XXIV REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Sesiones de Carteles

29–31 OCTUBRE 2026
UNIVERSIDAD ANÁHUAC MAYAB
MÉRIDA, YUCATÁN

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 Tecnia
Medidas del cartel: 90 × 120 cm (vertical)

JUEVES 29 DE OCTUBRE

131 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-hidroximetilcitosina 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-004 **Aime Lorena Acosta Soto**
Estudio de primeros principios de las propiedades electrónicas y ópticas del SiC para aplicaciones en conversión de energía solar

J-005 **Gloria María Acosta Tejada**
Estudio teórico-experimental de derivados de escuaraínas para su aplicación en baterías de flujo redox

J-006 **Salomón de Jesús Alas Guardado**
Estudio de la estabilidad térmica de la histona (rHMfB)2 por dinámica molecular

J-007 **Daniela Alatriste Cortés**
Estudio DFT de materiales híbridos fullereno-borofeno para su posible aplicación en el almacenamiento de hidrógeno.

J-008 **Jesus Luis Alberto Ponce-ruiz**
Lithium-Ion Diffusion in $LiCoPO_4$ Cathode Material: An Ab Initio Molecular Dynamics Study Based on Mean Square Displacement

J-009 **Gabriela Alcántara Barrios**
Caracterización electrónica de la microsolvatación de fármacos antiinflamatorios en agua y mezcla etanol-agua

J-010 **León Alday-toledo**
Modelos generativos genéticos con representaciones moleculares de texto

J-011 **León Alday-toledo**
Una estructuración del espacio químico: Clusterización de moléculas orgánicas pequeñas mediante transformadores y lenguaje natural en el espacio de Mahalanobis

J-012 **Alexis Eduardo Alonso Ruiz**
Implementación del esquema GIAO en el Hamiltoniano de ZORA en código deMon2k

J-013 **Daniela Alvarado González**
Implementación de modelos interpolados de la Teoría Variacional del Estado de Transición (IVTST) en Eyringpy

J-014 **James Anderson**
Electron Correlation and Scalar Relativity in QTAIM

J-015 **Nathaly Aparicio**
Especiación de aminoácidos y péptidos relacionados con el Síndrome de Rett.

J-016 **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-017 **Maria 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-018 **Adan Barbosa Jiménez**
Métodos modificados de Newton-Cotes para resolver la integral de Boys

J-019 **Bianca Priscila Barrera Lara**
Tratamiento Algebraico de la Anarmonicidad en Moléculas Diatómicas mediante la Transformada de Bogoliubov

J-020 **María Fernanda Barrientos Carrasco**
Estudio computacional de nanotubos de carbono como transportadores de fármacos contra Alzheimer

J-021 **Jorge Barroso Moreno**
Design of Deep Eutectic Solvents Guided by Surface Polarity and Molecular Dynamics

J-022 **Alejandro Bautista**
Búsqueda de alótropos y polimorfos mediante algoritmos evolucionarios y potenciales MatterSim

J-023 **Valeria Bautista Santamaría**
ESTUDIO COMPUTACIONAL DEL DESPLEGAMIENTO TÉRMICO DE PROTEÍNAS

J-024 **Julio Cesar Beltran Sanchez**
Estudio teórico de la formación de materiales con cavidades formados a partir de estructuras ciclooligomericas de diorganoestaño (IV)

J-025 **Luisa Paulina Beltrán Jakes**
Influencia de la glucosilación sobre las propiedades electrónicas y la reactividad química de flavonoides de Bursera: un estudio DFT

J-026 **Andrea Beléndez López**
Estudio computacional: adsorción de levodopa sobre los sistemas nanoestructurados C24 y B12N12

J-027 **Federico Benito Villanueva**
Metodología Computacional para la Determinación de Parámetros Inerciales en Moléculas Fluorescentes Mediante Métodos DFT y TD-DFT

J-028 **Luz Alejandra Bernal Guzman**
Desplazamientos químicos en resonancia magnética nuclear de protón mediante la teoría de perturbación de la densidad auxiliar multicomponente

