

Curriculum Vitae

A. Datos Personales

1. Nombre: Jorge Garza Olguín.
2. Lugar y fecha de Nacimiento: México D. F. 04 de Abril de 1966.
3. Nacionalidad: Mexicana.

B. Datos Laborales

- Puesto Actual: Profesor Titular de Tiempo Completo
Departamento de Química
División de Ciencias Básicas e Ingeniería
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa
Antigüedad en el cargo: Abril de 1998 a la fecha
- Domicilio Laboral: Departamento de Química, División de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, A.P. 55-534, Iztapalapa 09340, México, D.F.

Teléfonos: 5804-6414
FAX: 5804-4666.

C. Cargos Académicos Desempeñados

- *Profesor de física y matemáticas a nivel medio superior.
Colegio Madrid. México, D. F. 1989-1994.
- *Profesor ayudante de Química General.
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. México, D. F. 1987-1990.
- *Profesor de Tiempo Completo del Departamento de Química de la Universidad Autónoma Metropolitana. 1990 a la fecha.
- *Científico visitante en el Pacific Northwest National Laboratory. E.U.A.
Diciembre de 1998 a Septiembre del 2000.
- *Profesor invitado en el Departamento de Química de la Universidad de Turín, Italia.
Agosto de 2009 a Julio de 2010.

D. Cargos Administrativos

- * Coordinador de Ciencias Naturales
Colegio Madrid. México, D. F. 1993-1994.
- *Coordinador de la asignatura Laboratorio de Simulación
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. México, D. F.
Septiembre del 2000-Julio del 2003.
- * Jefe del área de Fisicoquímica Teórica
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. México, D. F.
01 de Diciembre del 2003 – 10 de Octubre del 2004
- * Coordinador del Laboratorio de Supercómputo y Visualización en Paralelo
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. México, D. F.

11 de Octubre del 2004 –18 de Enero del 2009

E. Formación Académica

Licenciatura:

Licenciado en Química.

Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa.

Proyecto Terminal: Estudio de la dureza local dentro de la formulación termodinámica del gas de electrones inhomogéneo.

Asesor: Dr. Juvencio Robles.

Iztapalapa, México D. F.

Julio de 1989.

Maestría:

Maestro en Ciencias (Física).

Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa.

Tesis: Estudio del funcional de Hohenberg y Kohn aplicado a sistemas atómicos.

Asesor: Dr. Juvencio Robles.

Iztapalapa, México D. F.

Marzo de 1992.

Doctorado:

Doctor en Ciencias (Química).

Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa.

Tesis: Atomas confinados dentro de la teoría de funcionales de la densidad.

Asesor: Dr. Alberto Vela.

Iztapalapa, México D. F.

Julio de 1997.

F. Nivel en el S. N. I.

Miembro del Sistema Nacional de Investigadores en el área de Ciencias Exactas, en la disciplina de Física y en la subdisciplina de Física Atómica y Molecular. Investigador Nivel III.

G. Producción Científica

Publicaciones Nacionales con arbitraje

1. Avelino Cortés-Santiago, Rubicelia Vargas y Jorge Garza. *Noble gases encaged by the C₆₀ increase their chemical reactivity*. J. Mex. Chem. Soc. **56**, 270-274 (2012).
2. José Zeferino Ramírez, Rubicelia Vargas, Itzia I. Padilla-Martínez, Anaid G. Flores-Huerta and Jorge Garza. *The role of the CH/π weak interaction in the geometrical conformation: An aromatic acetamide derivative system as an example*. J. Mex. Chem. Soc. **56**, 275-278 (2012).
3. Felipe Aparicio, Jorge Garza, y Marcelo Galván. *Application of the Active Space Self-Interaction-Correction Method to Molecular Systems*. J. Mex. Chem. Soc. **56**, 338-345 (2012).
4. Jorge Garza, Usando Mathematica® para la evaluación de integrales bielectrónicas con orbitales hidrogenoides. Contactos. **81**, 5-10 (2011).

5. Norberto Aquino, Jorge Garza, Germán Campoy and Alberto Vela. *Energy eigenvalues for free and confined triple-well potentials*. Rev. Mex. Fis. **57**, 46-52 (2011).
6. José Zeferino Ramírez, Rubicelia Vargas and Jorge Garza. *The Role of the Linearity on the Hydrogen Bond in the Formamide Dimer: A BLYP, B3LYP and MP2 Study*. J Mex. Chem. Soc. **52**, 31-35 (2008).
7. Jorge Garza. *Búsqueda de puntos críticos y elaboración de gráficas de funciones de varias variables con Mathematica*. Contactos. **63**, 22-27 (2007).

