



Encuentra tu cartel: lista alfabética por apellido. La clave indica el día (J = jueves, V = viernes) y el número de lugar.

Ambas sesiones: 17:00 – 19:00 h · Pasillos del Edificio Tecnía

JUEVES 29 DE OCTUBRE

128 carteles

SESIÓN DE PÓSTERES · 17:00 – 19:00 h · PASILLOS DEL EDIFICIO TECNIA

J-001 Elier Enrique Abreu Martínez

QSPARFlow: un flujo de trabajo en KNIME para el análisis integrado de relaciones estructura-actividad o estructura-propiedad

J-002 Alejandro Acevedo Vázquez

Estudio teórico de la influencia de la 5-hidroxitilmitosina en las regularidades de formación de fragmentos mínimos de dúplex de ADN

J-003 Bryan Ashley Acosta García

Nucleofilicidad Desplazada: Definición y aplicación a las escalas de Hammett y Mayr

J-005 Aime Lorena Acosta Soto

Estudio de primeros principios de las propiedades electrónicas y ópticas del SiC para aplicaciones en conversión de energía solar

J-006 Gloria María Acosta Tejada

Estudio teórico-experimental de derivados de escuaínas para su aplicación en baterías de flujo redox

J-007 Salomón de Jesús Alas Guardado

Estudio de la estabilidad térmica de la histona (rHMFb)₂ por dinámica molecular

J-008 Daniela Alatríste Cortés

Estudio DFT de materiales híbridos fullereno-borofeno para su posible aplicación en el almacenamiento de hidrógeno.

J-009 Jesus Luis Alberto Ponce-ruiz

Lithium-Ion Diffusion in LiCoPO₄ Cathode Material: An Ab Initio Molecular Dynamics Study Based on Mean Square Displacement

J-010 Gabriela Alcántara Barrios

Caracterización electrónica de la microsolvatación de fármacos antiinflamatorios en agua y mezcla etanol-agua

J-011 León Alday-toledo

Modelos generativos genéticos con representaciones moleculares de texto

J-012 León Alday-toledo

Una estructuración del espacio químico: Clusterización de moléculas orgánicas pequeñas mediante transformadores y lenguaje natural en el espacio de Mahalanobis

J-013 Alexis Eduardo Alonso Ruiz

Implementación del esquema GIAO en el Hamiltoniano de ZORA en código deMon2k

J-014 Daniela Alvarado González

Implementación de modelos interpolados de la Teoría Variacional del Estado de Transición (IVTST) en Eyringpy

J-015 James Anderson

Electron Correlation and Scalar Relativity in QTAIM

J-016 Nathaly Aparicio

Especiación de aminoácidos y péptidos relacionados con el Síndrome de Rett.

J-017 Felipe Aparicio

Exploración del espacio químico mediante la distancia y el ángulo de Mahalanobis: análisis comparativo de los esquemas de "embedding" molecular Mol2Vec y MolBERT

J-019 María Fernanda Baez Vazquez

De la partícula libre a la partícula en una caja: estudio de la entropía de Shannon y la suma entrópica en un pozo de potencial de profundidad finita.

J-020 Adan Barbosa Jiménez

Métodos modificados de Newton-Cotes para resolver la integral de Boys

J-021 Bianca Priscila Barrera Lara

Tratamiento Algebraico de la Anarmonicidad en Moléculas Diatómicas mediante la Transformada de Bogoliubov

J-022 María Fernanda Barrientos Carrasco

Estudio computacional de nanotubos de carbono como transportadores de fármacos contra Alzheimer

J-023 Jorge Barroso Moreno

Design of Deep Eutectic Solvents Guided by Surface Polarity and Molecular Dynamics

J-024 Alejandro Bautista

Búsqueda de alótropos y polimorfos mediante algoritmos evolucionarios y potenciales MatterSim

J-025 Valeria Bautista Santamaría

ESTUDIO COMPUTACIONAL DEL DESPLEGAMIENTO TÉRMICO DE PROTEÍNAS

J-026 Julio Cesar Beltran Sanchez

Estudio teórico de la formación de materiales con cavidades formados a partir de estructuras ciclooligoméricas de diorganoestaño (IV)

J-027 Luisa Paulina Beltrán Jakes

Influencia de la glucosilación sobre las propiedades electrónicas y la reactividad química de flavonoides de Bursera: un estudio DFT

J-028 Andrea Beléndez López

Estudio computacional: adsorción de levodopa sobre los sistemas nanoestructurados C24 y B12N12

J-029 Federico Benito Villanueva

Metodología Computacional para la Determinación de Parámetros Inerciales en Moléculas Fluorescentes Mediante Métodos DFT y TD-DFT

J-030 Luz Alejandra Bernal Guzman

Desplazamientos químicos en resonancia magnética nuclear de protón mediante la teoría de perturbación de la densidad auxiliar multicomponente

J-031 Roberto Bernal Jaquez

El uso de los Autocodificadores en la estructuración del espacio químico

J-032 Antonio Bonesana Espinoza

Análisis por medio de la participación IQA (interacting quantum atoms) sobre interacciones colectivas y covalentes en enlaces largos carbono-carbono simples.

