

## CURRICULUM VITAE

### DATOS GENERALES

Nombre: Rubicelia Vargas Fosada

Nacionalidad: Mexicana

Trabajo Actual: Profesora Titular "C"

Departamento de Química, División de C.B.I.

UAM – Iztapalapa.

Av. San Rafael Atlixco 186

CP 09340, Iztapalapa, D. F.

Teléfono: 58 04 64 15

Correo Electrónico: [ruvf@xanum.uam.mx](mailto:ruvf@xanum.uam.mx)

### ESCOLARIDAD

Licenciatura: U. A. M. – Iztapalapa

**Licenciatura en Química**

Iztapalapa, D. F.

12 de Julio de 1989

Posgrado: U. A. M. – Iztapalapa

**Maestría en Química**

Iztapalapa, D. F.

27 de Marzo de 1992

**Tesis: Análisis de los Cambios de Multiplicidad en Átomos**

U. A. M. – Iztapalapa

**Doctorado en Ciencias**

Iztapalapa, D. F.

17 de Noviembre de 1997

**Tesis: Aplicaciones de la Teoría de Funcionales de la Densidad Espín Polarizado a Problemas de Reactividad en Química.**

Estancia Posdoctoral: Pacific Northwest National Laboratory. Environmental Molecular Science Laboratory.

Theory, Modeling & Simulation Group

Host: Dr. David A. Dixon

Diciembre 1998-Septiembre 2000

Idioma: Inglés (dominio completo)

Italiano (Nivel B2)

## DOCENCIA

<b>Puesto</b>	<b>Período</b>	<b>Institución</b>
Prof. Ayudante A	Nov/88 a Junio/90	U.A.M. - I
Prof. Ayudante B	Junio/90 a Junio/91	
Prof. Asistente Tiempo Parcial	Junio/91 a Julio/93	
Prof. Asociado Tiempo Parcial	Sept./93 a Oct./94	
Prof. Asociado D tiempo Completo	Oct./94 a Julio/98	
Prof. Titular B Tiempo Completo	Julio/98 a Dic./98	
Prof. Titular C Tiempo Completo	Sept./00 –Marzo/01	
Prof. Titular C Tiempo Completo Indeterminado	Marzo/01	

Impartiendo las unidades Unidades de Enseñanza Aprendizaje de **Química I, Química II, Química III, Laboratorio de Química II, Estructura de la Materia, Estructura de la Materia Semipresencial, Transformaciones Químicas, Método Experimental I, Método Experimental II y Selectiva de Química** del Tronco General de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería y el curso de **Cursos Complementarios** en el trimestre complementario de la misma División. **Fisicoquímica I y Fisicoquímica II** de la División de Ciencias Biológicas y de la Salud. **Propedéutico de Matemáticas** de la Maestría en Química del programa de la Maestría en Ciencias de Ciencias Básicas e Ingeniería, **Fisicoquímica General, Estructura Atómica y Molecular y Teoría de Funcionales de la Densidad** del Posgrado en Química de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería.

<b>Puesto</b>	<b>Período</b>	<b>Institución</b>
Profesor Química (5o. Grado)	1991-1992	Preparatoria del Colegio Madrid
Profesor Química (5o. Grado)	1992-1993	Preparatoria del Colegio Madrid

### ***Libros de Texto y Material Didáctico***

- **Problemario de Química I**, Rubicelia Vargas, E. Adriana Urby, Carmen Nila, Eduardo González y Miguel A. Morales, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, México D. F., Segunda Edición, 1993. **ISBN: 970-620-059-2**

- **Problemas de Fisicoquímica I para las Ciencias Biológicas y de la Salud**, Rubicelia Vargas, Ana Martínez y Jorge Garza, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, México D. F., Primera Edición, 1995. **ISBN: 970-620-593-4**
- **Química en Acción 2 (Secundaria)**, Ana Martínez Vázquez y Rubicelia Vargas Fosada, Santillana, México D. F., 2001. **ISBN: 979-642-727-9**
- **Química 2 (Secundaria)**, Ana Martínez Vázquez y Rubicelia Vargas, Santillana, México D. F., 2003. **ISBN: 970-29-0654-7**
- **Química 3 (Secundaria)**, Mauricio Castro y Rubicelia Vargas, Santillana, México D. F., 2003. **ISBN: 970-29-0736-5**
- **Actividades Experimentales para el Curso de Química**. Felipe Aparicio, Rubicelia Vargas y Andrés Cedillo. Aprobado por el Comité Editorial de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería de la UAM Iztapalapa. 2011.
- **Método Experimental para Universitarios**. Dolores Ayala, Judith Cardoso, Andrés Estrada, Ángel Manzur y Rubicelia Vargas. Aprobado por el Comité Editorial de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería de la UAM Iztapalapa. 2013. En prensa.
- **Álgebra y representación gráfica**. Universidad Autónoma Metropolitana – Iztapalapa, 1a edición, México D. F. 2014. **ISBN Colección: 978-607-477-998-1. ISBN Volumen: 978-607-28-0293-3.**

### ***Artículos de Educación***

- **Una Fiesta Infantil**, Ana Martínez-Vázquez y Rubicelia Vargas-Fosada, *Educación Química*, 7, No.2, 83(1996).
- **Las cabras locas, la UAM, el café y las vacas muertas**, Ana Martínez-Vázquez y Rubicelia Vargas-Fosada, *Educación Química*, 8, No.2, 97(1997)
- **El café y las vacas muertas**, Rubicelia Vargas-Fosada y Ana Martínez-Vázquez, *Educación Química*, 9, No.1, 20(1998).
- **Si las vacas se mueren ¿Qué podemos hacer?**, Ana Martínez-Vázquez y Rubicelia Vargas-Fosada, *Educación Química*, 11, No.3, 355(2000).
- **Tutorías en la DCBI UAM Iztapalapa**. Rubicelia Vargas, Mario Pineda y Eugenio Torijano. Memorias del Segundo Encuentro Nacional de Tutoría Innovando el Vinculo Educativo. 12 al 14 de Octubre de 2006. Monterrey, Nuevo León, México.