Publicaciones Internacionales con arbitraje

1. Jorge Garza and Juvencio Robles. *Density-functional-theory softness kernel*. Phys. Rev. A **47**, 2680 (1993).
2. Jorge Garza and Juvencio Robles. *Local hardness revisited: Definition and the spin-polarized Kohn-Sham formulation of density functional theory*. Int. J. Quantum Chem. **49**, 159 (1994).
3. Rubicelia Vargas, Jorge Garza and Alberto Vela. *Strongly Convergent Method to Solve One-Dimensional Quantum Problems*. Phys. Rev. E, **53**, 1954 (1996).
4. Rubicelia Vargas, Jorge Garza and Alberto Vela. Reply to “Comment on Strongly Convergent Method to Solve One-Dimensional Quantum Problems”. Phys. Rev. E, **56**, 1283 (1997).
5. Jorge Garza, Rubicelia Vargas and Alberto Vela. *Numerical self-consistent Field Method to Solve the Kohn-Sham Equations in Confined Many-Electron Atom*. Phys. Rev. E, **58**, 3949(1998)
6. Jorge Garza and Alberto Vela. *Comment on “Eigenvalue spectrum of the independent-fermion kinetic-energy kernel”*. Phys. Rev. A **58**, 3358 (1998).
7. Jorge Garza, Jeffrey A. Nichols and David A. Dixon. *The Hartree product and the description of local and global quantities in atomic systems: A study within Kohn-Sham theory*. J. Chem. Phys. **112**, 1150 (2000).
8. Jorge Garza, Jeffrey A. Nichols and David A. Dixon. *The optimized effective potential and the self-interaction correction in density functional theory: Application to molecules*. J. Chem. Phys. **112**, 7880 (2000).
9. Rubicelia Vargas, Jorge Garza, David Dixon and Benjamin P. Hay. *How Strong is the C(alpha)-H...O=C Hydrogen Bond?* J. Am. Chem. Soc. **122**, 4750 (2000).
10. Rubicelia Vargas, Jorge Garza, David Dixon and Benjamin P. Hay. *Conformational Analysis of N, N,N',N'-tetramethylsuccinamide: The role of C-H...O Hydrogen bond*. J. Phys. Chem. A. **104**, 5115 (2000).
11. Jorge Garza, Rubicelia Vargas, Alberto Vela and Kalidas D. Sen. *Shell Structure and Confined Atoms Using the Density Functional Theory*. Jounal of Molecular Structure (THEOCHEM) **501-502**, 183 (2000).
12. Kalidas D. Sen, Jorge Garza, Rubicelia Vargas and Alberto Vela. *Atomic Ionization Radii using Janak's Theorem*. Chem. Phys. Lett. **325**, 29 (2000).
13. Jorge Garza, Jeffrey A. Nichols and David A. Dixon. *The role of the local-multiplicative Kohn-Sham potential on the description of occupied and unoccupied orbitals*. J. Chem. Phys. **113**, 6029 (2000).

