



## Programa XVIII RMFQT 24-26 Octubre 2019

### Jueves 24 de Octubre de 2019

Hora	Evento
8:30-9:00	Registro en Rectoría de la UAEMex
<i>Moderador</i>	<i>Annia Galano</i>
9:00-10:00	<b>Ignauguración</b>
10:00-10:40	<b>R1: Annik Vivier</b>
10:40-10:55	Café y colocación de carteles
<i>Moderador</i>	<i>Adriana Espinoza</i>
10:55-11:25	<b>O1: Alejandra Mosnerrat Navarrete López</b> (Inhibidores de la corrosión a través de estudios de estructura electrónica)
11:25-11:55	<b>O2: Ana Martínez</b> (Antipsicóticos y química cuántica)
11:55-12:25	<b>O3: Rafael Grande-Aztatzi</b> (Coordinación de aluminio a sistemas bioquímicos)
12:25-12:40	Café
<i>Moderador</i>	<i>Gabriel Merino</i>
12:40-13:10	<b>O4: James S. M. Anderson</b> (Relativistic Effects on Atoms In Molecules: Results for 2-Component Hamiltonians)
13:10-12:00	<b>P1: Julia Contreras</b>
14:00-16:00	Comida
<i>Moderador</i>	<i>Esther Agacino</i>
16:00-16:30	<b>O5: Annia Galano</b> (Diseño Racional de Antioxidantes Multifuncionales: Primera Etapa)
16:30-17:00	<b>O6: Juan Felipe Huan Lew Yee</b> (Implementación Semidirecta de EPT2 con base auxiliar)
17:00-17:30	<b>O7: IBM</b>
<i>Moderador</i>	<i>J. Sandoval/J. Lemus</i>
17:30-19:30	<b>C1: Carteles</b> (Café)
19:30-20:30	<b>C1: Brindis en Explanada de Rectoría UAEMex</b>

### Viernes 25 de Octubre de 2019

Hora	Evento
<i>Moderador</i>	<i>Jorge Garza</i>
9:00-9:30	<b>O8: Cercis Morera Boado</b> (TDDFT study of excited states of Br <sub>2</sub> in clathrates cages)
9:30-10:00	<b>O9: Brenda Manzanilla Viveros</b> (Mecanismos de acción de algunas moléculas antirradicales: endógenas y exógenas)
10:00-10:40	<b>R2: Carlos Bunge</b>
10:40-10:55	Café y colocación de carteles
<i>Moderador</i>	<i>Joaquín Barroso</i>
10:55-11:25	<b>O10: Álvaro de Jesús Ochoa Calle</b> (Impacto de la estabilidad relativa de confórmers zwitteriónicos en péptidos cristalinos)
11:25-11:55	<b>O11: Dulce Consuelo Guzmán Ocampo</b> (Estudio computacional del mecanismo de acción de la enzima $\gamma$ -secretasa)
11:55-12:25	<b>O12: Javier Carmona-Espíndola</b> (Momento Dipolar Restringido en la Teoría de Funcionales de la Densidad (CD-DFT))
12:25-12:40	Café
<i>Moderador</i>	<i>Robin P. Sagar</i>
12:40-13:10	<b>O13: Mariano Sánchez-Castellanos</b> (Exploración teórica de 2,2'-bipiridinas como electrolitos activos en baterías de flujo)
13:10-12:00	<b>P2: William Tiznado</b>
14:00-16:00	Comida
<i>Moderador</i>	<i>Juán Cruz</i>
16:00-16:30	<b>O14: Pere Miró</b> (Estructura Electrónica y Especiación de Óxidos de Actínidos)
16:30-17:00	<b>O15: Karem Hernández Lechuga</b> (Esquema General para el estudio Topológico de la Matriz Densidad Reducida de Orden Uno)
17:00-17:30	<b>O16: José Manuel Guevara-Vela</b> (Modificando la estructura de complejos de Oro (I) mediante el grado de fluoración)
<i>Moderador</i>	<i>P. Balderas/G. Roa</i>
17:30-19:30	<b>C2: Carteles</b> (Café)

### Sábado 26 de Octubre de 2019

Hora	Evento
<i>Moderador</i>	<i>Alberto Vela</i>
9:00-9:30	<b>O17: Hugo Vazquez-Lima</b> (Identificación de radicales libres mediante la simulación de espectros de RPE)
9:30-10:00	<b>O18: Howard Yoav Díaz Salazar</b> (Evaluación de interacciones C-H $\cdots$ $\pi$ en el diseño de organocatalizadores bifuncionales)
10:00-10:40	<b>R3: José L. Gázquez</b>
10:40-10:55	Café y colocación de carteles
<i>Moderador</i>	<i>Francisco Meléndez</i>
10:55-11:25	<b>O19: Margarita I. Bernal-Uruchurtu</b> (Una reacción en dos medios, medio diferentes: Agua líquida y su interfase con el aire)
11:25-11:55	<b>O20: Jessica Arcudia</b> (Las diferentes formas de apilar un material bidimensional con estructura hexagonal)
11:55-12:25	<b>O21: J. Oscar C. Jimenez-Halla</b> (Nuevos Ligandos Azadiboriridina y 12-P-6 Oxafosfato: Estructura y Reactividad)
12:25-12:40	Café
<i>Moderador</i>	<i>Emilio Orgaz</i>
12:40-13:10	<b>O22: Raúl Quintero-Monsebaiz</b> (Electrones desapareados dentro de la teoría de la matriz de densidad)
13:10-12:00	<b>P3: Samuel B. Trickey</b>
14:00-16:00	<b>Clausura</b>