- **La Tutoría Grupal como Estrategia para la Integración al Medio Universitario de Los Estudiantes de Nuevo Ingreso.** Judith Cardoso, Rubicelia Vargas, Gilberto Córdoba y Mario Pineda Ruelas. Memorias del Coloquio “Los estudiantes de nuevo ingreso en la universidad del siglo XXI”. Universidad Autónoma de la Ciudad de México. México, D. F. 17 al 19 de Abril de 2007.
- **Definición y Evaluación de Habilidades en Comunicación y Matemáticas en los Estudiantes de Nuevo Ingreso de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería de la UAM Iztapalapa.** Rubicelia Vargas, José Uriel Aréchiga, José Luis Córdoba, Consuelo Díaz, Nancy Martín, Alfonso Martínez-Martínez, Raquel Valdés, Humberto Vázquez, Patricia Villamil, Margarita Viniegra, Liliana Mendoza y Patricia Higuera. Memorias del 1er. Encuentro Internacional de Evaluación de la Educación Media Superior y Superior. Veracruz, México. Del 17 al 19 de Septiembre de 2008.
- **Traducción del lenguaje cotidiano al gráfico: una experiencia de fábula.** José Luis Córdoba-Frunz, Rubicelia Vargas-Fosada, Margarita Viniegra-Ramírez. Revista Eureka sobre Enseñanza y Divulgación de las Ciencias. 10, 211-221, 2013.

### ***Participación en la Elaboración de Planes y Programas de Estudio***

Participación en la elaboración de los Programas de Estudio de las Unidades de Enseñanza Aprendizaje de (Septiembre 1998):

#### *Tronco General de Asignaturas de la División de CBI (UAM-I)*

<i>Clave</i>	<i>Nombre de la U. E. A.</i>
214008	Transformaciones Químicas
214009	Estructura de la Materia
214010	Selectiva de Química

#### *Licenciatura en Química*

<i>Clave</i>	<i>Nombre de la U. E. A.</i>
214106	Química Cuántica I
214108	Química Cuántica II
214161	Estructura Electrónica
214162	Teoría de Funcionales de la Densidad
214161	Temas Selectos de Fisicoquímica Teórica

Participación en la adecuación de los Programas de Estudio de las Unidades de Enseñanza Aprendizaje del *Tronco General de CBI (UAMI)* (Septiembre 2012):

<i>Clave</i>	<i>Nombre de la U. E. A.</i>
214008	Transformaciones Químicas
214009	Estructura de la Materia
214011	Química Conceptual

Participación en la elaboración de los Programas de Estudio de las Unidades de Enseñanza Aprendizaje de la Formación Complementaria “Didáctica de la Química” de la *Licenciatura en Química CBI (UAMI)* (Septiembre 2012):

<i>Clave</i>	<i>Nombre de la U. E. A.</i>
2141127	Aproximación histórica para la enseñanza de la química
2141128	Estrategias didácticas para la enseñanza de la química
2141129	Elaboración de Unidades Temáticas para la Enseñanza de la Química
2141130	Tecnologías de la Información y la Comunicación para la Enseñanza de la Química

### ***Participación en Cursos Especiales, Congresos y Talleres***

\*Participación como ponente en el Curso de Actualización **Química Cuántica Computacional** para estudiantes de Licenciatura y Maestría, Departamento de Química, UAM Iztapalapa, Julio de 1998.

\*Participación como ponente en el Curso de Actualización **Química Cuántica Computacional** para estudiantes de Licenciatura en Química, Departamento de Química, UAM Iztapalapa, Septiembre del 2002.

\*Participación como ponente en el Curso de Actualización **Química Cuántica Computacional** para estudiantes de Licenciatura en Química, Departamento de Química, UAM Iztapalapa, Septiembre del 2003.

\*Participación como ponente en el Curso de Actualización **Química Cuántica Computacional** para estudiantes de Licenciatura en Química, Departamento de Química, UAM Iztapalapa, Septiembre del 2004.

\* Participación como ponente en el Curso de Actualización **Química Cuántica Computacional** para estudiantes y profesores de la Licenciatura en Química, Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías. Guadalajara, Jalisco. Julio 2007.

- \* Participación como ponente en el Curso de Actualización **Química Cuántica Computacional** para estudiantes de Licenciatura en Química, Departamento de Química, UAM Iztapalapa, Septiembre del 2007.
- \*Organización del **Taller para Profesores de Método Experimental P-01**, División de Ciencias Básicas e Ingeniería, UAM Iztapalapa, Mayo de 2001.
- \*Participación como ponente en el **Taller para Profesores de Método Experimental O-01**, División de Ciencias Básicas e Ingeniería, UAM Iztapalapa, Septiembre de 2001.
- \*Organización del **Taller de Comunicación en las Ciencias e Ingenierías**, División de Ciencias Básicas e Ingeniería, UAM Iztapalapa, Abril de 2005.
- \*Participación el curso-taller **Lineamientos Técnicos para la Elaboración de Reactivos de Conocimiento**. Mayo 2005.
- \* Participación como ponente en el Taller Intertrimestral de Comunicación en las Ciencias e Ingenierías. **La lectura, la escritura y la expresión oral**. 5 y 7 de Abril de 2006. UAM Iztapalapa.
- \*Participación como ponente en el IV Curso de Formación de Tutores. **¿Qué es la Tutoría?**. 11-14 de Septiembre de 2006. UAM Iztapalapa.
- \*Participación como ponente en el Taller Intertrimestral de Método Experimental. **Medidas Indirectas**. 11-14 de Septiembre de 2006. UAM Iztapalapa.
- \*Organización del **Taller de Comunicación en las Ciencias e Ingenierías**, División de Ciencias Básicas e Ingeniería, UAM Iztapalapa. 5 y 7 de Abril de 2006.
- \*Organización del **IV Curso de Formación de Tutores**, División de Ciencias Básicas e Ingeniería, UAM Iztapalapa. 12 al 14 de Octubre de 2006.
- \*Organización de la **Primera Jornada de Tutorías de la DCBI**. UAM Iztapalapa. 5 de Septiembre de 2007.
- \*Participación como ponente en el Curso de Actualización **Química Cuántica Computacional** para estudiantes de Licenciatura en Química, Departamento de Química, Universidad de Guadalajara, Noviembre del 2007.
- \*Participación como **instructora en el entrenamiento de los alumnos preseleccionados de XVIII Olimpiada Metropolitana de Química** del 7 al 11 de enero de 2008.

\*Participación como ponente en el Curso de Actualización **Química Cuántica Computacional** para estudiantes de Licenciatura en Química, Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Septiembre del 2008.