J-033 Iván Alejandro Bonfil Rivera

Caracterización de cianuros e isocianuros metálicos: Desempeño de funcionales de orbitales naturales

J-034 Noé Brígido Salvador

Efecto del dopaje del fullereno B₁₂N₁₂ con Al, Ga e In en la adsorción de 17 α - metiltestosterona: un estudio DFT

J-035 Fernando Valentin Bucio Gomora

Diseño racional de fármacos multifuncionales derivados de Ketamina como candidatos para el tratamiento del Síndrome de Rett

J-036 Rosa Angélica Bustamante Rendón

Caracterización reológica de petróleo crudo ligero y optimización de surfactantes no iónicos para recuperación mejorada de petróleo mediante estudio experimental y modelado numérico

J-037 Diego Andrey Caballero Castillo

Un Análisis de la Energía Cinética desde la Matriz de Densidad Reducida de Orden Uno

J-038 Alfonso Cabello Arriola

Evaluación y estudio in silico de la actividad bactericida de un heteroesteroide en Staphylococcus aureus ATCC 25923

J-039 Paulo César Calderón Tamés

First-Principles Investigation of the Structural, Electronic, and Magnetic Properties of Titanium-Based MXenes (Ti₃C₂ and Cr₂TiC₂O₂) for Flexible Spintronics and Energy Storage

J-040 Diana Lucia Campa Guevara

ESTUDIO TEÓRICO DEL USO DE LÍQUIDOS IÓNICOS DERIVADOS DE IMIDAZOL FUNCIONALIZADOS CON AMINOÁCIDOS PARA CAPTURA DE CO₂

J-041 Linda Verónica Campos Fernández

El rol de los residuos catalíticos Cys25 e His162 en las interacciones intermoleculares de nuevos péptidos como potenciales inhibidores de la cruzipaina: Estructura Electrónica, Acoplamiento Molecular y Dinámica Molecular

J-042 B. Carolina Morales-garcía

Evaluación in silico del 2-(2'-hidroxifenil) benzoxazol y tres de sus derivados como candidatos terapéuticos de enfermedades neurodegenerativas

J-043 Pablo Carpio Martínez

Dinámica del Transporte Cuántico de Calor en Sistemas Abiertos Mediante Aprendizaje Automático

J-044 Mirzam Andrea Carreón González

Errores sistemáticos de entropía dependientes de la molecularidad en la termoquímica de reacciones en solución usando métodos de solvatación continua.

J-045 Mirzam Andrea Carreón González

El superóxido como antioxidante endógeno selectivo vía SET.

J-046 Shanti Kinari Castillo Avila

ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LA CAPACIDAD ANTIOXIDANTE DE FÁRMACOS NEUROPROTECTORES A PARTIR DE LA HERRAMIENTA eH- DAMA

J-047 Gabriela del Rosario Castillo Toraya

Exploring the Chemical Space of Planar Tetracoordinate Nitrogen Compounds

J-048 Raul Emmanuel Castrejon Garcia

Caracterización fisicoquímica del sitio activo de la enzima del citocromo P411BM3- CIS y su variante mutada P411-AzetS en la biocatálisis de la aziridina a la azetidina.

J-049 María Eugenia Castro Sánchez

Estudio teórico de complejos mixtos de cobre (II) con tirosina

J-050 Carlos Eduardo Cazares Salgado

Descripción de las interacciones entre complejos pentaleno del grupo 1 y gases contaminantes

J-051 Juan Erick Cerpa Calixto

Elucidando la estructura de los sistemas HNgBF⁺ (Ng = He – Rn)

J-052 Carlos Humberto Cervantes Trujillo

Estudio teórico (DFT) de derivados sustituidos de 2-mercaptobenzimidazol: Descriptores de reactividad, QTAIM y potencial quelante/inhibidor de corrosión

J-053 Joaquín Chapa Rodríguez

Caracterización teórica de complejos de vanadio 1:3, 1:4, 1:6 con potencial anticancerígeno y antidiabético

J-054 Paula Jazmín Chávez Franco

Reactividad electrónica y energías de adsorción en sistemas fármaco-carbon dot quirál

J-055 Luis Cobos

Propuesta Mecanística para la Síntesis de 5-ALA a partir del Metil Levulinato

J-056 Mariana Jaquelinne Cordero Castañeda

Revelando la estructura electrónica de metaloenzimas de Fe mediante RIXS (1s2p): del ajuste de simulaciones de multiplete a datos experimentales al análisis de covalencia orbital diferencial.

J-057 Avelino Cortés Santiago

Análisis teórico de la estructura electrónica de un zwitterión cíclico derivado de una piridin-2-ona.

J-058 Vanessa Guadalupe Cota Durán

Propiedades electrónicas y reactividad química de alquilamidas bioactivas de Acmea oleracea mediante DFT

J-059 Julián Cruz Borbolla

STACKING ENSEMBLE LEARNING PARA LA PREDICCIÓN DE LA TOXICIDAD EN DERIVADOS DE FENOLES MEDIANTE DESCRIPTORES cDFT Y QTAIM

J-060 Jazmín Delgado Avilez

Estudio de las vacancias en materiales de carbono y su efecto en la inactivación de la respuesta electroquímica

J-061 Esteban Delgado Curiel

Estudio teórico-experimental de absorción y fluorescencia de soluciones de 3- hidroxiflavona.

J-062 Damián Alberto Delgado Montiel

Efecto de los anillos heterocíclicos fusionados en las propiedades optoelectrónicas y fotovoltaicas de los sensibilizadores D- π -A basados en trifenilamina para DSSC.