J-029 **Roberto Bernal Jaquez**
El uso de los Autocodificadores en la estructuración del espacio químico

J-030 **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-031 **Iván Alejandro Bonfil Rivera**
Caracterización de cianuros e isocianuros metálicos: Desempeño de funcionales de orbitales naturales

J-032 **Noé Brigido Salvador**
Efecto del dopaje del fullereno $B_{12}N_{12}$ con Al, Ga e In en la adsorción de 17α- metiltestosterona: un estudio DFT

J-033 **Fernando Valentin Bucio Gomora**
Diseño racional de fármacos multifuncionales derivados de Ketamina como candidatos para el tratamiento del Síndrome de Rett

J-034 **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-035 **Diego Andrey Caballero Castillo**
Un Análisis de la Energía Cinética desde la Matriz de Densidad Reducida de Orden Uno

J-036 **Alfonso Cabello Arriola**
Evaluación y estudio in silico de la actividad bactericida de un heteroesteroide en Staphylococcus aureus ATCC 25923

J-037 **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-038 **Diana Lucia Campa Guevara**
ESTUDIO TEÓRICO DEL USO DE LÍQUIDOS IÓNICOS DERIVADOS DE IMIDAZOL FUNCIONALIZADOS CON AMINOÁCIDOS PARA CAPTURA DE CO2

J-039 **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 cruzipaína: Estructura Electrónica, Acoplamiento Molecular y Dinámica Molecular

J-040 **B. Carolina Morales-garcía**
Evaluación in silico del 2-(2'-hidroxifenil) benzoxazol y tres de sus derivados como candidatos terapéuticos de enfermedades neurodegenerativas

J-041 **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-042 **Mirzam Andrea Carreón González**
El superóxido como antioxidante endógeno selectivo vía SET.

J-043 **Shanti Kinari Castillo Avila**
ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LA CAPACIDAD ANTIOXIDANTE DE FÁRMACOS NEUROPROTECTORES A PARTIR DE LA HERRAMIENTA eH- DAMA

J-044 **Gabriela del Rosario Castillo Toraya**
Exploring the Chemical Space of Planar Tetracoordinate Nitrogen Compounds

J-045 **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-046 **María Eugenia Castro Sánchez**
Estudio teórico de complejos mixtos de cobre (II) con tirosina

J-047 **Carlos Eduardo Cazares Salgado**
Descripción de las interacciones entre complejos pentaleno del grupo 1 y gases contaminantes

J-048 **Juan Erick Cerpa Calixto**
Elucidando la estructura de los sistemas HNgBF+ (Ng = He – Rn)

J-049 **Carlos Humberto Cervantes Trujillo**
Estudio teórico (DFT) de derivados sustituidos de 2-mercaptobenzimidazol: Descriptores de reactividad, QTAIM y potencial quelante/inhibidor de corrosión

J-050 **Joaquin Chapa Rodriguez**
Caracterización teórica de complejos de vanadio 1:3, 1:4, 1:6 con potencial anticancerígeno y antidiabético

J-051 **Paula Jazmín Chávez Franco**
Reactividad electrónica y energías de adsorción en sistemas fármaco–carbon dot quiral

J-052 **Luis Cobos**
Propuesta Mecanística para la Síntesis de 5-ALA a partir del Metil Levulinato

J-053 **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-054 **Avelino Cortés Santiago**
Análisis teórico de la estructura electrónica de un zwitterión cíclico derivado de una piridin-2-ona.

J-055 **Vanessa Guadalupe Cota Durán**
Propiedades electrónicas y reactividad química de alquilamidas bioactivas de Acmella oleracea mediante DFT

J-056 **Julián Cruz Borbolla**
STACKING ENSEMBLE LEARNING PARA LA PREDICCIÓN DE LA TOXICIDAD EN DERIVADOS DE FENOLES MEDIANTE DESCRIPTORES cDFT Y QTAIM

J-057 **Jazmin Delgado Avilez**
Estudio de las vacancias en materiales de carbono y su efecto en la inactivación de la respuesta electroquímica

J-058 **Esteban Delgado Curiel**
Estudio teórico-experimental de absorción y fluorescencia de soluciones de 3- hidroxiflavona.