\*Participación como ponente en la Mesa de trabajo **Ingreso a la Educación Superior** dentro de la Primera Reunión Internacional de Evaluación Educativa. Veracruz, México. Septiembre 2008.

\* **Estructura de la Materia: Experiencia de un curso semipresencial** presentado en la mesa de trabajo **Diseño de entornos virtuales de aprendizaje**. Semana de la Educación Virtual. UAM Iztapalapa. 26 de Octubre de 2012.

\* **Lenguaje cotidiano y Lenguaje gráfico**, poster presentado en el 32 Congreso de educación química. Guanajuato. 04 de Septiembre de 2013.

\* **Desarrollo de la capacidad de comunicación verbal en un curso de química general**. Desarrollo de capacidades genéricas. Rectoría General UAM. 27 de junio de 2013

### *Conferencias Invitadas*

- **¿Cómo se Relaciona la Computación y la Química?** XII Semana de la Investigación Científica (Colegio de Bachilleres), México D. F., Mayo 2001.
- **Enlace de Hidrógeno**, Tercera semana de la Química, Depto. De Química, UAM – Iztapalapa, México D. F., Septiembre de 2002.
- **Estrategias de Intervención tutorial, Instrumentos de Apoyo: Rutas Curriculares, entrevistas y seguimiento académico**. Seminario “La tutoría en la UACM”. Universidad Autónoma de la Ciudad de México. 28 de noviembre de 2006.
- **Tutorías**. Octava Semana de Química. Depto. de Química. UAM Iztapalapa. 13 de Septiembre de 2007.
- **Insulina, mitos y realidades**. Ciclo de conferencias “La Metro en el Metro: Un paseo por el conocimiento” . Junio 2008.
- **La química ¿me enferma?**. Ciclo de conferencias “Sábados en la química”. UAM Iztapalapa. Agosto 2013.
- **Puentes de hidrógeno: Las interacciones débiles que sostienen la vida**. CECyT 7 Cuauhtémoc, IPN, Marzo, 2014.
- **Química: La ciencia ¿central o lateral?** Semana de la Química. Julio, 2014.
- **Química: Una Ciencia Central**. X Aniversario de Expo UAMI. Noviembre, 2014

### ***Participación en Comisiones Académicas***

\***Elaboración de una Guía para Profesores de Método Experimental**, Participante, Mayo 2001- Diciembre 2001.

\***Revisión de los programas de las uueeaa Estructura de la Materia y Transformaciones Químicas y Revisión Editorial del Problemario de Talleres de Transformaciones Químicas**, Participante, Diciembre 2001- Enero 2002.

\***Comisión del Departamento de Química que auxiliará a la Coordinadora de la Lic. En Química a realizar una evaluación preliminar de la situación actual de dicha licenciatura y, que en su caso elaborará los anteproyectos que se someterán a concurso en la DCBI para obtener recursos extraordinarios en el marco del PIFI-2; y que coadyuvará a la misma Coordinadora en la preparación del expediente para solicitar la evaluación de la misma licenciatura ante el CIEES de Ciencias Naturales y Exactas.** Participante, 21 de Junio al 5 de Julio de 2002

\* **Comisión Dictaminadora Divisional de Ciencias Básicas e Ingeniería.** Miembro Titular Electa, 2002-2004.

\* **Comisión de Posgrado en Química**, 2004-2006.

\*Participación en el Grupo de **Elaboración de Reactivos de Conocimiento** para el examen de admisión de la UAM. Junio 2005.

\* **Comisión de Tutorías de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería**, 2005 -2008.

\***Comisión Encargada de Proponer UEA's y otros Apoyos Académicos con Fines Propedéuticos para las Nueve Licenciaturas de la DCBI.** 2007 a Julio 2009.

\***Academia de Asignaturas de Química TG.** Octubre 2009-Abril 2012.

\***Comité de las UEA de Química del TG de la DCBI.** 13 de abril de 2012-

\***Comité de las UEA de Cursos Complementarios**, 13 de abril de 2012-

\***Comisión para elaborar una propuesta de Definición Institucional Indicativa de las Capacidades Genéricas de Comunicación Verbal, de Manejo de las Matemáticas como Lenguajes formales y de Aplicación de los Conocimientos en la Resolución de Problemas**, 30 de enero-30 de abril de 2013.

## **INVESTIGACIÓN**

### ***Congresos Nacionales***

\* **Síntesis, Caracterización y Estudio por Espectroscopía Electrónica de Ferromolibdatos de Cromo, Manganeso y Cobalto.** XXI Congreso Mexicano de Química Pura y Aplicada. Oaxaca, Oax. Septiembre de 1986.

\* **Parámetros de Reactividad Atómicos.** XXV Congreso Mexicano de Química Pura y Aplicada. Aguascalientes, Ags. Agosto de 1989.



**\*El Potencial de Espín como una Medida de la Tendencia a Formar Complejos de Alto o Bajo Espín** . IV Simposium de Estudiantes de Posgrado en Química "Fernando Romo". Zacatecas, Zac. Septiembre de 1990.

**\* La Primera Regla de Hund y las Redistribuciones de Carga entre Estados de Diferente Multiplicidad**. V Simposium de Estudiantes de Posgrado en Química "Fernando Romo". México, D. F. Octubre de 1991.

**\* Implementación de un Método Matricial para Resolver la Ecuación de Schroedinger Unidimensional**. XXXV Congreso Nacional de Física. Puebla, Pue. Octubre de 1992.

**\* Cálculo de Desdoblamientos de Energía Singulete-Triplete en Moléculas Orgánicas**. Semana del Doctorado en Ciencias de la División de CBI de la UAM - I, México D.F., Noviembre de 1994.

**\*El Potencial de Espín como Parámetro de Reactividad Química en Moléculas**. V Congreso Iberoamericano de Química Inorgánica y XII Congreso Mexicano de Química Inorgánica. Saltillo, Coahuila. Abril de 1995.

**\* El Papel de la Polarización de Espín en la Electronegatividad**. IX Simposio de Estudiantes de Posgrado en Química "Fernando Romo". Puebla, Pue., Noviembre de 1995.

**\* Efecto del Funcional de Intercambio y Correlación en la Distribuciones de Carga Inducidas por el Cambio en la Multiplicidad**. IX Simposio de Estudiantes de Posgrado en Química "Fernando Romo". Puebla, Pue., Noviembre de 1995.