J-063 Luis Alberto Desales Guzmán

Enhanced Reversible Hydrogen Storage in Nickel-Decorated Zeolite-Templated Activated Carbon: Synergistic Defect Anchoring and Optimal Binding Energetics. A DFT Study

J-064 Diana Díaz Ocampo

Exploración de mecanismos de permeación en materiales 2D: Un estudio del circumcoroneno mediante Automekin

J-065 René Gerardo Escobedo González

Estudio teórico de la complejación de la beta-Ciclodextrina con la perezona

J-066 Arián Espinosa-roa

Electronic Structure and Photostability of Benzothiadiazole-Based D–A–D Small Molecules: An Integrated Theoretical-Experimental Analysis of Frontier Orbital Alignment, Polaron Reorganization, and π -Conjugation Effects

J-067 Arián Espinosa-roa

Coordination selectivity of benzo-15-crown-5 ether derivatives toward Na⁺, Li⁺, and K⁺: a multi-level DFT/NBO/QTAIM study for solid polymer electrolyte design

J-068 José Ángel Espinoza Basopoli

Estudio computacional de colorantes orgánicos D- π -A basados en carbazol como sensibilizadores para celdas solares DSSC: efecto del grupo aceptor sobre las propiedades electrónicas y ópticas

J-069 Alberto Alejandro Fajardo de la Rosa

CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL Y SELECTIVA DE DENDRÍMEROS A PÉPTIDOS DERIVADOS DE LAS PROTEÍNAS DE RESERVA DE LA SEMILLA DE AMARANTO.

J-070 Luis Fernando García

Estructura electrónica y magnetismo de cadenas lineales basadas en triangulenos fusionados

J-071 Luis Fernando García

ENLACE QUÍMICO Y CORRELACIÓN ELECTRÓNICA EN SISTEMAS DE BAJA DIMENSIONALIDAD: UN ESTUDIO DFT+U+V

J-072 Anaïd Flores

Evaluación de descriptores de reactividad química en α -aminofosfonatos y su correlación con actividades biológicas

J-073 Nelson Flores Gallegos

Algunas aplicaciones de las divergencias informacionales en Química y Biología evolutiva.

J-074 Rafael Flores Larrañaga

Paisajes conformacionales de baja energía en C₂H₆S₂: implicaciones para la espectroscopia rotacional y la astroquímica interestelar.

J-075 Martha Magdalena Flores Leonar

Estudio del comportamiento electroquímico en derivados de bencidinas: efectos electrónicos y estéricos

J-076 Raul Rodolfo Flores Mena

Predicción de estructuras cristalinas de semiconductores orgánicos mediante machine learning y optimización global

J-077 Javier Flores Méndez

Effective electromagnetic properties of 1D photonic crystals with chiral and magnetic inclusions

J-078 José Alfredo Flores Ramos

Implementación de funciones de base tipo gaussianas en el formalismos de dispersión múltiple: con aplicación a la Estructura Fina de Absorción de Rayos-X Extendida

J-079 Ana Cristina Flores Simon

Efecto de la pasivación y funcionalización sobre las propiedades electrónicas y mecánicas de nanoalambres de silicio

J-080 Lizeth Franco Nolasco

Solucionador Cuántico Variacional de Eigenvalores con Funcionales de Orbitales Naturales

J-081 Uriel Fuentes Cortes

Análisis comparativo de las formas iónicas de la molécula de apigenina mediante TDDFT respecto a su contribución en los espectros de fluorescencia de soluciones de apigenina

J-082 Susana Gaggero de la Rosa

Influencia de la compresión isotrópica en la espectroscopia SERS del sistema Py–Au₂₀: un estudio DFT.

J-083 Antonio Gamboa Suárez

Influencia de la anisotropía del potencial en la solvatación de nanogotas de helio a temperaturas ultrafrías.

J-084 Andres Garay

Estudio teórico de aleaciones magnéticas 2D

J-085 Jimena Garcia

Base de datos espectral de hidrocarburos aromáticos policíclicos mediante TDDFT: una herramienta teórica para el análisis de las Bandas Interestelares Difusas.

J-086 Cesar Emmanuel Garcia Bonilla

Desempeño de diferentes niveles de DFT en el cálculo de la energía de red de moléculas de bajo peso molecular.

J-087 Angel Alejandro Garcia Chung

IA interpretable para la síntesis de hidrocarburos

J-088 Gabriel Eduardo Garcia Laiton

Adsorción saturada y coadsorción de NO sobre fullerenos de nitruro de boro dopados con carbono (B₁₂N₁₂–C)

J-089 Sebastian Garcia Pineda

Comparación de métodos teóricos para la estimación de entalpías de sublimación en compuestos orgánicos

J-090 Dolores Garcia Toral

Interacciones de apilamiento en bases purínicas: Un enfoque DFT-D3

J-091 Isidoro García-cruz

Estudio DFT de complejos diméricos e interacciones no covalentes en modelos de lignina Organosolv y Kraft

J-094 Michel Fabricio García Azuela

Integración de DFT y acoplamiento molecular de tintas para tatuajes a la proteína albumina: una aproximación a la formación de haptenos para la predicción de la respuesta inmune

J-095 Aileen Montserrat García Cano

Desarrollo de un algoritmo genético basado en selección no supervisada para la optimización global de cúmulos atómicos

J-096 Danna García de los Santos

Generación de estados desplegados de proteínas mediante variaciones de temperatura: Un enfoque computacional

J-097 Sonia García González

Diseño computacional de derivados de Tirosina, como candidatos para el tratamiento del síndrome de Rett

J-098 Ninette Celeste García Martínez

A Protocol to Determine ¹⁹F NMR Chemical Shifts for Tryptophan Metabolites

J-099 Marco Antonio García Revilla

Fuerza Donador-Aceptor mediante la partición en R₃ de la 1-TDM

J-100 Nahomi Garrido Cantor

Descripción de la estructura molecular de isómeros C₆H₆ mediante índices derivados de la matriz Laplaciana en teoría de grafos.

