bien)
Escribe Portugués(Muy bien) Inglés(Muy bien) Alemán(Regular) Español(Muy bien)

Actuación profesional

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas - PEDECIBA

Vínculos con la institución

2008 - Actual **Vínculo: Colaborador. Encuadramiento funcional: Investigador Grado 3.**

Otras informaciones Area Química

Actividades

Universidad de la República - Facultad de Química - UDELAR

Vínculos con la institución

1994 - Actual **Vínculo: Funcionario/Empleado. Carga horaria: 20.**

Actividades

- 08/2008 - Actual** *Docencia/Enseñanza*, Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA),
Nivel: Maestría
Disciplinas dictadas
1. Mecánica Cuántica.
2. Introducción Mecánica Estadística.
- 05/2002 - Actual** *Gestión Académica*, Facultad de Química
Cargos o funciones
1. Comisión.
- 03/1996 - Actual** *Docencia/Enseñanza*, Magister en Química,
Nivel: Maestría
Disciplinas dictadas
1. Mecánica Cuántica.
- 05/2005 - 05/2007** *Proyectos de Investigación y Desarrollo*, Facultad de Química, Química Cuántica
Participación en proyecto
1. [Dioxinas : una visión micro, meso y macro.](#)
- 03/2000 - 03/2002** *Proyectos de Investigación y Desarrollo*, Facultad de Química, Química Cuántica

Proyectos de investigación y desarrollo

2005 - 2007 [Dioxinas : una visión micro, meso y macro](#)

Coordinador o Responsable

Descripción: Comenzando con el modelado de clorobenzenos, con reacciones isodesmicas, obteniendo sus calores de formación se analizaron las reacciones de formación de los dibenzofuranos policlorados, utilizando métodos de química computacional (funcionales de la densidad) y el mecanismo de reacción de formación de clorofenoles, usando dinámica computacional ab initio (car-parrinello) Los resultados producen 2 artículos en elaboración.

Situación: Concluido; Tipo/Clase: Investigación.

Alumnos: Pregrado (0); Especialización (0); Maestría académica (0); Maestría profesionalizante (0); Doctorado (0).

Integrantes: *Marc Segovia* (Responsable).

Financiador(es): ; Universidad de la República -Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDELAR-CSIC

(Apoyo financiero)

2000 - 2002 [Desarrollo a primeros principios de un reactor modelo para la producción de óxido de propileno como precursor petroquímico a partir de propano y oxígeno molecular](#)

Coordinador o Responsable

Descripción: Se modelaron las 11 reacciones en serie y paralelo, de formación del óxido de propileno, usando métodos de química computacional (funcionales de la densidad) y teoría variacional del estado de transición. Las reacciones involucradas implican fundamentalmente radicales libres.

Situación: Concluido; Tipo/Clase: Investigación.

Alumnos: Pregrado (0); Especialización (0); Maestría académica (0); Maestría profesionalizante (0); Doctorado (1).

Integrantes: *Marc Segovia* (Responsable).

Financiador(es): ; Universidad de la República -Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDELAR-CSIC

(Apoyo financiero)

Significación de su trabajo en el contexto de los principales problemas planteados en su área

La investigación realizada se enfoca a 3 grandes áreas a) Modelado Multiescala : funcionales de la densidad, dinámica molecular, Car Parrinello, Monte Carlo, Fluido dinámica Computacional, Métodos Mesoscópicos b) Química Atmosférica y Contaminantes Persistentes : mecanismos y velocidad de reacción, funcionales de la densidad, métodos ab-initio c) Solvatación en reacciones químicas : solventes acuosos y no acuosos, modelos con solvente implícito y explícito. Desde el punto de Ingeniería Química el trabajo avanza en la comprensión microscópica y mesoscópica de los procesos, abriendo la posibilidad de optimizar y evaluar la eficiencia de los mismos. Desde el punto de vista de la Química Básica se predicen propiedades termodinámicas importantes de compuestos atmosféricos una alta calidad técnica, mejorando la comprensión en situaciones donde la experimentación directa es compleja.

