

Día 1 (Jueves)

Clave	Ponente	Título del trabajo
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	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 escuarainas 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 Alatraste Cortés	Estudio DFT de materiales híbridos fullerenos-borofenos para su posible aplicación en el almacenamiento de hidrógeno.
J-009	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-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-018	Jessica Arcudia	Determining Ferroelectricity in N- Layer Graphene from the Stacking Sequence
J-019	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-020	Adan Barbosa Jiménez	Métodos modificados de Newton-Cotes para resolver la integral de Boys
J-021	Bianca Priscila Barrera	Tratamiento Algebraico

	Lara	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 C ₂₄ y B ₁₂ N ₁₂
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 Brigido Salvador	Efecto del dopaje del fullereno B ₁₂ N ₁₂ 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 (Ti ₃ C ₂ and Cr ₂ TiC ₂ O ₂) 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 CO ₂
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 físicoquímica 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^+ ($\text{Ng} = \text{He} - \text{Rn}$)
J-052	Carlos Humberto	Estudio teórico (DFT) de

	Cervantes Trujillo	derivados sustituidos de 2-mercaptobenzimidazol: Descriptores de reactividad, QTAIM y potencial quelante/inhibidor de corrosión
J-053	Joaquin Chapa Rodriguez	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 quiral
J-055	Luis Cobos	Propuesta Mecanística para la Síntesis de 5-ALA a partir del Metil Levulinato
J-056	Mariana Jaqueline 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 <i>Acmella oleracea</i> 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	Jazmin 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-hidroxi flavona.
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 teorico 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 Garcia	Estructura electrónica y magnetismo de cadenas lineales basadas en triangulenos fusionados
J-071	Luis Fernando Garcia	ENLACE QUÍMICO Y CORRELACIÓN ELECTRÓNICA EN SISTEMAS DE BAJA DIMENSIONALIDAD: UN ESTUDIO DFT+U+V
J-072	Anaid 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 C ₂ H ₆ S ₂ : implicaciones para la espectroscopia rotacional y la astroquímica interestelar.
J-075	Martha Magdalena	Estudio del

	Flores Leonar	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 espectroscopía SERS del sistema Py–Au ₂₀ : 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 teorico de aleaciones magneticas 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 (B ₁₂ N _{12-x} C _x)
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 Garcia-cruz	Estudio DFT de complejos diméricos e interacciones no covalentes en modelos de lignina Organosolv y Kraft
J-092	Isidoro Garcia-cruz	Estudio DFT de complejos diméricos e interacciones no covalentes en modelos de lignina Organosolv y Kraft
J-093	Isidoro Garcia-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 ^{19}F NMR Chemical Shifts for Tryptophan Metabolites
J-099	Marco Antonio García Revilla	Fuerza Donador-Aceptor mediante la partición en R_3 de la 1-TDM
J-100	Nahomi Garrido Cantor	Descripción de la estructura molecular de isómeros C_6H_6 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 Benitez	Acoplamiento molecular de moduladores del receptor LXR ($\text{LXR}\alpha/\text{LXR}\beta$): 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-disustituidos mediante DFT
J-108	José Gustavo Ávila	Síntesis de Derivados de Lawsons 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 BaTiO ₃
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 isatóico
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 Glifozinas
J-117	Brayan 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	EFEECTO DEL DOPAJE SUSTITUCIONAL EN LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y ELECTRÓNICAS DEL BOROFENO
J-120	Gerardo Hernández Juárez	Evolución estructural en cúmulos de $\text{BnHn}+\text{xq-}$ ($n = 5 - 12$, $x = 0, 2$ 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	Mari 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]arenes 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

Día 2 (Viernes)

Clave	Ponente	Título del trabajo
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 Jesus 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-019	Michael Adán Martínez	Densidad de Energía

	Sánchez	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	$\text{Zn}_2[\text{MIV}(\text{CN})_8]$ 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

		(³ CH ₂) Y EL CICLOPROPENILIDENO (c-C ₃ 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	Fernando 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-galactopiranososa 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 caracterización de las interacciones no covalentes en materiales porosos unidos por interacciones intermoleculares: validación DFT y análisis QTAIM
V-040	Andrea Lisette 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 $C_nH(2n+2)O_2$ ($n=1-10$)
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	LiCo _{1-x-y} FexCryPO ₄ 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 ASiO_4 ($A = \text{Hf, Zr}$ 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 bimetalicos de Pd y Cu.
V-063	Fatima Ramos	Adsorción de Tiofeno sobre nanopartículas de Cu_n 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 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 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 Fullerenó prístino (C60) y sistema TiO2–C60 para adsorber hidroxiiurea, 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	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 <i>Staphylococcus aureus</i> resistente a meticilina
V-100	Thayli Aidee Sosa Pastrana	Diseño in silico de inhibidores de la cruzipaína en <i>T. cruzi</i> : 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(I) 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 Coronagonzález	Síntesis, caracterización y análisis DFT de un nuevo heterociclo: Fosfino-di(o-tolilmetilen)tetrametil-disilano.
V-118	María Vicky Coronagonzález	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	CADMIA: del cálculo al catalizador, un flujo reproducible de descriptores de reactividad