J-101 Aura Ximena Gomez Heredia

Constantes de velocidad dependientes de la presión y temperatura k(T,P) mediante RRKM en Eyringpy

J-102 Abdi Gonzalez Benítez

Acoplamiento molecular de moduladores del receptor LXR (LXRα/LXRβ): identificando sitios clave de unión con enfoque en MALSD

J-103 Israel González Cortés

Estudio DFT de las propiedades electrónicas, estructurales y mecánicas de una nueva monocapa híbrida de C₄BN: un derivado isoestructural del bifenileno

J-104 Luis Diego González Garrido

Influencia de la naturaleza tautomérica en las propiedades ácido-base de las bases nitrogenadas.

J-105 Isidro Juvenal González Panzo

La electrodesionización como paso de recuperación selectiva en el reciclaje de baterías de iones de litio: integración, modelado y simulación computacional del proceso

J-106 Anuar González Zamudio

Aproximación al funcional de energía cinética mediante redes neuronales de Kolmogorov-Arnold

J-107 Antonio de Jesus Guillermo Jiménez

Análisis teórico de efectos cooperativos en interacciones π-π de agregados de fenantrenos 3,6-disustituídos mediante DFT

J-108 José Gustavo Ávila

Síntesis de Derivados de Lawsona y Evaluación In Silico de su posible actividad contra SARS-CoV 2.

J-109 Jafet Gutierrez

Structural and magnetic transformation of FeRh nanoparticles upon deposition on BaTiO₃

J-110 Boris Daniel Gutiérrez Cortés

Análisis del error en la matriz dinámica para el cálculo de fonones en cristales orgánicos usando cálculos ab initio

J-111 Jorge Gutiérrez Flores

Afinidad proteína-ligando desde la densidad electrónica: identificación de contribuciones cooperativas y anticooperativas a nivel de residuo

J-112 Eduardo Gabriel Guzmán López

Potenciales centrados en átomos para la estimación de constantes de acidez con métodos DFT de bajo costo.

J-113 Myrna H. Matus

Matrices de localización y deslocalización electrónica en la aproximación HF y DFT como índices moleculares para caracterizar la zona reactiva del anhídrido isotóico

J-114 Diana Heredia

Density Functional and Wave Function-Based Quantum Chemical Calculations on Transition Metal Complexes with Redox-Active Ligands

J-115 Luis Eduardo Hernandez Dominguez

Obtención de un andamio molecular para el diseño de nuevos antihistamínicos

J-116 Ana Eugenia Hernandez Hernandez

Análisis conformacional y lipofilicidad de Glifosinas

J-117 Brayán Hernandez Nopaltecatl

ESTUDIO TEÓRICO DE LA REACCIÓN REDUCTIVA DE LA ENZIMA NAD(P)H QUINONA OXIDORREDUCTASA I

J-118 Luis Felipe Hernández Ayala

Mapeo de la polifarmacología de trofinetida en el síndrome de Rett: Un análisis computacional multietapa.

J-119 Galia Hernández Bravo

EFFECTO DEL DOPAJE SUSTITUCIONAL EN LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y ELECTRÓNICAS DEL BOROFENO

J-120 Gerardo Hernández Juárez

Evolución estructural en cúmulos de BnHn+xq- (n = 5 - 12, x = 0, 2 and 4, q = 0, 2)

J-121 Alejandra Sunem Hernández Pinzón

Estudio de la estabilidad conformacional de desoxiguanosina en solución acuosa con dinámica molecular y su posible relación con procesos oxidativos del ADN

J-122 Gabriel Isidro Velasco

Estudio computacional de las propiedades químicas de nuevos compuestos tetra-orto- azobencenos

J-123 Aldo J. Mortera-carbonell

Densidades de energía en el espacio real: dos herramientas emergentes para explorar la naturaleza del enlace químico

J-124 Aldo J. Mortera-carbonell

Estudio teórico de la estructura electrónica y propiedades de alótropos de nitrógeno para materiales de alta densidad energética.

J-125 Alonso Daniel Jacobo Hernández

Caracterización teórica de estados moleculares de Rydberg mediante integración numérica multicéntrica.

J-126 Adrián Alejandro Jiménez Garnica

Predicción y formulación de comportamiento magnético a partir de ecuaciones de Van Vleck y simulación de multiplete ajustada a datos de XMLD.

J-127 Francisco José Palacios-can

Synthesis, crystal and DFT structure analysis of a conformationally locked stannylphosphine

J-128 Marí Toña Juárez Méndez

Concordancia entre plataformas open-source para la predicción de propiedades ADMET de antivirales contra influenza

J-129 Andrea Gwendolyne Juárez Tecua

Análisis de la relación estructura-actividad (QSAR) y reactividad química global de polifenoles con potencial actividad inhibitoria de la xantina oxidasa

J-130 Miguel Osvaldo Juárez Tecua

Estudio teórico de la energía de adsorción de calix[4]arenos funcionalizados con agroquímicos y sus metabolitos.