Producción bibliográfica

Artículos completos publicados en revistas NO arbitradas

1 [Marc Segovia DFT Thermochemistry : accurate determination of enthalpy of formation of perfluoropropane. Chemical Physics Letters, v. 403 , p. 378-384, 2005.](#)

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Química Orgánica.

Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 0009-2614

2 [Marc Segovia A discrepancy between experimental and theoretical thermochemical characterization of some oxygen fluorides. Chemical Physics Letters, v. 287 , p. 597-600, 1998.](#)

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Química Orgánica.

Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 0009-2614

3 [Marc Segovia Density Functional and G2 Study of the Strength of the OH bond in CF3OH. Chemical Physics Letters, v. 277 , p. 490-496, 1997.](#)

Palabras Clave: thermochemistry; density functional

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Química Orgánica.

Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 0009-2614

Capítulos de libros publicados

1 [Marc Segovia, Computational chemistry tools for the study of environmental chemistry problems. In: José Luis Paz and Antonio J. Hernández \(Org.\). New Developments in Quantum Chemistry. Kerala, India, Transworld Research Network,, 2009, p. 109-164, ISBN: 9788178954462](#)

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/química computacional.

Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 9788-1789

Resúmenes expandidos en anales de eventos

1 [Marc Segovia Mecanismo de producción de Óxido de Propileno en fase homogénea a partir propano y oxígenos molecular. In: Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, 2002 Montevideo . 2002.](#)

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica.

; Medio de divulgación: Papel

2 [Marc Segovia Reacciones de CF3O con alcanos, NO, CO y CO2 : Estudio termoquímico y cinético. In: Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, 2002 Montevideo . 2002.](#)

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica.

; Medio de divulgación: Papel

3 [Marc Segovia Calculo del calor de formación de los fluorometanos utilizando DFT. In: Congreso de Físicoquímica del Mercosur, 1999 Santa Fe, Argentina . 1999.](#)

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica.

; Medio de divulgación: Papel

4 [Marc Segovia Estudio Computacional de la transformación tautomérica de la formamida. In: Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, 1996 Cáceres, España . 1996.](#)

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica.

; Medio de divulgación: Papel

Producción técnica

Evaluaciones

Formación de RRHH

Otros datos Relevantes

Presentaciones en eventos

1 DFT on atmospheric chemistry- presentacion oral 2009. (Participación en eventos/Seminario).

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/química computacional.

Referencias adicionales: Chile; Nombre del evento: Latin American School Materials Science; Nombre de la institución promotora: Universidad Andres Bello.

Se hizo una presentación oral sobre aplicaciones del metodo de funcionales de la densidad en química atmosferica, refiriendo a los antecedentes de nuestro grupo y los ultimos trabajos realizados con furanos, clorobenzenos y clorofenoles, estos tres aun sin publicacion, excepto el capitulo de un libro.

Información Adicional

- Proyecto de Iniciación de la CSIC "Desarrollo a primeros principios de un reactor modelo para la producción de oxido de propileno como precursor petroquímico a partir de propano y oxígeno molecular", 7/2000-7/2002 - Proyecto I+D de CSIC " Dioxinas : una visión micro, meso y macro" 4/2005-4/2007 (06/11/2007) (11/04/2008)

Indicadores de producción

	Total
Producción bibliográfica	8
Artículos publicados en revistas científicas	3
Completo en revistas NO arbitradas	3
Libros y capítulos de libros publicados	1
Capítulos de libros publicados	1
Trabajos en eventos	4
Resumen expandido	4

	Total
Producción técnica	0

	Total
Evaluaciones	0

	Total
Formación de RRHH	0
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluídas	0

	Total
Otros datos Relevantes	1
Participación en eventos	1