14. Jorge Garza, Rubicelia Vargas, Jeffrey A. Nichols and David A. Dixon. *Orbital energy analysis with respect to LDA and self-interaction corrected exchange-only potentials*. J. Chem. Phys. **114**, 639 (2001).
15. Rubicelia Vargas, Jorge Garza, David A. Dixon and Benjamin P. Hay. *C(sp₂)-C(Aryl) bond rotation barrier in N-methylbenzamide*. J. Phys. Chem A **105**, 774(2001).
16. Rubicelia Vargas, Jorge Garza, Friesner, R. A., Stern, H., Benjamin P. Hay, David A. Dixon. *Strength of the N-H...O=C and C-H...O=C Bonds in Formamide and N-Methylacetamide Dimers*. J. Phys. Chem. A **105**, 4963 (2001).
17. Rubicelia Vargas, Jorge Garza, David A. Dixon and Benjamin P. Hay. *Conformational analysis of N-benzylformamide*. J. of Mol. Struc. (THEOCHEM) **541**, 243 (2001).
18. Benjamín P. Hay, David A. Dixon, Rubicelia Vargas, Jorge Garza and Kenneth N. Raymond. *Structural Criteria for the Rational Design of Selective Ligands. 3. Quantitative Structure-Stability Relationship for Iron (III) Complexation by Tris-Catecholamide Siderophores*. Inorganic Chemistry **40**, 3922 (2001).
19. Arup Banerjee, K. D. Sen , Jorge Garza and Rubicelia Vargas. *Mean excitation energy, static polarizability, and hyperpolarizability of the spherically confined hydrogen atom*. J. Chem. Phys. **116**, 4054 (2002).
20. K. D. Sen, Jorge Garza, Rubicelia Vargas and Norberto Aquino. *Static dipole polarizability of shell-confined hydrogen atom*. Phys. Lett. A. **295**, 299 (2002).
21. Rubicelia Vargas, Jorge Garza, Benjamin P. Hay and David A. Dixon. *Conformational study of the Alanine Dipeptide at the MP2 and DFT levels*. J. Phys. Chem. A **106**, 3213 (2002).
22. Felipe Aparicio, Jorge Garza, Andrés Cedillo, Rubicelia Vargas and Marcelo Galván. *The local multiplicative potential of the self-interaction corrected approximation. Reviews of Modern Quantum Chemistry*, pag. 755-786. Edited by K. D. Sen. World Scientific. Singapore 2002.
23. Jorge Garza, Carl A. Fahlstrom, Rubicelia Vargas, Jeffrey A. Nichols and David A. Dixon. *Orbitals from molecular orbital and density functional theories for ionic systems. Reviews of Modern Quantum Chemistry*, pag. 1508-1536. Edited by K. D. Sen. World Scientific. Singapore 2002.
24. Rubicelia Vargas, Andrés Cedillo, Jorge Garza and Marcelo Galván. *Reactivity criteria in spin-polarized density functional theory. Reviews of Modern Quantum Chemistry*, pag. 936-965. Edited by K. D. Sen. World Scientific. Singapore 2002.
25. K. D. Sen, B. Mayer, P. C. Schmidt, Jorge Garza, Rubicelia Vargas, Alberto Vela. *Static dipole and quadrupole polarizability of confined hydrogen atom with Z=N/3 (N=1-5)*. Int. J. Quantum. Chem. **90**, 491-496 (2002).
26. Martín Gómez, Ignacio González, Felipe J. González, Rubicelia Vargas and Jorge Garza. *The association of neutral systems linked by hydrogen bond interactions: a quantitative electrochemical approach*. Electrochemistry Communications **5**, 12-15 (2003).
27. Jorge Garza, Rubicelia Vargas, Martín Gómez, Ignacio González and Felipe J. González. *Theoretical and Electrochemical Study of the Quinone-Benzoic Acid adduct linked by Hydrogen Bonds*. J. Phys. Chem. A **107**, 11161-11168 (2003).

28. Myrna H. Matus, Jorge Garza and Marcelo Galván. *Basis set effects on frontier molecular orbital energies and energy gaps: A comparative study between plane waves and localized basis functions in molecular systems.* J. Chem. Phys. **120**, 10359-10363 (2004).
29. Benjamin P. Hay, Maciej Gutowski, David A. Dixon, Jorge Garza, Rubicelia Vargas, and Bruce A. Moyer. *Structural Criteria for the Rational Design of Selective Ligands: Convergent Hydrogen Bonding Sites for the Nitrate Anion.* J. Am. Chem. Soc. **126**, 7925-7934 (2004).
30. K. D. Sen, Jorge Garza, Rubicelia Vargas and Alberto Vela. *Effective pressure induced electronic transition in spherically confined alkali metal atoms.* Proc. Indian Natl. Sci. Acad. **70A**, 675-681 (2004).
31. Jorge Garza, José-Zeferino Ramírez and Rubicelia Vargas. *The role of Hartree-Fock and Kohn-Sham orbitals in the basis set superposition error for systems linked by hydrogen bonds.* J. Phys. Chem. A. **109**, 643-651 (2005).
32. Rubicelia Vargas, Jorge Garza, Friesner, R. A., Stern, H., Benjamin P. Hay, David A. Dixon. *Reply to Comment on “Strength of the N-H...O=C and C-H...O=C Bonds in Formamide and N-Methylacetamide Dimers”.* J. Phys. Chem. A **109**, 6991-6992 (2005)
33. Jorge Garza, Rubicelia Vargas, Andrés Cedillo, Marcelo Galván and Pratim Kumar Chattaraj. *Comparison between the frozen core and finite differences approximations for the generalized spin-dependent global and local reactivity descriptors in small molecules.* Theor. Chem. Accounts. **115**, 257-265 (2006).
34. Jorge Garza, Rubicelia Vargas, Norberto Aquino and K. D. Sen. *DFT reactivity indices in confined many-electron atoms.* J. Chem. Sciences. **117**, 379-386 (2005).
35. Rubicelia Vargas, Jorge Garza and Andrés Cedillo. *A Koopmans-like approximation in the Kohn-Sham method and the impact of the frozen core approximation on the computation of the reactivity parameters of the density functional theory.* J. Phys. Chem. A **109**, 8880-8892 (2005).
36. Myrna H. Matus, Jorge Garza and Marcelo Galván. *The effect of double bonds on the conducting properties of ciguatoxin 3C and tetrahydropyran based polymers: A theoretical study.* J. Phys. Chem. B **110**, 1172-1178 (2006).
37. N. Aquino, Jorge Garza, A. Flores-Riveros, J. F. Rivas-Silva and K. D. Sen. *Confined helium atom low-lying s-states analyzed through correlated Hylleraas wave functions and the Kohn-Sham Model.* J. Chem. Phys. **124**, 054311 (2006).
38. Álvaro Vazquez-Mayagoitia, Rubicelia Vargas, Jeffrey A. Nichols, Patricio Fuentealba and Jorge Garza. *Relationship between singlet-triplet excitation energies and the Kohn-Sham orbitals obtained with potentials that exhibit a wrong asymptotic behavior.* Chem. Phys. Lett. **419**, 207-212 (2006).
39. Carlos Frontana, Álvaro Vázquez-Mayagoitia, Jorge Garza, Rubicelia Vargas and Ignacio González. *Substituent Effect on a Family of Quinones in Aprotic Solvents: An Experimental and Theoretical Approach.* J. Phys. Chem. A. **110**, 9411-9419 (2006).
40. José-Zeferino Ramírez, Rubicelia Vargas, Jorge Garza and Benjamin P. Hay. *Performance of the Effective Core Potentials of Ca, Hg, and Pb in Complexes with Ligands Containing N and O Donor Atoms.* J. Chem. Theory and Comput. **2**, 1510-1519 (2006).
41. José Luis Gázquez, Jorge Garza, Fernando D. Hinojosa and Alberto Vela. *Chemical hardness and the discontinuity of the Kohn-Sham exchange-correlation potential.* J. Chem. Phys. **126**, 214105 (2007).