J-131 Humberto Laguna Galindo

Wehrl Entropy and Husimi Mutual Information under Dephasing in Harmonic- Oscillator Superposition States

J-132 Beatriz Lagunas Simón

Evaluación teórica de la estructura y propiedades electrónicas de copolímeros organometálicos conjugados de Pt(II) con potencial biomédico

VIERNES 30 DE OCTUBRE

130 carteles

SESIÓN DE PÓSTERES · 17:00 – 19:00 h · PASILLOS DEL EDIFICIO TECNIA

V-001 Imelda Lizeth Lazcano Carrasco

Descripción topológica y energética de interacciones proteína-ligando hacia la familia Bcl-2

V-002 Edith Leal-sánchez

Direct dynamics simulations of photochemistry without the Born-Oppenheimer approximation

V-003 Renato Lemus

Simulación del espectro Raman a altas temperaturas de los isotopólogos $^{13}\text{CO}_2$ y $^{16}\text{O}^{13}\text{C}^{18}\text{O}$

V-004 Estefanía del Alba Lizama García

Análisis de descriptores moleculares de derivados de quinolina con actividad frente a *Mycobacterium tuberculosis*.

V-005 Carlos Antonio Llamas Castro

Interacción de β -ciclodextrina con electrolitos: un estudio de complejación

V-006 David Lopez Valderrabano

Estudio de los cambios en los parámetros estructurales y en las propiedades mecánicas y elásticas del ThSiO_4 debido a la transición de fase de primer orden Torita-Hutonita

V-007 Mayra Lozano Espinosa

Reconocimiento molecular de compuestos neuroactivos en el receptor de histamina H3

V-008 César Eduardo Lozoya Cruz

Estudio de dinámica molecular de emulsiones de biodiesel en gotas de aceite inmersas en agua.

V-009 Mónica López García

Caracterización fisicoquímica del interior de la chaperonina GroEL/GroES

V-010 Diana López López

Modelo QSAR de derivados de FDIs y su actividad biológica sobre cáncer de mama triple negativo

V-011 Jair Alejandro Madera Hurtado

Correlaciones entre descriptores electrónicos y propiedades fisicoquímicas en derivados de 4-aminopiridina mediante DFT y CDFT

V-012 Blanca Elena Magallón Torres

Evaluación comparativa sistemática de EPR en sistemas modelo de Cu(II) con péptidos

V-013 Axel Magdaleno Rodríguez

Modelos de similitud molecular tridimensional para la priorización de ligandos del receptor μ -opioide con perfil funcional favorable hacia proteína G

V-014 Paul Jessus Manjarrez Escobar

Microsolvatación y captura de metales pesados en fragmentos β -O-4 de lignina: un estudio basado en búsqueda estocástica y análisis de estructura electrónica.

V-015 David Eduardo Marquez Ruiz

Estudio teórico de las propiedades eléctricas de novedosas estructuras D- σ -A como potenciales diodos orgánicos moleculares

V-016 Moncerrat Martínez Arano

Partición de energías de excitación calculadas con la teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo

V-017 Nancy Guadalupe Martínez Díaz

Evaluación del potencial inhibitorio de los ácidos cafeico y clorogénico sobre la α -glucosidasa mediante estudios in silico e in vitro.

V-018 Michael Adán Martínez Sánchez

Densidad de Energía Cinética de Gases Nobles: ¿Un comportamiento universal?

V-020 Fernando José Martínez Villarino

Desarrollo del módulo electrónico de AromaTools con particiones del espacio de Hilbert

V-021 Flor María Briceño-vargas

Determinación computacional de la ruta biogenética de las cheiloclínas A-I a través de métodos multiescala

V-022 David Clemente Matus Cortes

Estudio computacional de polímeros redox activos orgánicos: antraquinonas, como materiales de transferencia electrónica para baterías sostenibles.

V-023 Fabian Mendez

Estudio DFT de materiales híbridos borofeno-carbono y su interacción con elementos COV asociados a procesos constructivos.

V-024 Mariano Mendez Chavez

Implementation of the crystal molecular-orbital method in deMon2k

V-025 Hebert Rodrigo Mojica Molina

$\text{Zn}_2[\text{MIV}(\text{CN})_6]$ Octacyanidometallates as Semiconducting Frameworks with Negative Thermal Expansion: First-Principles Electronic and Structural Insights

V-026 Yeljair Enrique Monascal Rodríguez

PRIMER ESTUDIO TEÓRICO DE LA REACCIÓN ENTRE EL METILENO TRIPLETE ($^3\text{CH}_2$) Y EL CICLOPROPENILIDENO ($\text{c-C}_3\text{H}_2$) EN EL MEDIO INTERESTELAR

V-027 Aldo Josue Montejo Aceves

Absorción de CO_2 sobre nanopartículas de Cu dopadas con Ti y Zr . ($n=3-14$)

V-028 Fernado Montejo Alvaro

NiPd Alloy clusters deposited on graphene and their reactivity toward H_2 adsorption: A DFT Study

V-029 Miguel Fernández Montilla Molina

Entrenamiento de potenciales interatómicos basados en aprendizaje automático para cúmulos de boro

V-030 Hector Daniel Morales Ochoa

Análisis de los puentes de hidrógeno en cristales de quercetina: estudio con QTAIM/NCI desde DFT periódico

V-031 Ricardo Antonio Moreno Inzunza

Evaluación de los sitios de coordinación en complejos de Cu(I)

V-032 Andrea Moreno-ceballos

Evaluación computacional de las interacciones entre cumarina-tiazol y residuos clave de la proteína UDP-galactopiranos mutasa de *Mycobacterium tuberculosis*.

