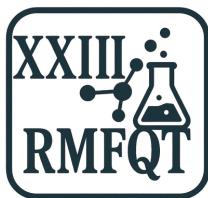


PROGRAMA



XXIII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica



Jueves 13 de Noviembre		viernes 14 de Noviembre		Sábado 15 de Noviembre	
8:20	Traslado a Espacios Magnos	8:20	Traslado a Espacios Magnos	8:20	Traslado a Espacios Magnos
09:00-09:30	Inauguración de la XXIII RMFQT	Moderador Joaquín Barroso Flores	O-8 José Aarón Rodríguez Jiménez Application of Recent Quantum Diagonalization Methods for Quantum Chemistry	Moderador Luz María Rodríguez Valdez	O-16 Guillermo Zerón Nucleofuncionalidad. Propuesta de indicadores de reactividad basados en la intersección de rectas en un sistema de 4 estados
Moderador Filiberto Ortiz Chí		09:00 - 09:30	09:30 - 10:00	09:00 - 09:30	09:30 - 10:00
09:30-10:00	O-1 Manuel de Jesús Solís Hernández Interacción de Derivados de Azaazulenos con Tirosina Cinasa BCR-ABL1 (T315i)	O-9 Ismael Vargas Rodríguez Análisis de 1TDM bajo el marco de la teoría cuántica de átomos en moléculas.	Moderador Erik Díaz Cervantes	Moderador Leonardo Álvarez Valtierra	
10:00-10:30	O-2 Armando Gema Goicoechea. Propiedades Físicas de Sistemas Bidimensionales y Cuasi Bidimensionales	10:00 - 10:30	O-10 José de Jesús Jara Cortés Dinámica de procesos de cruce intersistema $^1\text{m}\leftrightarrow^3\text{m}$ * no convencionales	10:00 - 10:30	O-18 Gonzalo Casillas Deducción de la Relación entre Geometría y Campo Cristalino en Complejos de Baja Simetría
10:30 - 11:00	O-3 Adrián Rodríguez Vargas Estudio Toxicológico del Mecanismo de Inhibición del Plomo en Hemicinasas de S. cerevisiae	10:30 - 11:00	O-11 Josseline Leonor Aguilar López Blandura local en sistemas que presentan valencia mixta: el caso de Cr_2F_8 y Co_2O_4	10:30-11:00	O-19 Jorge Alberto Ramírez Cano Modelado y validación de supercélula de acero X65: aplicaciones a inhibidores de corrosión
11:00-11:15	Coffee Break	11:00-11:15	Coffee Break	11:00-11:15	Coffee Break
Moderador Marco A García Revilla		Moderadora Cercis Morera Boado		Moderador Salomón Alas Guardado	
11:15 -11:55	PL1. Dr. Angel Martín Pendás	11:15 -11:55	PL3. Dr. Cherif Matta	11:15-11:45	O-20 Juan Carlos Alatorre Martínez K-edge XAS, GOAT-REACT y TDDFT para el estudio de reacciones en compuestos de coordinación
11:55 - 12:35	PL2 Homenaje Dr. Juvencio Robles García	11:55 - 12:35	PL4. Homenaje Dra. Esther Agacino Valdés	11:45-12:15	O-21 Marcos Rivera-Almazo Adsorción en Borocarbonituros: Efecto del patrón de sustitución y del soporte en Alumina
12:35-12:50	Coffee Break/ Presentación Patrocinador	12:35-12:50	Coffee Break/ Presentación Patrocinador	12:15-12:45	O-22 Ricardo Antonio Moreno Inzunza Propiedades optoelectrónicas de sistemas $[\text{Cu}(\text{L}2)]^+@\text{TiO}_2$: de métodos semiempíricos a ONIOM
Moderador Julián Cruz Borbolla		Moderador Oscar Jiménez Halla		12:45-13:00	Coffee Break/ Presentación Patrocinador
12:50 - 13:20	O-4 Didier Nivón Ramírez cribado Virtual al Sitio ATPas: Un Enfoque Computacional ante la Crisis de Antibióticos	12:50 - 13:20	O-12 Daniel René Estrada Vázquez Concordancia Fukui-MEPs: Nuevo descriptor CDFT para predicción de transferencia protónica	13:00-13:30	O-23 Rodrigo Orlando Salazar Castillo Estudio del Efecto de la Solvatación en la Adsorción de Iones en Superficies de Arcilla
13:20-13:50	O-5 Cristina Fonseca Yépez Diseño computacional de MOFs para el almacenamiento de H ₂ .	13:20-13:50	O-13 Victor Alonso Lucas Rosales Reactivity of 1,2,5-azadiborolidine derivatives toward carbon monoxide (CO)	13:30-14:00	O-24 Rosa Angélica Bustamante Rendón Mecanismos de asociación y difusión de surfactantes catiónicos y no iónicos con HC
Moderador Rodolfo Gómez Balderas		Moderador Francisco Meléndez Bustamante		14:00-14:30	Anuncios y Clausura
13:50 - 14:20	O-6 Mayra Lozano Espinosa Caracterización del reconocimiento molecular entre psicodélicos y el receptor 5-HT2A	13:50 - 14:20	O-14 Faustino Aguilera-Granja Applications of DFT in the Development of Nanomaterials	14:30	Regreso a sus lugares de origen
14:20 - 14:50	O-7 Karen Astrid Ortiz Vargas Acoplamiento y Dinámica Molecular de Ligandos Tipo Aza-heterociclos Frente a la PBP1b	14:20 - 14:50	O-15 Javier Carmona Espíndola Momentos Multipolares Restringidos en la Teoría de Funcionales de la Densidad		
14:50 - 15:10	traslado al Hotel Gran Plaza	14:50 - 15:10	traslado al Hotel Gran Plaza		
15:10-17:00	Comida	15:10-17:00	Comida		
Moderador Leonardo Álvarez Valtierra		Moderador por definir			
17:30 - 19:30	Sesión de Pósters Hotel Gran Plaza	17:30 - 19:30	Sesión de Pósters Hotel Gran Plaza		
		20:00 - 22:00	Cena		