

Programa XVIII RMFQT 24-26 Octubre 2019

Sesión 1: Carteles Jueves 24 de Octubre de 2019

ID Cartel	Autor	Título
1	Cristian Eduardo García López	Modelamiento estructural del ZnO-M (M = Al, Ag) destacando las propiedades electrónicas
2	Arturo Sauza de la Vega	Efectos no aditivos en la interacción de cúmulos de agua con cationes y aniones
3	Kevin Oswaldo Pérez Becerra	Implementación de un Hartree Fock LDF con efectos relativistas dentro del programa deMonk2
4	Mauricio Méndez-Torruco	Estudio teórico de las interacciones entre DESs y CFs
5	Diego Román-Montalvo	Estudio de las interacciones entre líquidos iónicos y CO2 empleando DFT
6	Ana Cristina Ramírez Gallardo	Propiedades mesoscópicas y moleculares de LI utilizados como dispersantes de asfaltos
7	Laura María Castro González	Diseño de antioxidantes multifuncionales derivados de sesamol.
8	Maricarmen Hernández-Rodríguez	Estudios de productos naturales relacionados con perezona como agentes antineoplásicos.
9	Angeles Ortega	Cúmulos de titanio: Tin 0, 1 y su solvatación con agua (n 9). Un estudio teórico DFT
10	José Alfredo Flores Ramos	Uso de simetría en el software Nagual
11	Raúl Márquez Avilés	Dinámica moleculas de 5 potenciales inhibidores de entrada del VIH-1
12	Roberto Carrión Ramírez	Nanocapas de grafeno con defectos para la adsorción y detección de nucleobases
13	Jonatan Isaf Sánchez Sánchez	Modelación Computacional de Nanotubos de Nitruro de Boro Aplicados a la Biomedicina
14	Michael Adán Martínez Sánchez	Desempeño de funcionales de intercambio híbridos de un parámetro en átomos confinados
15	Diana Milena Uriza Prias	Propiedades luminiscentes del aminoácido Triptófano en solución
16	Alan Miralrío	Activación química de monocapas de disulfuro de molibdeno mediante átomos sustitucionales
17	Ashley Acosta	Líquidos iónicos como inhibidores de la corrosión en acero: Un estudio teórico.
18	Ma del Refugio Cuevas Flores	Adsorción del cisplatino en prototipos finitos de óxido de grafeno
19	Mmanuel Eusebio Medina López	Estudio de la capacidad pro-oxidante de la anfotericina B en medio lipídico
20	Mónica A. Valentín-Rodríguez	Potenciales Intermoleculares dependientes del espín: el caso del dímero de oxígeno
21	Romina Castañeda Arriaga	Diseño de quelantes utilizados en el tratamiento de enfermedades neurodegenerativas
22	Jorge Mannel Ortiz Escarza	Estudio teórico del daño oxidativo a β -sitosterol por oxígeno singulete
23	Diana Saray Navarrete-Herrera,	Búsqueda de compuestos antipsicóticos novedosos: una aproximación por QSPR y docking
24	Paul Jesus Manjarrez Escobar.	Potencial redox en la formación de enlaces disulfuro.
25	Hugo Aceves-Luna	El grado de oxidación de un modelo de membrana celular y la respuesta en sus propiedades
26	C. Martínez-Flores	Átomo de He (1s2 1S) confinado por un plasma
27	Jorge Barroso	Helicenos fusionados con ciclooctatetraeno: racemización fotoinducida.
28	Alonso Daniel Jacobo Hernández	Estabilidad de las especies doblemente protonadas XH ₂ ⁺ (X=O,S,...,Po)
29	Saul H. Martínez-Treviño	Predicción de familias de productos naturales usando machine learning y 13C NMR
30	Carlos Mendoza Merlos	Determinación de los índices de reactividad de la Galactosa-Triazol-Teobromina
31	José Isaac Bautista Blanco	Estudio computacional del efecto de los grupos protectores en la síntesis de C-glicosidos
32	J. César Cruz.	Estructuras planas contra estructuras tridimensionales en cúmulos pequeños de carbono.
33	Marcos Rivera-Almazo	Efecto del intercambio exacto sobre sistemas de composición variable entre SrTiO ₃ y SrZrO ₃
34	Christian A. Celaya	Estudio teórico de las propiedades electrónicas de los borosferanos endoédricos M@B ₂₈
35	Lesley Mariana Sedano Ortega	Estudio Dinámico de nanogotas de 4He a temperaturas ultrafrías
36	M. Rodríguez-Arcos	Estudio de potenciales efectivos en 3D mediante el grupo unitario U(4)
