PROGRAMA ACADÉMICO

XXIV Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica

Foro Cultural Alejandro Gomory Aguilar · Universidad Anáhuac Mayab

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
CONFERENCIA 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 – 14:45
COMIDA

MODERA Joaquín Barroso Flores

14:45 – 15:15
Manuel Almaraz
HPC de escritorio y almacenamiento de alto rendimiento en NVMe

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
SolvateItV3: 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 Edificio Tecnia

PROGRAMA ACADÉMICO

XXIV Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica

Foro Cultural Alejandro Gomory Aguilar · Universidad Anáhuac Mayab

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
CONFERENCIA PLENARIA
Martin Head-Gordon

MODERA Erwin García Hernández

11:35 – 12:05
Omar Hernández Montes
Enantiospecific electron transport in chiral polyaniline thin films

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
Lucia 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 H_2 a partir de H_2S 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 Edificio Tecnia

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
CONFERENCIA 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
Jessica Arcudia
Ferroelectricidad por deslizamiento codificada en las secuencias de apilamiento del grafeno

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