**\* Estudio Comparativo de Sistemas Enlazados por Puentes de Hidrógeno Débiles**. Primera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. Cuernavaca, Morelos. 5 de Diciembre del 2002.

**\* Estudio teórico de ligantes bidentados para  $Pb^{2+}$** . Segunda Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. Del 20 al 22 de Noviembre del 2003, Guanajuato, Guanajuato.

**\* Estudio teórico de ciclodextrinas como complejos de inclusión**. Segunda Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. Del 20 al 22 de Noviembre del 2003, Guanajuato, Guanajuato. Hilda Santillán, Rubicelia Vargas y Jorge Garza.

**\*Efecto del solvente sobre oxianiones**. Tercera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. Del 18 al 20 de Noviembre del 2004. Puebla, Pue. A. Vázquez-Mayagoitia, J. Garza y Rubicelia Vargas.

**\*Teoría de funcionales de la densidad en el estudio de  $\alpha$ -ciclodextrina y algunos complejos de inclusión**. Tercera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. Del 18 al 20 de Noviembre del 2004. Puebla, Pue. H. Santillán, R. Vargas y J. Garza.

**\*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. Puebla, Pue. Del 18 al 20 de Noviembre del 2004. A. M. Navarrete López, J. Garza y Rubicelia Vargas.

**\*Asociación del triptofano neutro y zwitteriónico con agua: Un estudio con teoría de funcionales de la densidad.** Cuarta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. Del 17 al 19 de Noviembre del 2005. Chihuahua, Chi. Edmundo S. Carrera Martínez, Rubicelia Vargas y Jorge Garza.

**\*Estudio de la electronegatividad y dureza en átomos confinados.** Cuarta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. Chihuahua, Chi. Del 17 al 19 de Noviembre del 2005. Jorge Garza, Rubicelia Vargas y Norberto Aquino.

**\*Superficies de energía potencial Kohn-Sham, Hartree-Fock y MP2 corregidas por el BSSE.** Cuarta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. Chihuahua, Chi. Del 17 al 19 de Noviembre del 2005. Álvaro Vázquez Mayagoitia, Jorge Garza y Rubicelia Vargas.

**\*Estudio teórico y experimental de algunos derivados de la formil-fenil-formamida: Comparación entre B3LYP y MP2.** Cuarta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. Chihuahua, Chi. Del 17 al 19 de Noviembre del 2005. José Zeferino Ramírez, Rubicelia Vargas, Jorge Garza, Itzia Padilla y Efrén García.

**\*Caracterización de puentes de hidrógeno intramoleculares usando la constante de apantallamiento RMN.** Cuarta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. Chihuahua, Chi. Del 17 al 19 de Noviembre del 2005. Alejandra Montserrat Navarrete López, Rubicelia Vargas y Jorge Garza.

**\*Importancia de la conjugación y los puentes de hidrógeno intramoleculares en la estabilidad de oxamidas.** Quinta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. San Luis Potosí, SLP. Del 16 al 18 de Noviembre del 2006. Alejandra Montserrat Navarrete López, Itzia Padilla, Rubicelia Vargas y Jorge Garza.

**\*Estudio teórico del efecto de sustituyente en una familia de quinonas.** Quinta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. San Luis Potosí, SLP. . Del 16 al 18 de Noviembre del 2006. Álvaro Vázquez Mayagoitia, Jorge Garza y Rubicelia Vargas.

**\*Estudio teórico de la complejación de  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Hg}^{2+}$  y  $\text{Pb}^{2+}$  por ligantes multidentados que contienen O y N como átomos donadores.** Quinta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. San Luis Potosí, SLP. . Del 16 al 18 de Noviembre del 2006. José Zeferino Ramírez, Rubicelia Vargas, Jorge Garza.

**\* Potencia Electrodonadora y electroaceptora en complejos metálicos.** Sexta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 14 – 16 de Noviembre del 2007. San Miguel Regla, Hidalgo. José Zeferino Ramírez, Rubicelia Vargas y José Luis Gázquez.

**\* Funciones de base tipo Slater modificadas para el estudio de átomos confinados por redes de potencial infinito.** Sexta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 14 – 16 de Noviembre del 2007. San Miguel Regla, Hidalgo. Jorge Garza y Rubicelia Vargas.

**\*Estructura de capas a partir de la densidad de energía cinética de Kohn-Sham.** Sexta Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. 14 – 16 de Noviembre del 2007. San Miguel Regla, Hidalgo. Alejandra M. Navarrete-López, Rubicelia Vargas, Jorge Garza.

**\*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. Julio Manuel Hernández Pérez, Jorge Garza y Rubicelia Vargas.

**\*Papel de la conjugación y de los puentes de hidrógeno intramoleculares en la estabilidad de una familia de oxamidas.** VII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. 13-15 de Noviembre del 2008. Jalapa, Veracruz. Alejandra M. Navarrete-López, Jorge Garza y Rubicelia Vargas.

**\*Estudio y diseño de compuestos de inclusión de  $\beta$ -ciclodextrinas como sensores fluorescentes.** VII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. 13-15 de Noviembre del 2008. Jalapa, Veracruz. Guillermo Nieto Malagón, Jorge Garza y Rubicelia Vargas.

**\*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 Físicoquímica Teórica. 13-15 de Noviembre del 2008. Jalapa, Veracruz. Rubicelia Vargas, Doris Guerra, Patricio Fuentealba y Jorge Garza.

**\*Estudio teórico de un quimisor fluorescente selectivo para Pb<sup>+2</sup>.** VIII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. 12-14 de Noviembre del 2009. Colima, Colima. José Zeferino Ramírez, Rubicelia Vargas y Jorge Garza.

**\*Análisis de población de Hirshfeld en puentes de hidrógeno intermoleculares.** VIII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. 12-14 de Noviembre del 2009. Colima, Colima. Alejandra Montserrat Navarrete López, Jorge Garza y Rubicelia Vargas.

**\*Pterinas con Metales: ¿antioxidantes o formadores de puentes no convencionales?.** VIII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. 12-14 de Noviembre del 2009. Colima, Colima. Ana Martínez y Rubicelia Vargas.

**\* 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 Físicoquímica Teórica. 10-12 de Noviembre de 2011. Pachuca Hidalgo. Avelino Cortés Santiago, Jorge Garza y Rubicelia Vargas.