V-033 Cercis Morera Boado

Espectros de absorción electrónica de dímeros homo- y heteronucleares de Cu , Ag y Au , y sus complejos con piridina: evaluación comparativa mediante TD-DFT y análisis del carácter de las transiciones

V-034 Fernando Murillo

Modulación de la Aromaticidad y Antiaromaticidad Mediante Sustitución Alternada de Silicio

V-035	Noe Muñoz Perea Estudio computacional de espectros UV-Vis y RMN en disolvente para selenocumarinas	V-053	Israel Omar Perez Lopez LiCo1-x-yFexCryPO4 CATHODE: PERFORMANCE AND PHYSICAL PROPERTIES FROM FIRST PRINCIPLES
V-036	Christopher Muñoz Rodríguez Cálculos de excitaciones en sistemas con interacciones coulómbicas y no coulómbicas.	V-054	Sheila María Peña González Estudio teórico de la fotoisomerización del 11-cis-retinal a all-trans.
V-037	Betsie Carolina Muñoz Sanchez Estudio teórico de las propiedades estructurales, electrónicas y espectroscópicas de MgNC y MgCN en el medio interestelar.	V-055	José Antonio Piceno Martínez Análisis conformacional y energético de fragmentos de ADN que contienen 8- oxoguanina
V-038	Misaela Márquez ESTUDIO TEÓRICO DE LAS REACCIONES TROPOSFÉRICAS DE LOS ACLANOS C1-C5 CON RADICALES ÓXIDO DE HALÓGENO.	V-056	Ana Cecilia Piñón Reyes Modelado computacional de la interacción CO, CO ₂ y NO ₂ en nanografenos funcionalizados con ZnO.
V-039	Erika Navarrete Medel Estudio sistemático de la caracterización de las interacciones no covalentes en materiales porosos unidos por interacciones intermoleculares: validación DFT y análisis QTAIM	V-057	Leon Daniel Ponce Perez Caracterización de la fotoconversión de interruptores moleculares bajo restricción espacial
V-040	Andrea Lisette Navarrete Mosquera ESTUDIO COMPARATIVO DFT/DFTB DE UN DERIVADO DE IMIDAZOL COMO INHIBIDOR DE CORROSIÓN DEL HIERRO	V-058	Aaron Yosafath Puente Martinez Estudio de primeros principios de las propiedades electrónicas bajo presión de silicatos ASiO4 (A = Hf, Zr y Th) con estructura tetragonal tipo zircón
V-041	Lisset Noriega de los Santos Estabilidad termodinámica y reactividad de los díoles geminales en la familia CnH(2n+2)O2 (n=1-10)	V-059	Luis Ricardo Pérez Esquivel Determinación de la covalencia orbital diferencial (DOC) en sistemas multimetálicos de hierro
V-042	Daniel Alejandro Montes de Oca Marrero Estudio Computacional del Mecanismo de Hidrogenólisis Selectiva de Enlaces C-O-C en Modelos de Biomasa de Sargazo Catalizada por Sitios Activos M-N-C (M=Co, Rh)	V-060	Adriana Pérez-gonzález Elucidación teórica de los mecanismos del daño oxidativo por 5-fluorouracilo a biomoléculas.
V-043	Marlon Saul Ojeda Percastegui Implementación computacional del algoritmo NEB para la búsqueda de estados de transición utilizando ADFT	V-061	César Quej Solís Adsorción y liberación asistida por protonación de tamoxifeno sobre grafino: estudio DFT y dinámica molecular
V-044	José Francisco Olalde Valdez Diseño Computacional y Validación Experimental de Catalizadores Híbridos Ca/Cs en ZIF-8 Funcionalizado para Polimerización por Apertura de Anillo	V-062	Bruno Quintero Santiago Mecanismo computacional de deshidrogenación y disociación de metanol en cúmulos bimetálicos de Pd y Cu.
V-045	Víctor Yahir Orosco Hernández Control de la selectividad en reacciones pericíclicas mediante interacciones no covalentes	V-063	Fatima Ramos Adsorción de Tiofeno sobre nanopartículas de Cun dopadas con Zn. (n=2-10)
V-046	Rogelio Uriel Ortega Torres Modelando la adsorción de colorantes con MOFs: Una propuesta didáctica empleando Machine Learning	V-064	Carlos Manuel Ramos Castillo Self-Consistent Hubbard U in Ni layered hydroxide for Oxygen Evolution Reaction
V-047	Santiago Ortiz Milán Estudio de modelado molecular sobre la estabilidad de enzimas mutantes implicadas en la esclerosis lateral amiotrófica	V-065	Jorge Alberto Ramírez Cano Evaluación de aciclovir y hesperidina como candidatos a inhibidores de corrosión para acero X65 mediante descriptores de reactividad de la DFT conceptual
V-048	Diego Padilla Francisco Estudio Teórico de los isómeros de la glicina: Aniones en el ISM	V-066	Cinthia Ramírez Martínez Análisis de interacciones no covalentes en polimorfos de hielo: un estudio con funcionales semilocales y no locales
V-049	Johan Manuel Padilla Ibarra La Covalencia Orbital Diferencial como descriptor de reactividad en reacciones de catálisis de cross-coupling mediada por níquel	V-067	David Ignacio Ramírez Palma Análisis de las contribuciones energéticas en la preferencia geométrica de complejos de Ni(II): Más allá del Campo Cristalino
V-050	Luz María Palomino Asencio Propiedades adsorbentes del bifenileno prístino para la captura de contaminantes farmacéuticos: un estudio DFT	V-068	Emanuel Adolfo Ramírez Paredes Parametrización DFTB de boro enfocada a polimorfos de borofeno.
V-051	Maurizio Alejandro Pantoja Hernández Evolución estructural y propiedades electrónicas de cúmulos de boro dopados con berilio	V-069	Hector Enrique Rangel Hernandez Estudio teórico de las propiedades dinámicas y electrónicas del criptocromo de Drosophila melanogaster (dCRY), mediante un método multi-escala de Mecánica Cuántica/Mecánica Molecular (QM/MM)
V-052	Alam Gabriel Paredes Zavala Estudio computacional de la adsorción del ácido arsenioso sobre oligómeros de PET en medio acuoso	V-070	Uriel Josafat Rangel Peña DESCRIPTORES DE REACTIVIDAD Y ANÁLISIS TOPOLÓGICO DE BOROCENOS Y SUS COMPLEJOS CON METALES ALCALINOS

