

Alejandra Montserrat Navarrete López

Dra. en Ciencias (Química)

DATOS PERSONALES

Fecha de nacimiento 22 de Abril de 1979
Domicilio particular Av. México-Coyoacán #371 Torre H-1204, Col. Xoco,
C.P. 03330. Benito Juárez, Ciudad de México.
Teléfono 5591393892
Correo electrónico amnl@azc.uam.mx

POSICIÓN ACADÉMICA

Profesora Asociada D, tiempo completo.
Departamento de Ciencias Básicas
Área de Química y fisicoquímica ambiental.
Septiembre de 2017
Jefa del Área de investigación desde febrero de 2020 a la fecha.

FORMACIÓN ACADÉMICA.

Estancia de investigación noviembre de 2014 - julio 2017
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

- Proyectos: Estudio de materiales fototérmicos, efecto de la dispersión en cristales moleculares, empleo de métodos estocásticos para la exploración de la superficie de energía potencial.

Posdoctorado enero - octubre de 2014
Università degli Studi di Torino

- Proyecto: Estudio mecano-cuántico de nanoestructuras de diferente naturaleza.

Posdoctorado enero de 2011 - diciembre de 2013
Universidad Autónoma del Estado de Morelos

- Proyecto: Estudio de nanoestructuras de celulosa y sistemas nanoestructurados porosos por medio de cálculos ab initio periódicos.

Doctorado en Ciencias, Química septiembre de 2004 - agosto de 2009
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

- Obtención del grado: 7 de agosto de 2009.
- Título de tesis: Estudio teórico de puentes de hidrógeno inter e intra moleculares.

Estancia de Investigación enero - agosto de 2008
University of Alabama, Estados Unidos de América

- Proyecto: Thermochemical data prediction by quantum chemistry methods of intermediate chemical species involved in the TiO₂ production from the TiCl₄.

Licenciatura en Química

mayo de 2000 - julio de 2004

Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

- Tesina: Evaluación de constantes de apantallamiento de RMN con métodos de la química cuántica en sistemas ligados por puentes de hidrógeno.
- Proyecto terminal: Determinación potenciométrica de iones cloruro en medio ácido.

RECONOCIMIENTOS Y BECAS

- Sistema Nacional de Investigadores (SNI), Nivel I. Enero de 2016 a la fecha
- Sistema Nacional de Investigadores (SNI), Candidata. Enero de 2010 a diciembre de 2015
- Borsa di studio de la Università degli Studi di Torino. Enero - octubre de 2014
- Beca para Estancias Posdoctorales Vinculadas al Fortalecimiento de la Calidad del Posgrado Nacional, CONACyT. Agosto de 2011 - diciembre de 2013
- Beca mixta para estancias de investigación (University of Alabama), CONACyT. Enero - agosto de 2008
- Beca para estudios de Doctorado, CONACyT. Septiembre de 2004 - agosto de 2009
- Medalla al Mérito Universitario por obtener el mejor promedio de la generación. Universidad Autónoma Metropolitana. Diciembre de 2004

PUBLICACIONES EN REVISTAS INTERNACIONALES DE ALTO IMPACTO

- Sandra Loera-Serna, Jorge Flores, Alejandra M. Navarrete-López, Jorge Noé Díaz de León, and Hiram I. Beltran
Composites of Anthraquinone Dyes@HKUST-1 with Tunable Microstructuring: Experimental and Theoretical Interaction Studies
Chemistry. A European Journal. DOI : 10.1002/chem.201805548 (2019).
- Araceli Espinoza-Vázquez, Francisco Javier Rodríguez- Gómez, Ivonne Karina Martínez-Cruz, Deyanira Ángeles-Beltrán, Guillermo E. Negrón-Silva, Manuel Palomar-Pardavé, Leticia Lomas Romero, Diego Pérez-Martínez and Alejandra M. Navarrete-López.
Adsorption and corrosion inhibition behaviour of new theophylline-triazole-based derivatives for steel in acidic medium
Royal Society Open Science. <http://dx.doi.org/10.1098/rsos.181738> (2019).
- Alejandra M. Navarrete-López, Marcos Rivera-Almazo, Jorge Garza, Rubicelia Vargas.
Importance of one-parameter hybrid exchange-correlation functionals in band gaps of transition metal and metalloid oxides
Theoretical Chemistry Accounts. <https://doi.org/10.1007/s00214-018-2222-3> (2018)
- Avelino Cortes-Santiago, Alejandra M. Navarrete-López, Rubicelia Vargas and Jorge Garza.
Dissociation energy for the P₂S₂ ring in a family of thionation reagents and the

