



JUEVES

29 de octubre de 2026

MODERA

Mesías Orozco Ic

09:00

09:30

Inauguración de la XXIV RMFQT

09:30

10:00

Raúl Alejandro Fajardo Muñoz

Criterios de transferencia de protones en la teoría multicomponente variacional del funcional de la densidad auxiliar

10:00

10:30

María Estefanía Villarroel Medina

Naturaleza fundamental del enlace en la reacción de Soai: un análisis integral a través de SAPT, IQA y ELF

10:30

10:45

COFFEE BREAK

MODERA

Luz María Rodríguez Valdez

10:45

11:35

PLENARIA + RECONOCIMIENTO

Annia Galano Jiménez

MODERA

Cercis Morera Boado

11:35

12:05

Maria Rossano-Tapia

Predicción de la reactividad de moléculas orgánicas

12:05

12:35

Guillermo Caballero-García

El efecto del halógeno en adiciones diastereoselectivas de reactivos de Grignard y su aplicación en la síntesis de nucleósidos C4'-modificados

12:35

13:05

Manuel de Jesús Solís Hernández

Identificación in silico de neolignanos naturales como potenciales inhibidores de CDK1 y CDK2

13:05

15:15

COMIDA

MODERA

Joaquín Barroso Flores

15:15

15:45

Samanta Vargas Torres

Reparación del daño oxidativo en 2'-deoxiguanosina y fragmentos proteicos por ropinirol y análogos diseñados

15:45

16:15

Yamil Hernández Urquieta

SolvateltV3: un programa para generar la primera capa de solvatación

16:15

16:45

Alan Israel Quintal Flores

Eyringpy: una plataforma integrada para el cálculo de constantes de velocidad y análisis cinético computacional

16:45

17:00

COFFEE BREAK

17:00

19:00

SESIÓN DE PÓSTERES

Pasillos del Foro Cultural

VIERNES

30 de octubre de 2026

MODERA

Salomón Alas Guardado

09:00

09:30

Hazel Uriel Vázquez Hernández

Precisión y limitaciones de un esquema basado en fragmentos para el cálculo de energías de red de cristales moleculares

09:30

10:00

Javier Flores Méndez

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

10:00

10:30

Samanta Euan García

Estudio de la estructura electrónica y el magnetismo en la copa de Clar con impurezas sustitucionales en anillos y átomos

10:30

10:45

COFFEE BREAK

MODERA

Erwin García Hernández

10:45

11:35

PLENARIA

Martin Head-Gordon

Conferencia plenaria - 50 minutos

MODERA

Erwin García Hernández

11:35

12:05

Jesus Luis Alberto Ponce-Ruiz

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

12:05

12:35

Emir Alejandro Galván García

Predicción de pKa: integración de Machine Learning y topología de la densidad electrónica QTAIM

12:35

13:05

Lucía Juana Peña Ortiz

Desarrollo y validación de un campo de fuerzas efectivo para el estudio del plegamiento proteico mediado por chaperoninas

13:05

15:15

COMIDA

MODERA

Julián Cruz Borbolla

15:15

15:45

Jose Aminadat Morato Marquez

Mecanismos de reacción para la obtención de H₂ a partir de H₂S en nanopartículas de Cu_n dopadas con Pd

15:45

16:15

Said Jalife

Aplicaciones del concepto de antiaromaticidad para el diseño de moléculas orgánicas π -conjugadas funcionales

16:15

16:45

Eugenia Violeta Dzib Reyes

Diseño computacional de derivados multifuncionales de tacrina como candidatos para el tratamiento de las enfermedades de Alzheimer y Parkinson

16:45

17:00

COFFEE BREAK

17:00

19:00

SESIÓN DE PÓSTERES

Pasillos del Foro Cultural

SÁBADO

31 de octubre de 2026

MODERA

Francisco Javier Meléndez Bustamante

09:00

09:30

Sonia García González

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

09:30

10:00

Mesías Orozco-Ic

Transporte electrónico en moléculas y su relación con la (anti)aromaticidad

10:00

10:30

Juan de Dios Guzmán Hernández

Electronic structure and aromaticity of boroxines: Evidence from experimental charge density

10:30

10:45

COFFEE BREAK

MODERA

Alan Israel Quintal Flores

10:45

11:35

PLENARIA + RECONOCIMIENTO

Gabriel Merino

MODERA

Rodolfo Gómez Balderas

11:35

12:05

Carlos Alberto Salvador Jiménez Rosas

Relativity & Electronic Correlation: The impacts on an atom in a molecule

12:05

12:35

Alvaro Vazquez

Graph neural network and density functional theory approaches for predicting redox potential of Iron(II)/(III) complexes

12:35

13:05

Diego Andrey Caballero Castillo

Integración numérica sobre las cuencas de la matriz de densidad reducida de orden uno aplicada a interacciones no covalentes

13:05

13:35

Raúl Amaury Quintero Monsebaiz

Periodic boundary constraints in Natural Orbital Functional Theory

13:35

14:05

Carolina Estephania Castro Segura

El efecto de la solvatación explícita en el mecanismo de sustitución nucleofílica unimolecular

14:05

14:35

Entrega de premios, anuncios y clausura

14:35

REGRESO A SUS LUGARES DE ORIGEN