42. Alejandra M. Navarrete-López, Jorge Garza and Rubicelia Vargas. *Relationship between the Critical Points Found by the Electron Localization Function and Atoms in Molecules Approaches in Adducts with Hydrogen Bonds*. J. Phys. Chem. A. **111**, 11147-11152 (2007).
43. Alejandra M. Navarrete-López, Jorge Garza and Rubicelia Vargas. *The Kohn-Sham kinetic energy density as indicator of the electron localization: Atomic shell structure*. J. Chem. Phys. **128**, 104110(1)-104110(8) (2008).
44. José L. Gázquez, Jorge Garza, Rubicelia Vargas and Alberto Vela. *An Exchange-Correlation Potential With Built in Discontinuity and Correct Long Range Behavior*. CP979, Recent Developments in Physical Chemistry, 3rd Mexican Meeting on Mathematical and Experimental Physics, edited by E. Díaz-Herrera and E. Juaristi. American Institute of Physics. 11-20 (2008).
45. Jorge Garza, Rubicelia Vargas and K. D. Sen. *Electronic Structure of Confined Atoms. In Chemical Reactivity Theory: A Density Functional View*. CRC Press. Edited by Pratim K. Chattaraj. 521-537. 2009.
46. Jorge Garza and Rubicelia Vargas. *Comparative study between the Hartree-Fock and Kohn-Sham models for the lowest singlet and triplet states of the confined helium atom*. Advances in Quantum Chemistry. **57**, 241-254 (2009).
47. Doris Guerra, Rubicelia Vargas, Patricio Fuentealba and Jorge Garza. *Modeling pressure effects on the electronic properties of Ca, Sr, and Ba by the confined atoms model*. Advances in Quantum Chemistry. **58**, 1-12 (2009).
48. Álvaro Vázquez-Mayagoitia, Jorge Garza, Rubicelia Vargas, Carlos Frontana, Martín Gómez, Ignacio González and José Luis Gázquez. *Simple charge transfer model for one electron oxidation and reduction processes: Describing reactive sites in benzocarbazolediones and gallates*. Journal of Molecular Structure (TEOCHEM). **943**, 59-64 (2010).
49. José-Zeferino Ramírez, Rubicelia Vargas, Jorge Garza and José L. Gázquez. *Simple Charge Transfer Model for Metallic Complexes*. J. Phys. Chem. A. **114**, 7945-7951 (2010).
50. L. Maschio, M. Ferrabone, A. Meyer, J. Garza, R. Dovesi. *The infrared spectrum of spessartine Mn₃Al₂Si₃O₁₂: An ab initio all electron simulation with five different functionals (LDA, PBE, PBESOL, B3LYP and PBE0)*. Chem. Phys. Lett. **501**, 612-618 (2011).
51. José-Zeferino Ramírez, Rubicelia Vargas and Jorge Garza. *The role of conformational changes in the signal enhancement of a selective chemosensor of Pb²⁺*. Physical Chemistry Chemical Physics. **14**, 495-501 (2012).
52. Jorge Garza, Julio M. Hernández Pérez, José-Zeferino Ramírez and Rubicelia Vargas. *Basis set effects on the Hartree-Fock description of confined many-electron atoms*. Journal of Physics B: Atomic, Molecular & Optical Physics. **45**, 015002-6 pages (2012).
53. Guillermo Nieto-Malagón, Julio M. Hernández-Pérez, Rubicelia Vargas and Jorge Garza. *Effect of a uniform electric field on atomic and molecular systems*. In Theoretical and Computational Developments in Modern Density Functional Theory. Edited by A. K. Roy. Nova Science Publishers, 2012.
54. Albert Rimola, Marta Corno, Jorge Garza and Piero Ugliengo. *Ab initio modelling of protein-biomaterial interactions: influence of amino acid polar side chains on adsorption at hydroxyapatite surfaces*. Phil. Trans. R. Soc. A **370**, 1478-1498 (2012).