J-059 **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-060 **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-061 **Diana Díaz Ocampo**
Exploración de mecanismos de permeación en materiales 2D: Un estudio del circumcoroneno mediante Automekin

J-062 **René Gerardo Escobedo González**
Estudio teorico de la complejación de la beta-Ciclodextrina con la perezona

J-063 **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-064 **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-065 **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-066 **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-067 **Luis Fernando Garcia**
Estructura electrónica y magnetismo de cadenas lineales basadas en triangulenos fusionados

J-068 **Luis Fernando Garcia**
ENLACE QUÍMICO Y CORRELACIÓN ELECTRÓNICA EN SISTEMAS DE BAJA DIMENSIONALIDAD: UN ESTUDIO DFT+U+V

J-069 **Anaid Flores**
Evaluación de descriptores de reactividad química en α-aminofosfonatos y su correlación con actividades biológicas

J-070 **Nelson Flores Gallegos**
Algunas aplicaciones de las divergencias informacionales en Química y Biología evolutiva.

J-071 **Rafael Flores Larrañaga**
Paisajes conformacionales de baja energía en C2H6S2: implicaciones para la espectroscopia rotacional y la astroquímica interestelar.

J-072 **Martha Magdalena Flores Leonar**
Estudio del comportamiento electroquímico en derivados de bencidinas: efectos electrónicos y estéricos

J-073 **Raul Rodolfo Flores Mena**
Predicción de estructuras cristalinas de semiconductores orgánicos mediante machine learning y optimización global

J-074 **Javier Flores Méndez**
Effective electromagnetic properties of 1D photonic crystals with chiral and magnetic inclusions

J-075 **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-076 **Ana Cristina Flores Simon**
Efecto de la pasivación y funcionalización sobre las propiedades electrónicas y mecánicas de nanoalambres de silicio

J-077 **Lizeth Franco Nolasco**
Solucionador Cuántico Variacional de Eigenvalores con Funcionales de Orbitales Naturales

J-078 **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-079 **Susana Gaggero de la Rosa**
Influencia de la compresión isotrópica en la espectroscopía SERS del sistema Py–Au_{20}: un estudio DFT.

J-080 **Antonio Gamboa Suárez**
Influencia de la anisotropía del potencial en la solvatación de nanogotas de helio a temperaturas ultrafrías.

J-081 **Andres Garay**
Estudio teorico de aleaciones magneticas 2D

J-082 **Jimena Garcia**
Base de datos espectral de hidrocarburos aromáticos policíclicos mediante TDDFT: una herramienta teórica para el análisis de las Bandas Interestelares Difusas.

J-083 **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-084 **Angel Alejandro Garcia Chung**
IA interpretable para la síntesis de hidrocarburos

J-085 **Gabriel Eduardo Garcia Laiton**
Adsorción saturada y coadsorción de NO sobre fullerenos de nitruro de boro dopados con carbono ($B_{12}N_{12}$ C)

J-086 **Sebastian Garcia Pineda**
Comparación de métodos teóricos para la estimación de entalpías de sublimación en compuestos orgánicos

J-087 **Dolores Garcia Toral**
Interacciones de apilamiento en bases purínicas: Un enfoque DFT-D3

J-088 **Isidoro Garcia-cruz**
Estudio DFT de complejos diméricos e interacciones no covalentes en modelos de lignina Organosolv y Kraft

J-089 **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-090 **Aileen Montserrat García Cano**
Desarrollo de un algoritmo genético basado en selección no supervisada para la optimización global de cúmulos atómicos

J-091 **Danna García de los Santos**
Generación de estados desplegados de proteínas mediante variaciones de temperatura: Un enfoque computacional

J-092 **Sonia García González**
Diseño computacional de derivados de Tirosina, como candidatos para el tratamiento del síndrome de Rett

J-093 **Ninette Celeste García Martínez**
A Protocol to Determine 19F NMR Chemical Shifts for Tryptophan Metabolites

J-094 **Marco Antonio García Revilla**
Fuerza Donador-Aceptor mediante la partición en R3 de la 1-TDM

J-095 **Nahomi Garrido Cantor**
Descripción de la estructura molecular de isómeros C6H6 mediante índices derivados de la matriz Laplaciana en teoría de grafos.