- corresponding chemical reactivity of separated species: A density-functional-theory analysis.*
Journal of Physical Organic Chemistry. DOI: 10.1002/poc.3624 (2016).
- Claudio M. Zicovich-Wilson, Minhhuu Hô, Alejandra M. Navarrete-López and Silvia Cassasa.
Basis set dependence of Hirshfeld-Iterative charges in LCAO periodic calculations.
Theoretical Chemistry Accounts. DOI:10.1007/s00214-016-1942-5 (2016).
 - Alejandra M. Navarrete-López, María Luisa San-Román and Claudio M. Zicovich-Wilson.
The influence of the DFT approach on the structure and relative stability of models for Cellulose I allomorphs
Theoretical Chemistry Accounts. DOI 10.1007/s00214-016-1889-6, (2016).
 - Mariano Rodriguez-Bautista, Cecilia Díaz-García, Alejandra M. Navarrete-López, Rubicelia Vargas and Jorge Garza.
Rootaan's approach to solve the Hartree-Fock equations for atoms confined by soft walls: Basis set with correct asymptotic behavior.
The Journal of Chemical Physics **143**, 034103-10, (2015).
 - Alessandro Erba, Alejandra M. Navarrete-López, Valentina Lacivita, Phillipe D'Arco and Claudio M. Zicovich-Wilson.
Katoite under pressure: An ab initio investigation of its structural, elastic and vibrational properties sheds light on the phase transition.
Physical Chemistry Chemical Physics **217**, 2660-2669, (2015).
 - Minhhuu Hô, Alejandra M. Navarrete-López, Alejandro Ramírez Solís, Claudio M. Zicovich-Wilson.
Electronic charge density analysis Li doped polyacetylene: Molecular vs. Periodic descriptions and nature of Li-to-chain bonding.
The Journal of Physical Chemistry B **117**, 725-730, (2013).
 - Tsang-Hsiu Wang, Alejandra M. Navarrete-López, Shenggang Li, and David A. Dixon.
Hydrolysis of TiCl₄: The Initial Steps in the Production of TiO₂
The Journal of Physical Chemistry A **114**, 7561-7570, (2010).
 - Alejandra M. Navarrete-López, Jorge Garza and Rubicelia Vargas.
The Kohn Sham kinetic energy density as indicator of the electron localization: Atomic shell structure.
The Journal of Chemical Physics **128**, 104110-8, (2008).
 - Alejandra M. Navarrete-López, Jorge Garza and Rubicelia Vargas.
Relationship between the critical points found by the ELF and AIM approaches in adducts with hydrogen bonds.
The Journal of Physical Chemistry A **111**, 11147-11152, (2007).

PUBLICACIONES EDUCATIVAS Y DE DIVULGACIÓN

- Alejandra M. Navarrete-López, Rubicelia Vargas y Jorge Garza.
Explorando la estructura electrónica de sistemas cristalinos
ContactoS, Revista de educación en Ciencias e Ingenierías. No. 101, Julio-Septiembre 2016.