55. Hilda Santillán-Vargas, José-Zeferino Ramírez, Jorge Garza and Rubicelia Vargas. *Density-Functional-Theory Study of alpha-Cyclodextrin inclusion complexes*. Int. J. Quantum Chem. **112**, 3587-3593 (2012).
56. Guillermo Nieto-Malagón, Julio M. Hernández-Pérez, Rubicelia Vargas and Jorge Garza. *Electrostatic potential effects of beta-cyclodextrin on optical properties of the 4-dimethyl-aminobenzonitril*. Int. J. Quantum Chem. **112**, 3552-3557 (2012).
57. Javier Carmona-Espíndola, Isaías Alcalde-Segundo, Rubicelia Vargas and Jorge Garza. *Many-Body Perturbation Theory to Second Order Applied on Confined Helium Like Atoms*. In COMPUTATIONAL AND EXPERIMENTAL CHEMISTRY: Developments and applications. CRC Press, New Jersey, 2013.
58. Erwin García-Hernández, Cecilia Díaz-García, Rubicelia Vargas and Jorge Garza. *Four-index integral transformation in many-body perturbation theory and electron propagator to second order on GPUs for confined atoms*. AIP Conf. Proc. **1558** 1528-1531 (2013).
59. Analilia Sánchez, Roberto C. Guillén-Villara, Rodrigo Sánchez, Rubicelia Vargas, Jorge Garza, Myrna H. Matus, Magali Salas-Reyes, Zaira Domínguez. *Electrochemical Oxidation of Symmetrical Amides of Ferulic Acid in Aprotic Medium*. Electrochimica Acta **133** 546-554 (2014).
60. Jorge Garza and Rubicelia Vargas. *Density Functional Theory Applied on Confined Many-Electron Atoms*. In Electronic Structure of Quantum Confined Atoms and Molecules (ISBN 978-3-319-09982-8). Springer, Cham, 2014.
61. Erwin García-Hernández, Cecilia Díaz-García, Rubicelia Vargas and Jorge Garza. *Implementation of the electron propagator to second order on GPUs to estimate the ionization potentials of confined atoms*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **47** 185007 (7pp) (2014).
62. Raymundo Hernández-Esparza, Sol-Milena Mejía-Chica, Andy D. Zapata-Escobar, Alfredo Guevara-García, Apolinar Martínez-Melchor, Julio-M. Hernández-Pérez, Rubicelia Vargas, and Jorge Garza. *Grid-Based Algorithm to Search Critical Points, in the Electron Density, Accelerated by Graphics Processing Units*. J. Comput. Chem. **35** 2272-2278 (2014).