J-096 **Aura Ximena Gomez Heredia**
Constantes de velocidad dependientes de la presión y temperatura k(T,P) mediante RRKM en Eyringpy

J-097 **Abdi Gonzalez Benitez**
Acoplamiento molecular de moduladores del receptor LXR (LXRα/LXRβ): identificando sitios clave de unión con enfoque en MALSD

J-098 **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-099 **Luis Diego González Garrido**
Influencia de la naturaleza tautomérica en las propiedades ácido-base de las bases nitrogenadas.

J-100 **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-101 **Anuar González Zamudio**
Aproximación al funcional de energía cinética mediante redes neuronales de Kolmogorov-Arnold

J-102 **Antonio de Jesus Guillermo Jiménez**
Análisis teórico de efectos cooperativos en interacciones π–π de agregados de fenantrenos 3,6-disustituidos mediante DFT

J-103 **José Gustavo Ávila**
Síntesis de Derivados de Lawsona y Evaluación In Silico de su posible actividad contra SARS-CoV 2.

J-104 **Jafet Gutierrez**
Structural and magnetic transformation of FeRh nanoparticles upon deposition on BaTiO3

J-105 **Boris Daniel Gutiérrez Cortés**
Análisis del error en la matriz dinámica para el cálculo de fonones en cristales orgánicos usando cálculos ab initio

J-106 **Jorge Gutiérrez Flores**
Afinidad proteína–ligando desde la densidad electrónica: identificación de contribuciones cooperativas y anticooperativas a nivel de residuo

J-107 **Eduardo Gabriel Guzmán López**
Potenciales centrados en átomos para la estimación de constantes de acidez con métodos DFT de bajo costo.

J-108 **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 isatóico

J-109 **Diana Heredia**
Density Functional and Wave Function-Based Quantum Chemical Calculations on Transition Metal Complexes with Redox-Active Ligands

J-110 **Luis Eduardo Hernandez Dominguez**
Obtención de un andamio molecular para el diseño de nuevos antihistamínicos

J-111 **Ana Eugenia Hernandez Hernandez**
Análisis conformacional y lipofilicidad de Glifozinas

J-112 **Brayan Hernandez Nopaltecatl**
ESTUDIO TEÓRICO DE LA REACCIÓN REDUCTIVA DE LA ENZIMA NAD(P)H QUINONA OXIDORREDUCTASA I

J-113 **Luis Felipe Hernández Ayala**
Mapeo de la polifarmacología de trofinetida en el síndrome de Rett: Un análisis computacional multietapa.

J-114 **Galia Hernández Bravo**
EFECTO DEL DOPAJE SUSTITUCIONAL EN LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y ELECTRÓNICAS DEL BOROFENO

J-115 **Gerardo Hernández Juárez**
Evolución estructural en cúmulos de BnHn+xq- (n = 5 - 12, x = 0, 2 and 4, q = 0, 2)

J-116 **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-117 **Gabriel Isidro Velasco**
Estudio computacional de las propiedades químicas de nuevos compuestos tetra-orto- azobencenos

J-118 **Aldo J. Mortera-carbonell**
Densidades de energía en el espacio real: dos herramientas emergentes para explorar la naturaleza del enlace químico

J-119 **Aldo J. Mortera-carbonell**
Estudio teórico de la estructura electrónica y propiedades de alótropos de nitrógeno para materiales de alta densidad energética.

J-120 **Alonso Daniel Jacobo Hernández**
Caracterización teórica de estados moleculares de Rydberg mediante integración numérica multicéntrica.