- Alejandra M. Navarrete-López, Gilberto Córdoba Herrera, Joel Ireta Moreno, Patricia Villamil Aguilar, Margarita Viniegra Ramírez.
Elaboración de un vídeo educativo.
Memorias 11. Congreso Internacional y 14^o Nacional de material didáctico innovador. Nuevas tecnologías educativas. ISBN: 978-607-7691-71-6, pág. 357, (2010).
- Nancy Martín, Margarita Viniegra, Joel Ireta, Alejandra Navarrete-López.
Elaboración de un objeto de aprendizaje sobre Orbitales Atómicos.
Memorias 11. Congreso Internacional y 14^o Nacional de material didáctico innovador. Nuevas tecnologías educativas, ISBN: 978-607-7691-71-6, pág. 373, (2010).
- Alejandra M. Navarrete-López, Gabriela Valdés-Ramírez, Giaan Álvarez, Teresa Ramírez.
Estudio del Efecto de Diferentes Parámetros Sobre la Determinación Potenciométrica de Haluros.
Fundamentos y Aplicaciones de la Química Analítica, ISBN:970-31-0049-X, pág. 85, (2002).

EXPERIENCIA DOCENTE

Profesora - Investigadora de tiempo completo
Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco

Septiembre de 2017- a la fecha

Durante este periodo de tiempo he participado activamente:

- Grupo temático de química teórica básica.
- Grupo temático experimental de especialidad.
- Asesora de 3 proyectos terminales de la licenciatura en Ing. Ambiental y un proyecto terminal de Ing. Química.
- Experiencia docente en cursos de licenciatura (tronco general y tronco básico profesional) y maestría (Posgrado en Ciencias e Ingeniería de Materiales).

Profesor visitante.

Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa.

Enero - diciembre de 2010

Durante este año de trabajo realicé las siguientes funciones y proyectos:

- Coordinadora del proyecto docente enfocado a incrementar el uso de las nuevas tecnologías de la información y la comunicación en el Departamento de Química de la UAM-Iztapalapa.
- Asesora del servicio social de Carmen Cedillo para la creación de una plataforma streaming con material didáctico.
- Desarrollo de material didáctico original. Realización del vídeo “Efecto fotoeléctrico”, realización del guión para el material interactivo “Orbitales atómicos e híbridos”.
- Construcción y coordinación de un banco de ejercicios integradores para los cursos propedéuticos de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería (DCBI), de la UAM-Iztapalapa.
- Impartición de talleres a los alumnos de la DCBI de la UAM-Iztapalapa sobre seguridad en el laboratorio y técnicas básicas de laboratorio.

- Elaboración del guión de sumas y restas de fracciones para “Portal virtual de enseñanza de las matemáticas pre-universitarias UAM”.
- Colaboradora en el proyecto docente ‘Elaboración de herramientas pedagógicas para evaluar y desarrollar habilidades en matemáticas y en comunicación en los alumnos de nuevo ingreso de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería’. Donde elaboré reactivos de comprensión de lectura, matemáticas y resolución de problemas.
- Impartición de clases a nivel licenciatura (Estructura de la materia, Laboratorio de simulación) y en los cursos complementarios (propedéuticos).

Profesor asociado. Septiembre de 2008 - diciembre de 2009
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa.

En este período de tiempo realicé las siguientes actividades:

- Colaboradora en el proyecto docente “Elaboración de herramientas pedagógicas para evaluar y desarrollar habilidades en matemáticas y en comunicación en los alumnos de nuevo ingreso de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería”. Donde elaboré reactivos de comprensión de lectura, matemáticas y resolución de problemas.
- Impartición de clases a nivel licenciatura en el tronco común de la DCBI.

IMPARTICIÓN DE TALLERES

- Taller básico sobre seguridad en los laboratorios.
 Imparte: Hugo Ávila y Alejandra Navarrete
 Duración: 12 horas
 Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa.
 27 de abril - 2 de mayo, 1 - 5 de junio, 6 - 10 de septiembre de 2010.
- Taller de técnicas básicas de laboratorio.
 Imparte: Alejandra Navarrete y Hugo Ávila
 Duración: 12 horas
 Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa.
 4 - 8 de octubre de 2010.
- Curso de química cuántica computacional (Instructora)
 Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa.
 Duración: 25 horas.
 30 de agosto al 3 de septiembre de 2004

FORMACIÓN COMPLEMENTARIA

- “Desarrollo de la Comunicación Escrita”
 Programa Formación de Académicos. Universidad Iberoamericana.
 Duración: 12 horas.
 11,18 y 25 de febrero, 4 de marzo de 2013.
- “Comunicación pública de la Química”
 Centro mexicano de química verde y microescala, Young ambassadors for chemistry de IUPAC. Universidad Iberoamericana.
 Duración: 12 horas.
 30 de octubre 2012.