H. Congresos

1. *Energy Splittings and Tunneling Probabilities in the Inversion of AX3 Molecules*, Sanibel Symposium, St. Augustine, Florida, Marzo de 1993.
2. *Implementation of a New Matrix Method for the Solution of One Dimensional Problems: Tunneling Probabilities in Symmetric and Asymmetric Double Wells*, Sanibel Symposium, St. Augustine, Florida, Marzo de 1993.
3. *Confined Atoms in Kohn-Sham Theory: Nuclear Cusps and Shell Collapse*, Sanibel Symposium, St. Augustine, Florida, Febrero de 1996.
4. *Estudio Comparativo de Sistemas Enlazados por Puentes de Hidrógeno Débiles*. Primera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. Del 5 al 7 de Diciembre del 2002, Cuernavaca, Morelos.
5. *Los cúmulos de PCs como alternativa de cómputo para la Química Cuántica*. Primera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. Del 5 al 7 de Diciembre del 2002, Cuernavaca, Morelos.
6. *Estructura electrónica de toxinas marinas*. Primera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. Del 5 al 7 de Diciembre del 2002, Cuernavaca, Morelos.
7. *Singlet-triplet excitation energy and the HOMO-LUMO Kohn-Sham energies. The applications of density functional theory in chemistry and physics*. Bruselas, Bélgica, Septiembre de 2003.
8. *El error por superposición de la base sobre los orbitales de Kohn-Sham y Hartree-Fock en sistemas unidos por puentes de hidrógeno*. Segunda Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 20 – 22 de Noviembre del 2003. Guanajuato, México.

- 9.** *Relación de las energías de excitación triplete-singlete con la diferencia de energía de los orbitales frontera de Kohn-Sham.* Segunda Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 20 – 22 de Noviembre del 2003. Guanajuato, México.
- 10.** *Estudio teórico de ciclodextrinas como complejos de inclusión.* Segunda Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 20 – 22 de Noviembre del 2003. Guanajuato, México.
- 11.** *Ajuste analítico de pseudopotenciales con conservación de la norma.* Tercera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 18 – 20 de Noviembre del 2004. Puebla, México.
- 12.** *Efecto del solvente sobre oxianiones.* Tercera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 18 – 20 de Noviembre del 2004. Puebla, México.
- 13.** *Teoría de funcionales de la densidad en el estudio de α -ciclodextrina y algunos complejos de inclusión.* Tercera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 18 – 20 de Noviembre del 2004. Puebla, México.
- 14.** *Evaluación de constantes de apantallamiento de RMN con métodos de la química cuántica en sistemas ligados por puentes de hidrógeno.* Tercera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 18 – 20 de Noviembre del 2004. Puebla, México.
- 15.** *Energías de excitación del átomo de helio confinado usando funciones generalizadas de Hylleras y la teoría de funcionales de la densidad.* Tercera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 18 – 20 de Noviembre del 2004. Puebla, México.
- 16.** *Caracterización de puentes de hidrógeno intramoleculares usando la constante de apantallamiento RMN.* Cuarta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 17 – 19 de Noviembre del 2005. Chihuahua, México.
- 17.** *Descripciones basadas en una función de onda variacional y en el modelo de Kohn-Sham para analizar los estados más bajos de simetría S del átomo de helio confinado.* Cuarta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 17 – 19 de Noviembre del 2005. Chihuahua, México.
- 18.** *Estudio de la electronegatividad y dureza en átomos confinados.* Cuarta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 17 – 19 de Noviembre del 2005. Chihuahua, México.
- 19.** *Superficies de energía potencial Kohn-Sham, Hartree-Fock y MP2 corregidas por el BSSE.* Cuarta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 17 – 19 de Noviembre del 2005. Chihuahua, México.
- 20.** *Estudio teórico y experimental de algunos derivados de la formil-fenil-formamida: Comparación entre B3LYP y MP2.* Cuarta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 17 – 19 de Noviembre del 2005. Chihuahua, México.
- 21.** *Importancia de la conjugación y los puentes de hidrógeno intramoleculares en la estabilidad de oxamidas.* Quinta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 16 – 19 de Noviembre de 2006. San Luis Potosí, México.
- 22.** *Estudio teórico de la complejación de Ca^{2+} , Hg^{2+} y Pb^{2+} por ligantes multidentados que contienen O y N como átomos donadores.* Quinta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 16 – 19 de Noviembre de 2006. San Luis Potosí, México.
- 23.** *Global and local electroaccepting power in the description of the electron affinities of some derivatives of the 1,4 benzoquinone.* 12th International Conference on the Applications of Density Functional Theory. 26th-30th August, 2007. Amsterdam, Holanda.
- 24.** *Estructura de capas a partir de la densidad de energía cinética de Kohn-Sham.* Sexta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 14 – 16 de Noviembre de 2007. Hidalgo, México.
- 25.** *Funciones de base tipo Slater modificadas para el estudio de átomos confinados por paredes de potencial finito.* Sexta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 14 – 16 de Noviembre de 2007. Hidalgo, México.
- 26.** *El efecto de un campo eléctrico uniforme sobre algunas propiedades periódicas.* VII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 13-15 de Noviembre del 2008. Jalapa, Veracruz. México. Julio Manuel Hernández Pérez, Jorge Garza y Rubicelia Vargas.
- 27.** *Papel de la conjugación y de los puentes de hidrógeno intramoleculares en la estabilidad de una familia de oxamidas.* VII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 13-15 de Noviembre del 2008. Jalapa, veracruz. México. Alejandra M. Navarrete-López, Jorge Garza y Rubicelia Vargas.
- 28.** *Estudio y diseño de compuestos de inclusión de β -ciclodextrinas como sensores fluorescentes.* VII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 13-15 de Noviembre del 2008. Jalapa, veracruz. México. Guillermo Nieto Malagón, Jorge Garza y Rubicelia Vargas.