J-121 **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-122 **Francisco José Palacios-can**
Synthesis, crystal and DFT structure analysis of a conformationally locked stannylphosphine

J-123 **Mari Toña Juárez Méndez**
Concordancia entre plataformas open-source para la predicción de propiedades ADMET de antivirales contra influenza

J-124 **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-125 **Miguel Osvaldo Juárez Tecua**
Estudio teórico de la energía de adsorción de calix[4]arenos funcionalizados con agroquímicos y sus metabolitos.

J-126 **Humberto Laguna Galindo**
Wehrl Entropy and Husimi Mutual Information under Dephasing in Harmonic- Oscillator Superposition States

J-127 **Beatriz Lagunas Simón**
Evaluación teórica de la estructura y propiedades electrónicas de copolímeros organometálicos conjugados de Pt(II) con potencial biomédico

J-128 **Juan Iván Gómez Peralta**
Extending characterization capabilities of powder diffraction with artificial intelligence

J-129 **Diego Álvarez Michel**
Efecto del agua en la región interfacial de una mezcla PA12-sílice mediante dinámica molecular

J-130 **J. R. Mis-Maya**
Estudio computacional de los efectos de solvatación sobre el espectro UV-Vis del paracetamol en disolución acuosa

J-131 **Wilber Hernández Montiel**
Análisis bioinformático de la diversidad genética en burros (Equus asinus) de Oaxaca mediante marcadores SNP

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 $^{13}CO_2$ y $^{16}O^{13}C^{18}O$

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 ThSiO4 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 Rodriguez**
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 cheiloclinas 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**
$Zn_2[MIV(CN)_8]$ 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 ($^3CH_2$) Y EL CICLOPROPENILIDENO (c-C_3H_2) EN EL MEDIO INTERESTELAR

V-027 **Aldo Josue Montejo Aceves**
Absorción de CO2 sobre nanopartículas de Cun dopadas con Ti y Zr. (n=3-14)

V-028 **Fernado Montejo Alvaro**
NiPd Alloy clusters deposited on graphene and their reactivity toward H2 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-galactopiranosa 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-036 **Christopher Muñoz Rodríguez**
Cálculos de excitaciones en sistemas con interacciones coulómbicas y no coulómbicas.

V-037 **Betsie Carolina Muñoz Sanchez**
Estudio teórico de las propiedades estructurales, electrónicas y espectroscópicas de MgNC y MgCN en el medio interestelar.

V-038 **Misaela Márquez**
ESTUDIO TEÓRICO DE LAS REACCIONES TROPOSFÉRICAS DE LOS ACLANOS C1-C5 CON RADICALES ÓXIDO DE HALÓGENO.

V-039 **Erika Navarrete Medel**
Estudio sistemático de la caracterízación de las interacciones no covalentes en materiales porosos unidos por interacciones intermoleculares: validación DFT y análisis QTAIM

V-040 **Andrea Lissette Navarrete Mosquera**
ESTUDIO COMPARATIVO DFT/DFTB DE UN DERIVADO DE IMIDAZOL COMO INHIBIDOR DE CORROSIÓN DEL HIERRO

V-041 **Lisset Noriega de los Santos**
Estabilidad termodinámica y reactividad de los dioles geminales en la familia CnH(2n+2)O2 (n=1-10)

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-043 **Marlon Saul Ojeda Percastegui**
Implementación computacional del algoritmo NEB para la búsqueda de estados de transición utilizando ADFT

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-045 **Victor Yahir Orosco Hernández**
Control de la selectividad en reacciones pericíclicas mediante interacciones no covalentes

V-046 **Rogelio Uriel Ortega Torres**
Modelando la adsorción de colorantes con MOFs: Una propuesta didáctica empleando Machine Learning

V-047 **Santiago Ortiz Milán**
Estudio de modelado molecular sobre la estabilidad de enzimas mutantes implicadas en la esclerosis lateral amiotrófica

V-048 **Diego Padilla Francisco**
Estudio Teórico de los isómeros de la glicina: Aniones en el ISM