**\* Efecto del campo eléctrico sobre las propiedades ópticas del dimetil-amino-benzonitrilo.** X Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. 10-12 de Noviembre de 2011. Pachuca Hidalgo. Guillermo Nieto Malagón, Julio M. Hernández Pérez, Rubicelia Vargas y Jorge Garza.

**\* Estudio conformacional y de regioselectividad del insecticida imidacloprid.** X Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. 10-12 de Noviembre de 2011. Pachuca Hidalgo. Erwin García Hernández, Jorge Garza, Rubicelia Vargas y Álvaro Vázquez Mayagoitia.

**\* El papel de la  $\beta$ -ciclodextrina y algunos complejos de inclusión en la inhibición del pardeamiento enzimático en frutas.** XI Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. 8-10 de Noviembre de 2012. Toluca, Edo. de México. María Cristina Ortega Moo, Rubicelia Vargas, José-Zeferino Ramírez, Jorge Garza.

**\* Estudio teórico del efecto sustituyente en la capacidad electroreceptora de vanadio en estado de oxidación IV y V.** XI Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. 8-10 de

Noviembre de 2012. Toluca, Edo. de México. Luis Antonio Soriano Agueda, Rubicelia Vargas, Jorge Garza.

\* **Caracterización teórica de la interacción de una familia de insecticidas con el receptor nicotínico de acetilcolina.** XI Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. 8-10 de Noviembre de 2012. Toluca, Edo. de México. Erwin García-Hernández, Jorge Garza, Rubicelia Vargas y Álvaro Vázquez-Mayagoitia.

\***Estudio Computacional del 4-hexylresorcinol y la  $\beta$ -ciclodextrina como inhibidores del pardeamiento.** XII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. 8-10 de Noviembre de 2013. Querétaro. María Cristina Ortega, Roberto Flores, Zeferino Ramírez, Jorge Garza y Rubicelia Vargas.

\***Reactividad de Alcanolaminas.** XIII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. 5 de Noviembre de 2014. Michoacán. Guadalupe Bringaz, Roberto López, Jorge Lemus y Rubicelia Vargas.

\***Estimación de la energía de correlación en átomos multielectrónicos confinados en cavidades esféricas.** XIII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. 5 de Noviembre de 2014. Michoacán. Cecilia Díaz, Jorge Garza y Rubicelia Vargas.

\***El papel del intercambio exacto en la descripción de la absorción de moléculas fluorescentes.** XIII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. 5 de Noviembre de 2014. Michoacán. Alejandra Monjaraz, Jorge Garza y Rubicelia Vargas.

\***Evaluación teórica de la interacción de sistemas radicales derivados de catecol y guayacol sobre superficies de grafito.** XIII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. 5 de Noviembre de 2014. Michoacán. Luis Ignacio Perea-Ramírez Marcelo Galván, Rubicelia Vargas, Zaira Domínguez, Magali Salas-Reyes, Myrna H. Matus.

### ***Congresos Internacionales***

\***Response Coefficients for atoms and Molecules, 10<sup>th</sup>.** *Canadian Symposium on Theoretical Chemistry*, Alberta, Canada. Julio de 1989.

\***Energy Splittings and Tunneling Probabilities in the Inversion of AX<sub>3</sub> Molecules,** *Sanibel Symposium*, St. Augustine, Florida, Marzo de 1993.

\***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.

\***On the Stability of Half Filled Shells, 8<sup>th</sup>.** *International Congress of Quantum Chemistry*, Praga, Junio de 1994.

\***Confined Atoms in Kohn-Sham Theory: Nuclear Cusps and Shell Collapse,** *Sanibel Symposium*, St. Augustine, Florida, Febrero de 1996.

**\*Spin Polarization and Relativistic Effects in the Electronegativity and Hardness of Atoms**, *Sanibel Symposium*, St. Augustine, Florida, Febrero de 1996.

**\*The “innert-pair” effect in Group 14 (IV-A) halides. A Density Functional Study**, *Sanibel Symposium*, St. Augustine, Florida, Febrero de 1996.

**\*Metal ion complementarity in a series of tris-cathecolamides**. Spring 2000 ACS National Meeting. San Francisco, California , Marzo de 2000.

**\*DFT performance in weak hydrogen bond complexes**. 10<sup>th</sup> International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics. Bruselas, Bélgica. Septiembre 2003.

**\* The basis set superposition error effects on the Hartree-Fock and Kohn-Sham orbitals for systems linked by hydrogen bonds**. The Nature of Hydrogen Bonding and Density Functional Theory. Lyon, Francia. Jorge Garza, Zeferino Ramírez y Rubicelia Vargas. Junio 2004.

**\*Estudio Teórico de la Transferencia de Carga en Complejos entre Ca<sup>2+</sup>, Hg<sup>2+</sup> y Pb<sup>2+</sup> con ligantes multidentados**. XXXIII. Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Universidad de La Habana. La Habana, Cuba. José Zeferino Ramírez, Rubicelia Vargas, Jorge Garza y José Luis Gázquez. Septiembre de 2007.

**\*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. Amsterdam, Holanda. Álvaro Vázquez Mayagoitia, Jorge Garza, José Luis Gázquez y Rubicelia Vargas. Agosto de 2007.

**\*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.

**\*Computational study of inclusion complexes of phenolic compounds with  $\beta$ -Cyclodextrin**. Advances in Quantum Chemical Topology. Ma. Cristina Ortega Moo, Rubicelia Vargas y Zeferino Ramírez. Octubre 2013.

