

## XXII RMFQT

	<b>Jueves</b> <b>7 Noviembre</b>	<b>Viernes</b> <b>8 Noviembre</b>	<b>Sábado</b> <b>9 Noviembre</b>
<b>Moderador</b>	Cercis Morera Boado	Rocío Gutiérrez	Nora Sánchez Bojorge
<b>9:00 - 9:30</b>	<b>Bienvenida y Acto de inauguración</b>	<b>10 Eduardo Alberto Suárez Pérez</b> Transición local-normal en moléculas y su aplicación en fisicoquímica	<b>20 Nelson Flores Gallegos</b> Algunos avances sobre la aplicación de las entropías informacionales en química
<b>9:30 - 10:00</b>	<b>1 Edith Leal-Sánchez</b> Hybrid quantum simulation of molecular dynamics without the Born-Oppenheimer approximation	<b>11 Halis Yenis Seuret Hernández</b> Teoría de los funcionales de la densidad dependiente del tiempo: ventajas y limitaciones	<b>21 Jesús Alfredo Lara Cerón</b> Estudio teórico de descriptores de reactividad química de puntos cuánticos de carbono
<b>10:00 - 10:30</b>	<b>2 Isaac Samael Beltrán Orta</b> Fukui Nuclear en la Dinámica Molecular de Descarboxilaciones Electroquímicas	<b>12 Eduardo Gabriel Guzmán López</b> eH-DAMA: A Graphical Tool to Predict Antioxidant Activity and Oxidative Damage	<b>22 Anaid Flores</b> El momento dipolar y la transferencia de carga en el Puente de Hidrógeno
<b>10:30 -10:45</b>	<i>Coffee Break</i>	<i>Coffee Break</i>	<i>Coffee Break</i>
<b>Moderador</b>	Francisco J. Meléndez	Joaquín Barroso Flores	Norma Flores Holguín
<b>10:45 - 11:25</b>	<b>3 Dr. Alejandro Toro Labbe</b> Actividad Electrónica de Base y Reactividad de Enlace	<b>13 Dr. Daniel Glossman Mitnik</b> RECONOCIMIENTO	<b>23 Marco Gallo</b> Excess chemical potential of thiophene within [C4mim][BF4] IL using enhanced ab-initio MD
<b>11:25 - 11:55</b>	<b>4 Lucio Peña Zarate</b> Desentrañando el ensamblaje de sistemas tipo rotaxano mediante machine learning	<b>14 José Alfredo Flores Ramos</b> XPS de nanopartículas de plata sintetizadas por intercambio iónico en zeolitas del tipo HY	<b>24 Jazmin Delgado Avilez</b> Análisis DFT en mecanismos de polimerización de moléculas fenólicas
<b>11:55 - 12:25</b>	<b>5 Diana Díaz Ocampo</b> Estudio teórico de los mecanismos de fragmentación del 3-butenato de metilo	<b>15 Miriam Ballesteros Olvera</b> Estudio DFT de la superficie MgO/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> para producir H <sub>2</sub> azul a partir de gas natural	<b>25 Luis Angel Zárate Hernández</b> Mecanismo de la Formación de Metanol a partir de CO <sub>2</sub> utilizando Ru <sub>4</sub> mediante DFT
<b>12:25 - 12:40</b>	<i>Coffee Break</i>	<i>Coffee Break</i>	<i>Coffee Break</i>
<b>Moderador</b>	Salomón Alas Guardado	Rodolfo Gómez	Norma Flores Holguín
<b>12:40 - 13:10</b>	<b>6 Arnulfo Montoya Moreno</b> Evaluación Teórica de Propiedades Optoelectrónicas de Perovskitas	<b>16 Pablo Carpio Martínez</b> Energía Cinética y sus Contribuciones de Spin en Interacciones Metal-Ligante	<b>26 Amílcar Meneses</b> Contenedores para el uso de aplicaciones científicas
<b>13:10 - 13:40</b>	<b>7 Diana Barraza-Jimenez</b> Adsorción de ibuprofeno, 2-hidroxiibuprofeno y carboxiibuprofeno en NTC usando r2SCAN-4c	<b>17 Omar López Estrada</b> Insights into the Water Splitting Reaction by monodispersed Fe-Co-Ni-P Electrocatalyst	<b>Cierre y Anuncios</b>
<b>13:40 - 16:00</b>	<i>Comida</i>	<i>Comida</i>	
<b>Moderador</b>	Linda Landeros	Luz María Rodríguez	
<b>16:00 - 16:30</b>	<b>8 Martin Salazar Villanueva</b> Adsorción de especies químicas en nanografenos, coroneno prístino y sistemas anclados	<b>18 Laura Beatriz Castro Gómez</b> Trímero de oxígeno molecular: estructuras multiplete y estabilidad	
<b>16:30 - 17:00</b>	<b>9 Mourad Boujnah</b> Photocatalytic HER and OER of 2D Janus-Type Materials Using Density Functional Theory	<b>19 Rodrigo García</b> Cluster de computo de alto rendimiento	
<b>17:00 - 19:00</b>	<b>Sesión de Posters</b>	<b>Sesión de Posters</b>	