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-050 **Luz María Palomino Asencio**
Propiedades adsorbentes del bifenileno prístino para la captura de contaminantes farmacéuticos: un estudio DFT

V-051 **Maurizio Alejandro Pantoja Hernández**
Evolución estructural y propiedades electrónicas de cúmulos de boro dopados con berilio

V-052 **Alam Gabriel Paredes Zavala**
Estudio computacional de la adsorción del ácido arsenioso sobre oligómeros de PET en medio acuoso

V-053 **Israel Omar Perez Lopez**
LiCo1-x-yFexCryPO4 CATHODE: PERFORMANCE AND PHYSICAL PROPERTIES FROM FIRST PRINCIPLES

V-054 **Sheila María Peña González**
Estudio teórico de la fotoisomerización del 11-cis-retinal a all-trans.

V-055 **José Antonio Piceno Martínez**
Análisis conformacional y energético de fragmentos de ADN que contienen 8- oxoguanina

V-056 **Ana Cecilia Piñón Reyes**
Modelado computacional de la interacción CO, CO_2 y NO_2 en nanografenos funcionalizados con ZnO.

V-057 **Leon Daniel Ponce Perez**
Caracterización de la fotoconversión de interruptores moleculares bajo restricción espacial

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-059 **Luis Ricardo Pérez Esquivel**
Determinación de la covalencia orbital diferencial (DOC) en sistemas multimetálicos de hierro

V-060 **Adriana Pérez-gonzález**
Elucidación teórica de los mecanismos del daño oxidativo por 5-fluorouracilo a biomoléculas.

V-061 **César Quej Solís**
Adsorción y liberación asistida por protonación de tamoxifeno sobre grafino: estudio DFT y dinámica molecular

V-062 **Bruno Quintero Santiago**
Mecanismo computacional de deshidrogenación y disociación de metanol en cúmulos bimetálicos de Pd y Cu.

V-063 **Fatima Ramos**
Adsorción de Tiofeno sobre nanopartículas de Cun dopadas con Zn. (n=2-10)

V-064 **Carlos Manuel Ramos Castillo**
Self-Consistent Hubbard U in Ni layered hydroxide for Oxygen Evolution Reaction

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-066 **Cinthia Ramírez Martínez**
Análisis de interacciones no covalentes en polimorfos de hielo: un estudio con funcionales semilocales y no locales

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-068 **Emanuel Adolfo Ramírez Paredes**
Parametrización DFTB de boro enfocada a polimorfos de borofeno.

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-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 Hidroperoxilo

V-074 **Xquenda Guadalupe Rios 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 Rodriguez Hueso**
Cálculo de constantes de acoplamiento y magnetizibilidad 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 cinética– termodinámica 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 AReO4 (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 Garcia**
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 Fullereno prístino (C60) y sistema TiO2–C60 para adsorber hidroxiurea, 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 **Martin Salazar Villanueva**
Predicción de tres nuevos alótropos del fullereno C60: 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 Yenis 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 **Paola Solano Escobar**
Generación de modelo QSAR para la identificación de inhibidores de FtsZ de Staphylococcus aureus resistente a meticilina

V-099 **Thayli Aidee Sosa Pastrana**
Diseño in silico de inhibidores de la cruzipaína en T. cruzi: optimización de derivados de eugenol

V-100 **Carlos Fernando Soto Ronces**
Estudio mediante DFT del mecanismo químico de amplificación SERS de tiopirano y piridina adsorbidos sobre los cúmulos Mo@Au12 y W@Au12.

V-101 **María Patricia Sánchez Gutiérrez**
Análisis de las propiedades ópticas de la cafeína: comparación experimental y teórica de espectros de absorción y emisión.

V-102 **Carlos Tepech Carrillo**
Diseño de un nano-sistema a partir del fullereno C60 para la liberación controlada de cianamida: un estudio in-silico

V-103 **Angel Alejandro Tera Rivera**
Distribuciones de vecindades en moléculas orgánicas.