### ***Publicaciones Internacionales***

1. Marcelo Galván y Rubicelia Vargas, **Spin Potential in Kohn-Sham Theory**. *Journal of Physical Chemistry* **96**, 1625-1630 (1992)

2. Rubicelia Vargas, Jorge Garza y Alberto Vela, **Strongly Convergent Method to Solve One-Dimensional Quantum Problems**, *Physical Review E* **53**, 1954-1963(1996)

3. Rubicelia Vargas, Jorge Garza y Alberto Vela, **Reply to “Comment on Strongly Convergent Method to Solve One-Dimensional Quantum Problems”**, *Physical Review E* **56**, 1283-1284(1997)

4. Rubicelia Vargas y Marcelo Galván, **On the Stability of Half-Filled Shells**. *Journal of Physical Chemistry* **100**, 14651-14654(1996)
5. Rubicelia Vargas, Marcelo Galván y Alberto Vela, **Singlet-Triplet Gaps and Spin Potentials**. *Journal of Physical Chemistry* **102**, 3134-3140(1998)
6. Jorge Garza, Rubicelia Vargas, y Alberto Vela, **Numerical self-consistent Field Method to Solve the Kohn-Sham Equations in Confined Many-Electron Atom**, *Physical Review E* **58**, 3949-3954(1998)
7. Sigfrido Escalante, Rubicelia Vargas y Alberto Vela , **Structure and Energetics of Group 14 (IV-A) Halides: A Comparative Density Functional-Pseudopotential Study**. *Journal of Physical Chemistry* **103**, 5590-5601(1999)
8. Jorge Garza, Rubicelia Vargas, Alberto Vela y K. D. Sen, **Shell Structure and Confined Atoms Using the Density Functional Theory**, *Journal of Molecular Structure (THEOCHEM)* **501**, 183-188(2000).
9. Rubicelia Vargas, Jorge Garza, David Dixon y Benjamin P. Hay, **Conformational Analysis of N, N,N',N'-tetramethylsuccinamide: The role of C-H...O Hydrogen bond**", *Journal of Physical Chemistry* **104**, 5115-5121(2000).
10. Rubicelia Vargas, Jorge Garza, David Dixon y Benjamin P. Hay, **How Strong is the C(alpha)-H...O=C Hydrogen Bond**, *Journal of the American Chemical Society* **122**, 4750-4755(2000). Highlighted in Chemical and Engineering News on May 8, 2000
11. K. D. Sen, Jorge Garza, Rubicelia Vargas y Alberto Vela, **Atomic Ionization Radii using Janak's Theorem**, *Chemical Physics Letters* **325**, 29-32(2000)
12. 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** *Journal of Chemical Physics* **114**, 639-651(2001)
13. Rubicelia Vargas, Jorge Garza, David A. Dixon and Benjamin P. Hay. **C(sp<sup>2</sup>)-C(Aryl) bond rotation barrier in N-methylbenzamide**. *Journal of Physical Chemistry A* **105**, 774-778(2001).
14. 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**. *Journal of Physical Chemistry A* **105**, 4963-4968(2001).
15. Rubicelia Vargas, Jorge Garza, David A. Dixon and Benjamin P. Hay. **Conformational analysis of N-benzylformamide**. *Journal of Molecular Structure (THEOCHEM)* **541**, 243-251 (2001)
16. Benjamin P. Hay, David A. Dixon, Rubicelia Vargas, Jorge Garza, Kenneth N. Raymond. **Structural Criteria for the Rational Design of Selective Ligands** **3**.

**Quantitative Structure-Stability Relationship for Iron III Complexation by tris-Cathecolamide Siderophores.** *Inorganic Chemistry* **40**, 3922-3935(2001)

17. 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**, 3213-3218(2002).

18. R. Vargas, A. Cedillo, J. Garza and M. Galván. **Reactivity criteria in spin-polarized density functional theory,** En *Reviews of Modern Quantum Chemistry*, K.D. Sen (Ed.) ISBN 981-02-4889-X, World Scientific, Singapur, 2002, pp 936-965.

19. F. Aparicio, J. Garza, A. Cedillo, M. Galvan and R. Vargas. **The local multiplicative potential of the self interaction corrected approximation,** En *Reviews of Modern Quantum Chemistry*, K.D. Sen (Ed.), ISBN 981-02-4889-X, World Scientific, Singapur, 2002, pp 755-786

20. A. Banerjee, K. D. Sen, J. Garza, R. Vargas. **Mean Excitation energy, static polarizability, and hyperpolarizability of the spherically confined hydrogen atom,** *Journal of Chemical Physics*, **116**, 4054-4057(2002).

21. K. D. Sen, Jorge Garza, Rubicelia Vargas and Norberto Aquino. **Static dipole polarizability of shell-confined hydrogen atom.** *Phys. Lett. A.* **295**, 299 (2002).

22. J. Garza, C. A. Fahlstrom, R. Vargas, J. A. Nichols and D. A. Dixon. **Orbitals from Molecular Orbital and Density Functional Theory for ionic Systems,** En *Reviews of Modern Quantum Chemistry*, K.D. Sen (Ed.), ISBN 981-02-4889-X, World Scientific, Singapore, 2002, pp 1508-1536.

23. K. D. Sen, B. Mayer, P. C. Schmidt, Jorge Garza, Rubicelia Vargas and Alberto Vela. **Static dipole and quadrupole polarizability of confined hydrogen atom with  $Z=N/3$  ( $N=1-5$ ).** *International Journal of Quantum Chemistry*, **90**, 490-496 (2002).

24. M. Gómez, I. González, F. J. González, R. Vargas, J. Garza, **The association of neutral systems linked by hydrogen bond interactions.** *Electrochemistry Communications*, **5**, 12-15(2003).

25. J. Garza, R. Vargas, M. Gómez, I. González, F. J. González, **Theoretical and electrochemical study of the quinone-benzoic acid adduct linked by hydrogen bonds** *The Journal of Physical Chemistry A.* **107**, 11161-11168(2003).

26. 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).

27. K. D. Sen, Jorge Garza, Rubicelia Vargas and Alberto Vela. **Effective pressure induced electronic transition in spherically confined alkali metal atoms.** *Proc. Indian Nat. Sci. Acad.* **70A**, 675-681 (2004).

28. 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).
29. 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. Acc. **115**, 257-265 (2006)
30. 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).
31. Jorge Garza, Rubicelia Vargas, Norberto Aquino and K. D. Sen. *DFT reactivity parameters in confined many-electron atoms*. J. Chem. Sciences. **117**, 379-386 (2005).
32. Rubicelia Vargas, Jorge Garza and Andrés Cedillo. *Koopmans-like Approximation in the Kohn-Sham Method and the Impact of the Frozen Core Approximation of the Reactivity Parameters of the Density Functional Theory*. J. Phys. Chem. A **109**, 8880-8892 (2005).
33. 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).
34. José Zeferino Ramírez, Rubicelia Vargas, Jorge Garza y 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).
35. Carlos Frontana, Alvaro Vazquez-Mayagoitia, Jorge Garza, Rubicelia Vargas, Ignacio Gonzalez. *Substituent Effect on a Family of Quinones in Aprotic Solvents: An Experimental and Theoretical Approach*. J. Phys. Chem. A. **110**, 9411-9419 (2006).
36. Patricia Balderas-Hernández, Rubicelia Vargas, Alberto Rojas-Hernández, Ma. Teresa Ramírez-Silva, Marcelo Galván. *Dimerization of thymol blue in solution: Theoretical evidence*. The International Journal of Pure and Applied Analytical Chemistry **71**, 1061-1067 (2007).
37. 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).
38. 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).
39. 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).



