

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		Moderador Luz María Rodríguez Valdez	
Moderador Filiberto Ortiz Chi		09:00 - 09:30	O-8 José Aaron Rodríguez Jiménez Application of Recent Quantum Diagonalization Methods for Quantum Chemistry	09:00 - 09:30	O-16 Guillermo Zarán Nucleofiliidad. Propuesta de indicadores de reactividad basados en la intersección de rectas en un sistema de 4 estados
09:30-10:00	O-1 Manuel de Jesús Solís Hernández Interacción de Derivados de Azaazulenos con Tirosina Cinasa BCR-ABL1 (T315I)	09:30 - 10:00	O-9 Ismael Vargas Rodríguez Análisis de 1TDM bajo el marco de la teoría cuántica de átomos en moléculas.	09:30 - 10:00	O-17 Gerardo Hernández Juárez Transformaciones estructurales en hidruros y halogenuros de boro.
Moderador Marco A García Revilla		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 $\pi\pi\pi^*/\pi\pi^*$ 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 Hexocinasa de <i>S. cerevisiae</i>	10:30 - 11:00	O-11 Josseline Leonor Aguilar López Blandura local en sistemas que presentan valencia mixta: el caso de Cr_2F_9 y Co_2O_4	10:30-11:00	O-19 Jorge Alberto Ramírez Cano Modelado y validación de supercelda 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 Julián Cruz Borbolla		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	PL.2 Homenaje Dr. Juvencio Robles García	11:55 - 12:35	PL4. Homenaje Dra. Esther Agacino Valdes	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 Rodolfo Gómez Balderas		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 ATPasa: Un Enfoque Computacional ante la Crisis de Antibióticos	12:50 - 13:20	O-12 Daniel René Estrada Vázquez Concordancia Fukui-MEPPS: Nuevo descriptor CDFP para predicción de transferencia protónica	Moderador Erwin García Hernandez	
13:20-13:50	O-5 Cristina Fonseca Yáñez 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)	13:00-13:30	O-23 Rodrigo Orlando Salazar Castillo Estudio del Efecto de la Solvatación en la Adsorción de Iones en Superficies de Arcilla
Moderador Leonardo Álvarez Valtierra		Moderador Francisco Meléndez Bustamante		13:30-14:00	O-24 Rosa Angélica Bustamante Rendón Mecanismos de asociación y difusión de surfactantes catiónicos y no iónicos con HC
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	14:00-14:30	
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 Espindola 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	14:30	Regreso a sus lugares de origen
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		