V-104 **Alan Joshemar Tirado Lizárraga**
Estudio teórico de complejos heterolépticos de Cu(I) como sensibilizadores para celdas solares DSSC

V-105 **Teresa Torres-blancas**
High-Performance Reversible Hydrogen Storage in Palladium-Decorated Zeolite- Templated Activated Carbon: Synergistic Defect Anchoring and Kubas-Type Interactions

V-106 **Humberto Tovar Salazar**
Predicción de coeficientes de escalamiento de espín adaptativos para SCS-MP2 mediante redes neuronales artificiales

V-107 **Anthuar Jesús Trellez Mayen**
Almacenamiento de pesticidas en especies macrocíclicas formadas a través de la aproximación del metaloligante: Un estudio teórico

V-108 **Fernando Jesus Tun Rosado**
BiasMOR: Una base de datos para el modelado predictivo de agonistas sesgado del receptor opioide mu

V-109 **Joana Siriamrit Turrent Cortés**
Determinación de la relación estructura actividad de compuestos orgánicos mediante algoritmos de aprendizaje de máquina.

V-110 **Hiram Vargas**
Estudio teórico del almacenamiento de colorantes en macrociclos diseñados por reacciones de doble etapa

V-111 **Said Martin Vega Chávez**
Modelación de los efectos cooperativos de las interacciones moleculares empleando metodología ELF-IQA

V-112 **Martha Velueta Viveros**
Estudio computacional del acoplamiento entre el β-amiloide 1-42 y la enzima degradadora de insulina

V-113 **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-114 **Andrea Vera Nuñez**
Estudio computacional de la relación estructura–reactividad en análogos del ligando sigma-1 RC-33 mediante DFT

V-115 **Valeria Vera Sanchez**
Estudio de dinámica molecular de emulsiones de surfactantes orgánicos en gotas de aceite inmersas en agua.

V-116 **María Vicky Corona-gonzález**
Síntesis, caracterización y análisis DFT de un nuevo heterociclo: Fosfino-di(o- tolilmetilen)tetrametil-disilano.

V-117 **María Vicky Corona-gonzález**
Estudio del mecanismo de acción de derivados de fenazinas hacia la enzima QR2 por acoplamiento molecular.

V-118 **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-119 **Mario Villada Balbuena**
Propiedades termodinámicas de cadenas de ARN usando potenciales efectivos

V-120 **José Daniel Villanueva Hernández**
ARCO: From infrared spectra to molecular structure

V-121 **Zaire Viviana Viveros Rodríguez**
ZAI - Agente inteligente para química computacional

V-122 **Elizabeth Vázquez Rivas**
Estudio DFT del almacenamiento de hidrógeno en ZTCs modificados químicamente y con decoración metálica

V-123 **Zuriel Yahir Yescas Ramos**
Aceleración de la convergencia SCF mediante aprendizaje equivariante de matrices de densidad y refinamiento analítico

V-124 **Maximiliano Yáñez**
A String Representation for Rectangular Layered Materials

V-125 **Yaffet Zambrano González**
Construcción de distribuciones de medida y su uso en el entrenamiento de modelos de Aprendizaje Automático.

V-126 **Irineo-pedro Zaragoza**
Elucidation holes formation when substituting Zn by Al analizing energetic and properties in Al-ZnO.

V-127 **Irineo Pedro Zaragoza Rivera**
Elucidation holes formation when substituting Zn by Al analizing energetic and properties in Al- ZnO.

V-128 **José Antonio Zárate Colín**
Análisis de la relación entre la entropía de la información y la energía por electrón para los alcanos CnH2n+2 (n=1...11) y sus isómeros utilizando cálculos de DFT.

V-129 **Eduardo Zúñiga Rivera**
Transferencia de carga de varios fragmentos en complejos no covalentes

V-130 **Pablo Daniel Álvarez Hernández**
CADMIA: del cálculo al catalizador, un flujo reproducible de descriptores de reactividad

V-131 **Pablo Carpio Martínez**
Dinámica del Transporte Cuántico de Calor en Sistemas Abiertos Mediante Aprendizaje Automático