40. Jorge Garza, Rubicelia Vargas and K. D. Sen. **Electronic Structure in Confined Atoms.** In *Chemical Reactivity Theory: A Density Functional View*. Edited by Pratim K. Chattaraj. CRC Press. 521-538 (2009).
41. Rubicelia Vargas and Marcelo Galván. **Spin Polarized Density Functional Theory: Chemical Reactivity.** In *Chemical Reactivity Theory: A Density Functional View*. Edited by Pratim K. Chattaraj. CRC Press. 137-154 (2009).
42. 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, 241-255(2009).
43. 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).
44. Ana Martínez, Rubicelia Vargas and Annia Galano. **Carotenoids can act as antioxidants by oxidizing the superoxide radical anion.** *Physical Chemistry Chemical Physics*. 12, 193-200 (2009).
45. Annia Galano, Rubicelia Vargas and Ana Martínez. **What is Important to Prevent Oxidative Stress? A Theoretical Study on Electron-Transfer Reactions between Carotenoids and Free Radicals.** *Journal of Physical Chemistry B*. 113, 12113-12120 (2009).
46. 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).
47. Ana Martínez y Rubicelia Vargas. **Electron donor–acceptor properties of metal atoms interacting with pterins.** *New J. Chem.* 34, 2988–2995(2010).
48. 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).
49. Ana Martínez, Rubicelia Vargas y Annia Galano, . **Theoretical study on the chemical fate of adducts formed through free radical addition reactions to carotenoids.** *Theoretical Chemistry Accounts*, 127, 595-603(2010).
50. Rubicelia Vargas, Ana Martínez. **Non-conventional hydrogen bonds: pterins-metal anions.** *Phys. Chem. Chem. Phys.* 13, 12775–12784(2011).
51. Ana Martínez, Annia Galano, Rubicelia Vargas. **Free Radical Scavenger Properties of Mangostin: Thermodynamics and Kinetics of HAT and RAF Mechanisms.** *J. Phys. Chem. B* . 115 12591–12598(2011).
52. José-Zeferino Ramírez, Rubicelia Vargas and Jorge Garza. **The role of conformational changes in the signal enhancement of a selective chemosensor of Pb<sup>2+</sup>.** *Physical Chemistry Chemical Physics*. 14, 495-501 (2012).
53. 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).

54. 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).
55. 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-aminobenzonitrile.** *Int. J. Quantum Chem.* 112, 3552-3557 (2012).
56. 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, 485-504 (2012).
57. Erwin García-Hernández, Cecilia Díaz-García, Rubicelia Vargas y Jorge Garza. **Four-index integral transformation in many body perturbation theory on GPUs on confined atoms to second order and electron propagator.** *AIP Conference Proceedings* 1558, 1528 (2013).
58. Jorge Garza, Javier Carmona-Espíndola, Isaías Alcalde-Segundo, and Rubicelia Vargas **Many-Body Perturbation Theory to Second Order Applied on Confined Helium-Like Atoms.** In *Computational and experimental chemistry: Developments and applications.* Edited by Tanmoy Chakraborty, Michel J. Bucknum and Eduardo Castro. CRC Press 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. Erwin García-Hernández, Cecilia Díaz-García, Rubicelia Vargas, 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).
61. Jorge Garza, 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.
62. Raymundo Hernández-Esparza, Sol-Milena Mejía-Chica, Andy D. Zapata-Escobar, Alfredo Guevara-García, Apolinar Martínez-Melchor, Julio-M. Hernández-Pérez, Rubicelia Vargas, 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).

### ***Publicaciones en Revistas Nacionales con Arbitraje***

1. 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).
2. 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).

3. José Zeferino Ramírez, Rubicelia Vargas, Itzia I. Padilla-Martínez, Anaid G. Flores-Huerta and Jorge Garza. **The role of the CH/Pi weak interaction in the geometrical conformation: An aromatic acetamide derivative system as an example.** J. Mex. Chem. Soc. 56, 275-278(2012).

### ***Tesis Dirigidas***

***\*Teoría de Funcionales de la densidad en el estudio de la  $\alpha$ -ciclodextrina y algunos complejos de inclusión.*** Tesis de Maestría de la alumna Hilda Santillán Vargas. Maestría en Ciencias. UAM-Iztapalapa. 15 de Marzo de 2005.

***\*El papel de la  $\beta$ -ciclodextrina y algunos complejos de inclusión en la inhibición del pardeamiento enzimático en frutas.*** Tesis de Maestría de la alumna María Cristina Ortega Moo. Maestría en Ciencias. UAM-Iztapalapa. Julio 2013.

***\* Estudio Teórico de Selectividad de Ligantes Multidentados para  $Pb^{2+}$ .*** Tesis de Doctorado del alumno José Zeferino Ramírez Ramírez. Doctorado en Ciencias. UAM Iztapalapa. 27 de Abril de 2007.

***\*Interacción de Complejos de Vanadio con bases nitrogenadas.*** Proyecto Terminal del alumno Luis Soriano Aguada. Licenciatura en Química. UAM Iztapalapa. Septiembre 2012.

***\* Estudio de adsorción de una molécula funcionalizada con grupos tioles sobre la superficie de oro.*** Proyecto Terminal de la alumna Joana Avelar Robledo. Licenciatura en Química. UAM Iztapalapa. Diciembre 2013.

### ***Servicios Sociales Dirigidos***

• **Elaboración de material didáctico para cursos de química usando software de química computacional.** Joana Avelar Robledo. Lic. en Química. UAM Iztapalapa. Del 25 de marzo al 25 de septiembre de 2013.

• **Elaboración de material didáctico para cursos de química usando software de química computacional.** María de Lourdes Rodríguez Salvador. Lic. en Química. UAM Iztapalapa. del 28 de agosto de 2012 al 28 de febrero de 2013.