- 29.** *Modelando el efecto de la presión sobre las propiedades electrónicas de Ca, Sr y Ba mediante el modelo de átomos confinados.* VII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 13-15 de Noviembre del 2008. Jalapa, veracruz. México. Rubicelia Vargas, Doris Guerra, Patricio Fuentealba y Jorge Garza.
- 30.** *Estudio teórico de un químisensor fluorescente selectivo para Pb⁺².* VIII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 12-14 de Noviembre del 2009. Colima, Colima. México. José Zeferino Ramírez, Rubicelia Vargas y Jorge Garza.
- 31.** *Análisis de población de Hirshfeld en puentes de hidrógeno intermoleculares.* VIII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 12-14 de Noviembre del 2009. Colima, Colima. México. Alejandra Montserrat Navarrete López, Jorge Garza y Rubicelia Vargas.
- 32.** *Effect of a uniform electric field on the dual fluorescence activity of some amino compounds.* 13th Intern. Conf. on the Applic. of Density Functional Theory in Chemistry and Physics, DFT09, Lyon, France. Julio M. Hernández-Pérez, Guillermo Nieto-Malagón, Rubicelia Vargas y Jorge Garza. Septiembre 2009.
- 33.** *Teoría de perturbaciones a segundo orden aplicada en átomos confinados.* VIII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 12-14 de Noviembre del 2009. Colima, Colima. México. Julio M. Hernández-Pérez, Rubicelia Vargas y Jorge Garza.
- 34.** *Estudio teórico del efecto del ambiente sobre la fluorescencia del di-metilaminobenzonitril ester.* VIII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 12-14 de Noviembre del 2009. Colima, Colima. México. Guillermo Nieto-Malagón, Julio M. Hernández-Pérez, Rubicelia Vargas y Jorge Garza.
- 35.** *Ánálisis de población de Hirshfeld iterativo en puentes de hidrógeno intermoleculares.* IX Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 11-13 de Noviembre del 2010. Pachuca Hidalgo. México. Alejandra Montserrat Navarrete López, Álvaro Vázquez-Mayagoitia, Jorge Garza y Rubicelia Vargas.
- 36.** *Estudio Teórico y Experimental de los espectros UV-Vis de los complejos SiPc(Miristato)₂ y SnPc(Miristato)₂.* IX Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 11-13 de Noviembre del 2010. Pachuca Hidalgo. México. José Zeferino Ramírez, Elizabeth Gutiérrez Mesa, Rubicelia Vargas, Jorge Garza y Jorge Peón.
- 37.** *Efectos de varios confinamientos sobre la estructura electrónica de sistemas atómicos y moleculares.* Plenaria Invitada. XXXVII Congreso de químicos teóricos de expression Latina (QUITEL 2011). Riviera Maya, 4-9 Diciembre de 2011. Jorge Garza, Rubicelia Vargas, Julio M. Hernández-Pérez, Avelino Cortés-Santiago y Guillermo Nieto-Malagón.
- 38.** *Estimación teórica de la energía de rompimiento del enlace P-S en el reactivo de Davy y dos de sus análogos.* X Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 10-12 de Noviembre de 2011. Pachuca Hidalgo. México. Avelino Cortés Santiago, Jorge Garza y Rubicelia Vargas.
- 39.** *Efecto del campo eléctrico sobre las propiedades ópticas del dimetil-amino-benzonitrilo.* X Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 10-12 de Noviembre de 2011. Pachuca Hidalgo. México. Guillermo Nieto Malagón, Julio M. Hernández Pérez, Rubicelia Vargas y Jorge Garza.
- 40.** *Estudio conformacional y de regioselectividad del insecticida imidacloprid.* X Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 10-12 de Noviembre de 2011. Pachuca Hidalgo. México. Erwin García Hernández, Jorge Garza, Rubicelia Vargas y Álvaro Vázquez Mayagoitia.

