



JUEVES

29 de octubre de 2026

	MODERA Marco Antonio García Revilla
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 Annía Galano Jiménez
	MODERA Cercis Morera Boado
11:35 12:05	María 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 Francisco Javier Meléndez Bustamante
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	Alvaro Vazquez Graph neural network and density functional theory approaches for predicting redox potential of Iron(II)/(III) complexes
10:30 10:45	COFFEE BREAK
	MODERA Erwin García Hernández
10:45 11:35	PLENARIA Martin Head-Gordon Conferencia plenaria · 50 minutos
	MODERA Julián Cruz Borbolla
11:35 12:05	Jesus Luis Alberto Ponce-Ruiz Lithium-Ion Diffusion in LiCoPO ₄ 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 Erwin García Hernández
15:15 15:45	Jose Aminadat Morato Marquez Mecanismos de reacción para la obtención de H ₂ a partir de H ₂ S 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 Salomón Alas Guardado
09:00 09:30	Etienne Palos LOCO-T: Localización Orbital y Correlación Local con Triples Perturbativos en LMP4(T)
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 Salomón Alas Guardado
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	Samantha Euan García Estudio de la estructura electrónica y el magnetismo en la copa de Clar con impurezas sustitucionales en anillos y átomos
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