• **Elaboración de material didáctico para cursos de química usando software de química computacional.** Miriam Soriano Santiago. Lic. en Química. UAM Iztapalapa. Del 10 de septiembre de 2012 al 10 de marzo de 2013.

• **Diseño y realización de reactivos para el examen único de cursos complementarios.** Alumna: Velia Gisela Zarco Espino. Lic. en Matemáticas. UAM Iztapalapa. Del 14 de octubre de 2011 al 24 de julio de 2012.

- **Diseño y realización de reactivos para el examen único de cursos complementarios.** Alumno: Luis Antonio Soriano Agueda. Lic. en Química. UAM Iztapalapa. Del 9 de enero al 10 de julio 2012.
- **Diseño y realización de objetos de aprendizaje para una aula virtual de estructura de la materia.** Alumna: Anaïd Gabriela Flores Huerta. Lic. En Química. UAM Iztapalapa. Del 4 de enero al 4 de julio de 2010.

### *Conferencias Invitadas*

- \**Structural Criteria for the Rational Design of Selective Ligands.* Simposio Materia 2001 México D. F. Octubre 2001.
- \**Estudios Teóricos de Sistemas Enlazados por Puentes de Hidrógeno,* Jóvenes en la Investigación, CINVESTAV, México, D.F. 12 de Noviembre de 2004.
- \* **¿Sirven los métodos Teóricos para estudiar sistemas enlazados por puentes de hidrógeno?** Rubicelia Vargas. Taller de Química Computacional. Universidad Veracruzana. Jalapa, Veracruz. 26 de Febrero de 2007.
- \* **Theoretical chemistry methods in the study of host-metal ion interactions.** Rubicelia Vargas. Third Mexican Meeting on Mathematical and Experimental Physics. El Colegio Nacional, México. 10 de Septiembre de 2007.
- \* **Teoría de Funcionales de la Densidad en la Descripción de Puentes de Hidrógeno.** Rubicelia Vargas. Taller de Química Computacional. Benemérita Universidad de Puebla, Puebla. 4 de Septiembre de 2008.
- \***Puentes de hidrógeno débiles: Un reto para la Química Cuántica.** Coloquio Química Teórica para el siglo XXI. ¿Dónde está? ¿Dónde estará?. UNAM. 21 de Septiembre de 2011.

### *Estancias de Investigación*

- **Pacific Northwest National Laboratory** en Richland Washington, EUA. Invitada por el investigador David Dixon. Julio 2001.
- **Universidad “Andrés Bello”** en Santiago de Chile, Chile. Invitada por el profesor Eduardo Chamorro Diciembre de 2004.
- **Oak Ridge National Laboratory** en Oak Ridge, Tennessee, EUA. Invitada por el investigador Jeffrey Nichols. Julio 2004.
- **Universidad de Chile** en Santiago de Chile, Chile. Invitada por el profesor Patricio Fuentealba. Agosto 2008.
- **Instituto de Investigaciones en Materiales.** UNAM. México. En estancia sabática con la profesora Ana Martínez. Octubre 2008-Julio 2009.

- **Università degli Studi di Torino.** Turín. Italia. En estancia Sabática con el profesor Roberto Dovesi. 2010.
- **Universidad Técnica Santa María.** Valparaíso Chile. Invitada por el profesor Arie Aizman en Noviembre de 2013.
- **Universidad Técnica Santa María.** Valparaíso Chile. Invitada por el profesor Arie Aizman en Octubre de 2014.

## **DISTINCIONES**

**\* Ganador del Primer Concurso para la elaboración de Libros de Texto y Material de Apoyo a la Docencia.**

Institución que otorga: **U. A. M. Iztapalapa**  
México. D. F., Noviembre 1991

**\*Medalla al Mérito Universitario por las calificaciones obtenidas en la Maestría**

Institución que otorga: **U. A. M. Iztapalapa**  
México. D. F., Noviembre 1992

**\* Ganador del Tercer Concurso para la elaboración de Libros de Texto y Material de Apoyo a la Docencia.**

Institución que otorga: **U. A. M. Iztapalapa**  
México. D. F., Mayo 1994.

**\*Medalla al Mérito Universitario por las calificaciones obtenidas en el Doctorado**

Institución que otorga: **U. A. M. Iztapalapa**  
México. D. F., Noviembre 1998

**\*Nombramiento de Candidato a Investigador Nacional en el periodo de Julio de 1993 a Junio de 1997**

Institución que otorga: **Sistema Nacional de Investigadores**  
México. D. F., Julio 1993

**\*Nombramiento de Investigador Nacional nivel I en el periodo de Noviembre 1997 a Junio de 2000**

Institución que otorga: **Sistema Nacional de Investigadores**  
México. D. F., Noviembre 1997

**\* EHSD Outstanding Performance Award.**

Institución que otorga: Pacific Northwest National Laboratory, Richland, Washington, Estados Unidos de Norteamérica, Agosto 2000

**\*Nombramiento de Investigador Nacional nivel I en el periodo de Junio 2001 a Junio de 2004**

Institución que otorga: **Sistema Nacional de Investigadores**  
México. D. F., Junio 2001

**\*Nombramiento de Investigador Nacional nivel I en el periodo de Junio 2004 a Diciembre de 2008**

Institución que otorga: **Sistema Nacional de Investigadores.**  
México, D. F., Junio 2004

**\*Nombramiento de Investigador Nacional nivel II en el periodo de Enero 2009 a Diciembre de 2012.** Institución que otorga: **Sistema Nacional de Investigadores.**

México, D. F., Septiembre 2008

**\*Nombramiento de Investigador Nacional nivel II en el periodo de Enero 2013 a Diciembre de 2017.** Institución que otorga: **Sistema Nacional de Investigadores.**

México, D. F., Septiembre 2012

**\* Profesor Perfil PROMEP**

Institución que otorga: **SEP**  
México, D. F. Enero 2004

**\*Premio a la Docencia 2005**

Institución que otorga: UAM Iztapalapa  
México, D. F. Noviembre de 2005

**\*Profesor Perfil PROMEP**

Institución que otorga: **SEP**  
México, D. F. Septiembre 2006

**\*Profesor Perfil PROMEP**

Institución que otorga: **SEP**  
México, D. F. Septiembre 2009

**\*Profesor Perfil PROMEP**

Institución que otorga: **SEP**  
México, D. F. Septiembre 2012

Diciembre 2014