I. Estancias en Instituciones o Centros de Investigación

1. Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile, Diciembre de 1997.
2. Theory, Modeling and Simulation Group. Pacific Northwest National Laboratory. Richland, Washington. U. S. A. 1998-2000.
3. Theory, Modeling and Simulation Group. Pacific Northwest National Laboratory. Richland, Washington. U. S. A. Verano de 2001.
4. Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile, Enero de 2003.
5. Computer Science and Mathematics Division. Oak Ridge National Laboratory. Oak Ridge, Tennessee. U. S. A. Verano de 2004.
6. Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile, Diciembre de 2004.
7. Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile, Diciembre de 2005.
8. Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile, Agosto de 2008.

9. Departamento de Química, Universidad de Turín, Diciembre de 2008.
10. Departamento de Química, Universidad de Turín, Agosto de 2009-Julio de 2010.

J. Formación de Recursos Humanos

1. Un curso de química cuántica usando Mathematica.
Laura Munguía Cortes.
Servicio Social. Fecha de Terminación: 14/Sept/1995.
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa.
2. Análisis de la función de onda de Hartree-Fock usando Mathematica
Rodolfo Espíndola Heredia
Servicio Social. Fecha de Terminación: 31/Julio/1999
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa.
3. Relación de las energías de excitación triplete-singulete con los orbitales de Kohn-Sham en sistemas conjugados
Álvaro Vázquez Mayagoitia
Proyecto terminal de la licenciatura en química: Fecha de Terminación: 30/Marzo/2003
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa.
4. Evaluación de constantes de apantallamiento de RMN con métodos de la química cuántica en sistemas ligados por puentes de hidrógeno.
Alejandra Montserrat Navarrete López.
Proyecto terminal de la licenciatura en química. Fecha de Terminación: 23/Julio/2003.
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa.
5. Estudio de dianiones con la Teoría de Funcionales de la Densidad
Álvaro Vázquez Mayagoitia.
Doctorado en Ciencias.
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. Fecha de Terminación: 24/Abril/2008.
6. Análisis teórico de puentes de hidrógeno inter e intramoleculares
Alejandra Montserrat Navarrete López.
Doctorado en Ciencias.
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. Fecha de Terminación: 24/Julio/2009.
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa.
7. Estudio y diseño de compuestos de inclusión de la β -ciclodextrina como sensores fluorescentes.
Guillermo Nieto Malagón.
Universidad Autónoma del Estado de México. Fecha de Terminación: 31/Agosto/2012.
8. Estudio Teórico de la Reactividad Química del Reactivo de Lawesson frente a una Familia de Oxazonas
Avelino Cortés Santiago
Doctorado en Ciencias, 80%
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa.
9. Evaluación de Campos Escalares, de la Química Cuántica, sobre Unidades de Procesamiento Gráfico
Isaias Alcalde Segundo
Maestría en Ciencias de la Computación, 80%
Universidad Autónoma del Estado de México.

K. Proyectos y Subvenciones para la Investigación

1. Participación en el proyecto financiado por CONACYT, "Efectos de la Autointeracción en el Estudio de Polipéptidos y de Reacciones en Superficies", Vigencia 1999-2001.
2. Responsable del proyecto financiado por CONACYT, "Diseño e implementación de funcionales de intercambio y correlación que cancelan correctamente la energía de autointeracción", Vigencia 2001-2003.
3. Participación en el proyecto financiado por CONACYT para la instalación del Laboratorio Nacional “Delta Metropolitana de Cómputo de Alto Rendimiento”, Vigencia 2007-2010.
4. Responsable del proyecto financiado por CONACYT, “Correlación electrónica en átomos confinados”. Vigencia 2007-2010.
5. Responsable del proyecto financiado por CONACYT, “Uso de tarjetas gráficas para el análisis de la función de onda”. Vigencia 2012-2015.

L. Distinciones y Premios

1. Medalla al Mérito Universitario por los estudios de Licenciatura, Maestría y Doctorado. Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa.
2. Ganador de una beca para realizar estancia posdoctoral en el Pacific Northwest National Laboratory.
Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología.
México, D.F. 1998-2000.
3. Posdoctoral Fellow of Associated Western Universities en el Pacific Northwest National Laboratory.
Associated Western Universities
Richland, Washington. U. S. A. 1999-2000
4. EHSD Outstanding Performance Award.
Pacific Northwest National Laboratory.
Richland, Washington. U. S. A. Agosto-2000.