- V-071 Miguel Reina Tapia**
Estudio computacional de las propiedades antioxidantes de la fisetina
- V-072 Julieta Reyna**
Más allá del catecol: modulación de la actividad antioxidante/pro-oxidante de flavonoides mediante control de la química de Fenton.
- V-073 Julieta Reyna**
Cuando las BDE Fallan: Asistencia del Carboxilato Mediada por H-Bonds en Reacciones de Abstracción de Hidrógeno con el Radical Hidroperóxido
- V-074 Xquenda Guadalupe Ríos Aguilar**
Caracterización computacional del sitio de unión a ligando del componente 1 del receptor de membrana de progesterona, PGRMC1
- V-075 Marcos Rivera Almazo**
Emergencia de la quiralidad en nanomateriales: cuantificación quiro-óptica y adsorción enantioselectiva
- V-076 Luis Fernando Rivera Padilla**
Sobre un diccionario químico usando modelos de LLM
- V-077 Julio Alberto Rodríguez Hueso**
Cálculo de constantes de acoplamiento y magnetizabilidad en sistemas paramagnéticos usando la teoría de los funcionales de la densidad auxiliar
- V-078 José Rafael Rodríguez Rodríguez**
Estudio teórico de la formación de enlaces de hidrógeno empleando Funcionales de Orbitales Naturales de Piris
- V-079 Silvia Rojas Regalado**
Transición estructural en agua cuasi unidimensional
- V-080 Carolina Guadalupe Romero Cruz**
Efecto del dopaje con molibdeno sobre las propiedades electrónicas y de adsorción del grafeno para la detección de benceno y formaldehído: un estudio DFT
- V-081 Alejandra Yovana Romero López**
Interacciones no covalentes como moduladores del acoplamiento cinético-termodinámico en reacciones pericíclicas
- V-082 Karen Nallely Romero Maciel**
Evaluación de funcionales TFD híbridos y GGA en la descripción estructural periódica de MIL-53(Cr) y MIL-53(Al)
- V-083 Pricila Betbirai Romero Vázquez**
Propiedades electrónicas y vibracionales de AReO_4 (A = Na, Ag, K, Tl, Rb, Cs): un estudio de primeros principios
- V-084 Diego Román Montalvo**
Búsqueda de moléculas con centros tetracoordinados planos de carbono.
- V-085 Lady Johanna Rosero Carvajal**
Exploración molecular y bioactividad del aguacate Hass para el diseño de alimentos funcionales
- V-086 Ricardo Ruiz Coronado**
¿Puede la aniquilación de excitones tripletes explicar la migración excitónica entre pigmentos fotosintéticos? Un nuevo estudio computacional
- V-087 Cesar David Ruiz Galindo**
Modelado de Propiedades termodinámicas de soluciones electrolíticas a altas concentraciones exhibiendo ionización parcial
- V-088 Luis Antonio Ruiz García**
Síntesis de ácido
(2-(3-fluoro-4-hidroxifenil)acetil)glicil-L-prolil-L-glutámico con potencial aplicación contra el síndrome de RETT.
- V-089 Alejandra del Río Lima**
Química ultrafría: formación de moléculas diatómicas exóticas por debajo de 1 mK
- V-090 Nubia Saavedra Cruz**
Evaluación del Fullerenol prístino (C_{60}) y sistema $\text{TiO}_2\text{-C}_{60}$ para adsorber hidroxiduro, una posible aplicación de administración de fármacos: estudio in silico
- V-091 Jesús Iván Salazar Barrientos**
The "on-water" effect revisited: a new theoretical protocol.
- V-092 Saúl Juan Carlos Salazar Samaniego**
Estudio de las medidas informacionales de Shannon en la densidad de pares y su comportamiento dependiente de N en sistemas moleculares diatómicos.
- V-093 Martín Salazar Villanueva**
Predicción de tres nuevos alótropos del fullereno C_{60} : un estudio PSO+DFT
- V-094 Yair Asis Salgado Millan**
Evaluación del potencial farmacológico del translocón SecYEG a través de modelado estructural y acoplamiento molecular
- V-095 Jonatan Sandoval Valdez**
Estudio computacional de la relación estructura-reactividad y propiedades fotofísicas en compuestos de boro derivados de bases de Schiff con aminoácidos
- V-096 Mary Carmen Saucedo Pérez**
Evaluación in silico del potencial terapéutico de la naringenina como compuesto funcional en enfermedades desmielinizantes.
- V-097 Halis Yeniz Seuret Hernández**
Influencia de la alta presión en la estructura y propiedades electrónicas de cúmulos de metales nobles: un análisis basado en DFT
- V-098 Emmanuel Soberanis-cáceres**
Reconstrucción de perfiles de energía en cálculos cinéticos mediante interpolación de splines tensionados con muestreo reducido de puntos sobre el camino de reacción
- V-099 Paola Solano Escobar**
Generación de modelo QSAR para la identificación de inhibidores de FtsZ de *Staphylococcus aureus* resistente a meticilina
- V-100 Thayli Aidee Sosa Pastrana**
Diseño in silico de inhibidores de la cruzipaina en T. cruzi: optimización de derivados de eugenol
- V-101 Carlos Fernando Soto Ronces**
Estudio mediante DFT del mecanismo químico de amplificación SERS de tiopirano y piridina adsorbidos sobre los cúmulos Mo@Au_{12} y W@Au_{12} .
- V-102 María Patricia Sánchez Gutiérrez**
Análisis de las propiedades ópticas de la cafeína: comparación experimental y teórica de espectros de absorción y emisión.
- V-103 Carlos Tepech Carrillo**
Diseño de un nano-sistema a partir del fullereno C_{60} para la liberación controlada de cianamida: un estudio in-silico
- V-104 Angel Alejandro Tera Rivera**
Distribuciones de vecindades en moléculas orgánicas.
- V-105 Alan Joshemar Tirado Lizárraga**
Estudio teórico de complejos heterolépticos de Cu(II) como sensibilizadores para celdas solares DSSC