- “From Simple Fluids to Chemical Reactions and Interactive Molecular Simulation Courses”
2nd Meeting on Molecular Simulations. Universidad Autónoma Metropolitana y Universidad Autónoma del Estado de México.
Duración: 40 horas
Diciembre de 2010
- “El ciberplagio: ¿Cómo detectarlo y evitarlo?”
11. Congreso Internacional y 14º Nacional de material didáctico innovador. Nuevas tecnologías educativas.
Duración: 20 horas
19 - 21 de octubre de 2010
- “Modelado 3D básico con Blender”
Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa.
Duración: 20 horas
19 al 23 de julio de 2010.
- “Desarrollo de competencias en el aula”
Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa.
Duración: 20 horas
18 al 20 de enero de 2010
- “Gestión y evaluación del aprendizaje en Moodle”
Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa.
Duración: 20 horas
7 y 8 de enero de 2010
- “Herramientas para la integración de las Tecnologías de Información y la Comunicación en la práctica docente”
Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa.
Duración: 20 horas
20 - 24 de abril de 2009
- “¿Qué es la Educación Virtual?”
Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa.
Duración: 40 horas
10 de noviembre al 07 de diciembre de 2008
- “Fundamentos y Aplicaciones de la Teoría de Orbitales Moleculares”
Facultad de Química de la Universidad de Guanajuato.
Duración: 20 horas
28-30 de mayo de 2006
- “Modalidades de conducción de los procesos de enseñanza y aprendizaje”
Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa.
Duración: 20 horas.
8 - 12 de septiembre de 2003.
- “Curso de química cuántica computacional”
Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa.
Duración: 25 horas.
1 - 5 de septiembre de 2003.

- “Fundamentos de Didáctica general”
Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa.
Duración: 20 horas.
21 - 25 de abril de 2003.
- “Introducción a la electroforesis capilar” (Teórico - práctico)
Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa.
Duración : 40 horas.
5 de julio al 5 de agosto de 2002

PARTICIPACIÓN EN CONGRESOS

A continuación presento mis asistencias a Congresos donde he sido expositora oral.

- Alejandra M. Navarrete-López, Alessandro Erba, Claudio M. Zicovich-Wilson y Roberto Dovesi.
Propiedades elásticas, herramienta para determinar la transición de fase en la Katoita.
XIII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica.
Noviembre, 2014. Morelia, Michoacán.
- Alejandra M. Navarrete-López, Minhuy Hô, Alejandro Ramírez Solís, Claudio M. Zicovich-Wilson.
Análisis topológico de la densidad electrónica del poliacetileno dopado con Li. Naturaleza del enlace Li-PA.
XI Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica.
Noviembre, 2012. Toluca, Estado de México.
- Alejandra M. Navarrete-López, Gilberto Córdoba Herrera, Joel Ireta Moreno, Patricia Villamil Aguilar, Margarita Viniegra Ramírez.
Elaboración de un vídeo educativo.
11. Congreso Internacional y 14º Nacional de material didáctico innovador. Nuevas tecnologías educativas.
Octubre, 2010. México, D.F.
- Alejandra M. Navarrete-López, Jorge Garza, Rubicelia Vargas.
Análisis de carga de Hirshfeld en puentes de hidrógeno inter e intramoleculares.
VIII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica.
Noviembre, 2009. Colima, Colima.
- Alejandra M. Navarrete-López, Jorge Garza, Rubicelia Vargas.
Papel de los puentes de hidrógeno intramoleculares en la estabilidad de una familia de oxamidas.
VII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica.
Noviembre, 2008. Xalapa, Veracruz.
- Alejandra M. Navarrete-López, Jorge Garza, Rubicelia Vargas.
Tools for the study of adducts with hydrogen bonds: AIM, ELF and NMR shielding constants.
12th International Conference on the Applications of Density Functional Theory.
Agosto, 2007. Ámsterdam, Holanda.
- Alejandra M. Navarrete-López, Jorge Garza, Rubicelia Vargas.
Importancia de la conjugación y los puentes de hidrógeno intramoleculares en la

estabilidad de oxamidas.

V Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica.

Noviembre, 2006. San Luis Potosí, S.L.P.

A continuación presento mis asistencias a Congresos donde he expuesto carteles.

- Alejandra M. Navarrete-López, Federico González, Jorge Garza y Rubicelia Vargas.
Estudio teórico de la hematita ($\alpha - Fe_2O_3$). Efecto del dopaje con Mn^{3+}
XIV Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica.
Noviembre, 2015. Tonalá, Jalisco.
- Alejandra M. Navarrete-López, Ma. Luisa San Román, Claudio M. Zicovich-Wilson.
Estado de transición entre la celulosa $I\alpha$ y $I\beta$.
XII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica.
Noviembre, 2013. Juriquilla, Querétaro.
- Alejandra M. Navarrete-López, Ma. Luisa San Román, Claudio M. Zicovich-Wilson.
Estudio metodológico de las fases $I\alpha$ y $I\beta$ de la celulosa.
X Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica.
Noviembre, 2011. Pachuca Hidalgo.
- Alejandra M. Navarrete-López, Álvaro Vazquez-Mayagoitia, Jorge Garza, Rubicelia Vargas.
Análisis de Carga de Hirshfeld en aductos que presentan puentes de hidrógeno, propuesta iterativa.
IX Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica.
Noviembre, 2010. Pachuca Hidalgo.
- Nancy Martín, Margarita Viniegra, Joel Ireta, Alejandra Navarrete-López.
Elaboración de un objeto de aprendizaje sobre Orbitales Atómicos. Sesión de carteles.
11. Congreso Internacional y 14 Nacional de material didáctico innovador. Nuevas tecnologías educativas. Octubre, 2010. México, D.F.
- Alejandra M. Navarrete-López, Jorge Garza, Rubicelia Vargas.
Encontrando la estructura de capas en átomos con la densidad de energía cinética de Kohn-Sham.
VI Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica.
Noviembre, 2007. San Miguel Regla, Hidalgo.
- Alejandra M. Navarrete-López, Jorge Garza, Rubicelia Vargas.
Caracterización de puentes de hidrógeno intramoleculares usando la constante de apantallamiento de RMN.
IV Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica.
Noviembre, 2005. Chihuahua, Chihuahua.
- Alejandra M. Navarrete-López, Jorge Garza, Rubicelia Vargas.
Evaluación de la constante de apantallamiento de RMN con métodos de la Química Cuántica.
III Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica.
Noviembre, 2004. Puebla, Puebla.
- Alejandra M. Navarrete-López, Gabriela Valdés-Ramírez, Giaan Álvarez, Teresa Ramírez.
Estudio del Efecto de Diferentes Parámetros Sobre la Determinación Potenciométrica de Haluros.
XVII Congreso Nacional de Química Analítica.
Septiembre, 2002. Xalapa, Veracruz.

COMPETENCIAS Y HABILIDADES

- Idiomas* Español (nativo).
Inglés.
Italiano.
Japonés (Conocimientos básicos).
- Habilidades computacionales* Ambiente Linux, Windows.
Códigos de química computacional: CRYSTAL, VASP, NWChem, Gaussian, MolPro, etc.
Plataformas educativas como Moodle
Visualizadores J-ice, J-mol, VMD, etc.
Conocimientos de Fortran y Python.
- Habilidades de trabajo* Trabajo en equipos interdisciplinarios.
Flexibilidad y adaptación ante cambios en los proyectos.
Gran capacidad de comunicación.
Análisis y resolución de problemas.
Capacidad docente, interés en la vida académica
(Representante del posgrado en la UAM-Iztapalapa).