V-106

Teresa Torres-blancas

High-Performance Reversible Hydrogen Storage in Palladium-Decorated Zeolite- Templated Activated Carbon: Synergistic Defect Anchoring and Kubas-Type Interactions

V-107

Humberto Tovar Salazar

Predicción de coeficientes de escalamiento de espín adaptativos para SCS-MP2 mediante redes neuronales artificiales

V-108

Anthuar Jesús Trellez Mayen

Almacenamiento de pesticidas en especies macrocíclicas formadas a través de la aproximación del metaloligante: Un estudio teórico

V-109

Fernando Jesus Tun Rosado

BiasMOR: Una base de datos para el modelado predictivo de agonistas sesgado del receptor opioide mu

V-110

Joana Siriamrit Turrent Cortés

Determinación de la relación estructura actividad de compuestos orgánicos mediante algoritmos de aprendizaje de máquina.

V-111

Hiram Vargas

Estudio teórico del almacenamiento de colorantes en macrociclos diseñados por reacciones de doble etapa

V-112

Said Martin Vega Chávez

Modelación de los efectos cooperativos de las interacciones moleculares empleando metodología ELF-IQA

V-113

Martha Velueta Viveros

Estudio computacional del acoplamiento entre el β -amiloide 1-42 y la enzima degradadora de insulina

V-114

Mario Antonio Vera Guzmán

Análisis comparativo de funcionales de la densidad en el cálculo de la cinética de reacciones SET entre quinonas y oxígeno

V-115

Andrea Vera Nuñez

Estudio computacional de la relación estructura-reactividad en análogos del ligando sigma-1 RC-33 mediante DFT

V-116

Valeria Vera Sanchez

Estudio de dinámica molecular de emulsiones de surfactantes orgánicos en gotas de aceite inmersas en agua.

V-117

María Vicky Corona-gonzález

Síntesis, caracterización y análisis DFT de un nuevo heterociclo: Fosfino-di(o- tolilmetilen)tetrametil-disilano.

V-118

María Vicky Corona-gonzález

Estudio del mecanismo de acción de derivados de fenazinas hacia la enzima QR2 por acoplamiento molecular.

V-119

Gabriela Yasmin Vidales Ayala

ELAYA: Plataforma web para generación de geometrías moleculares 3D a partir de SMILES y búsqueda de sus conformeros mediante potenciales ANI

V-120

Mario Villada Balbuena

Propiedades termodinámicas de cadenas de ARN usando potenciales efectivos

V-121

José Daniel Villanueva Hernández

ARCO: From infrared spectra to molecular structure

V-122

Zaire Viviana Viveros Rodríguez

ZAI - Agente inteligente para química computacional

V-123

Elizabeth Vázquez Rivas

Estudio DFT del almacenamiento de hidrógeno en ZTCs modificados químicamente y con decoración metálica

V-124

Zuriel Yahir Yescas Ramos

Aceleración de la convergencia SCF mediante aprendizaje equivariante de matrices de densidad y refinamiento analítico

V-125

Maximiliano Yáñez

A String Representation for Rectangular Layered Materials

V-126

Yaffet Zambrano González

Construcción de distribuciones de medida y su uso en el entrenamiento de modelos de Aprendizaje Automático.

V-127

Irineo-pedro Zaragoza

Elucidation holes formation when substituting Zn by Al analyzing energetic and properties in Al-ZnO.

V-128

Irineo Pedro Zaragoza Rivera

Elucidation holes formation when substituting Zn by Al analyzing energetic and properties in Al- ZnO.

V-129

José Antonio Zárate Colín

Análisis de la relación entre la entropía de la información y la energía por electrón para los alcanos C_nH_{2n+2} ($n=1...11$) y sus isómeros utilizando cálculos de DFT.

V-130

Eduardo Zúñiga Rivera

Transferencia de carga de varios fragmentos en complejos no covalentes

V-131

Pablo Daniel Álvarez Hernández

CADMI: del cálculo al catalizador, un flujo reproducible de descriptores de reactividad