37	Marisela Cruz Rivera	Estudio topológico de la densidad electrónica respecto a la degradación del colorante AANB
38	Claudia Islas-Vargas	Efecto de la dispersión en el voltaje de cátodos tipo AM[Fe(CN) ₆] con M=In,Bi; A=Li,Na,K
39	Jorge Isaac Díaz Hernández	Búsqueda De Estructuras De Mínima Energía En Cúmulos de Cun (n=3-10) Usando GUGLOSAC
40	Tomás Delgado-Montiel	Estudio de propiedades ópticas y electrónicas de colorantes basados en carbazol para DSSC
41	Marisol Bermúdez-Montaña	Simulación del espectro de Raman del CO2 a través de métodos algebraicos
42	Alan Quintal-Flores	Automatización del cálculo de la fuerza de reacción en EYRINGPY
43	Cristina Cuantli	Enlace de halógeno y efectos cooperativos en el clatrato de cloro.
44	Cipriano Ariel González Trejo	El integrando de intercambio e interacción química
45	José Alberto Cabrera Jaime	Descripción precisa de sistemas con alta correlación mediante ocupaciones fraccionales
46	Edgar Sulca Fonseca	Búsqueda Estocástica de Isómeros de Sulfuro de Hidrógeno
47	Gerardo Hernández-Juárez	Exploración exhaustiva de sistemas con fórmula (C ₅ H ₅) ₂ E ₂ (E= Be, Mg, Ca, Sr y Ba)
48	Saúl Juan Carlos Salazar Samaniego	Correlaciones de órdenes altos en un sistema de tres osciladores armónicos acoplados
49	Erwin García-Hernández	Análisis de la adsorción de acetamiprid sobre estructuras de grafeno curvadas
50	Jorge J. Pedrozo Romero	Revisión del mecanismo de hidrobromación de alquenos
51	Gabriela Castillo-Toraya	Revisión estructural de sistemas con fórmula general Bn ⁺ con n=7-20
52	Silvana Silva-Aguirre	Escalamiento empírico para el cálculo de los desplazamientos químicos de 1H y 13C
53	María Gpe. De los Santos López	Estudio teórico-experimental de la síntesis de endoperóxidos esteroidales
54	Armando A. Morín	Propiedades mecánicas y electrónicas de la monocapa de H ₂ Be
55	Jessica Jazmín Muñoz Macías	El rol del contraión en complejos SCO de Hierro (II)
56	Fernando Sánchez	Termoelectricidad en Nanoalambres con Ramificaciones Cuasiperiódicas
57	Estibaliz Margarita Ramírez Vázquez	Bobina de superficie de resonador de pétalos para UHF-MRI
58	Eugenia Dzib	Implementación de los Métodos Segmentados de Ayala-Schlegel y Clásico de Referencia
59	Edgar López Pérez	Estudio de la contribución electrostática a la estabilidad estructural de la subunidad b
60	Obasuyi Aanuoluwapo Raphael	Modifications of the molecular structure of Aurantinidin dyes for DSSCs
61	Felipe Aparicio	Estudio teórico del proceso redox en el sitio activo de una familia de tiorredoxinas
62	Liliana Mammino	Función de enlaces de H entre monómeros para estabilizar dímeros floroglucinolos acilados
63	Uriel J. Range	Evaluación de la interacción de derivados de organofosforados con la enzima AChE
64	Mariano Sánchez-Castellanos	Exploración teórica de derivados del diquat para baterías de flujo orgánicas
65	Aldo Gabriel Maya Cruz	Efecto catalítico de pequeños cúmulos de Platino en la disociación de hidrocarburos
66	Rodrigo Zepeda-Tello	Aprendizaje de máquina para la predicción de las solubilidades de moléculas orgánicas
67	José Miguel Mora-Fonz	El doble anillo D4R en la prenucleación de zeolitas
68	Maurice Klain	Compuestos nitrogenados como electrolitos activos en baterías de flujo orgánicas
69	Zaahel Mata-Pinzón	Modelo teórico para estimación de la reversibilidad electroquímica de moléculas orgánicas
70	Monserat Horta Salvador	Análisis energético de la estabilidad de capas individuales de MgB ₂
71	Rogelio Alejandro Delgado Alfró	Floroglucinol: un estudio cinético a nivel DFT
72	Wendolyne López Orozco	Estudio computacional de los conformeros de naratriptán en fase gaseosa y acuosa
73	León Francisco Alday Toledo	Integración de la Cuenca de Bader con la Malla de Euler-MacLaurin-Lebedev
74	Lourdes Reyes Cervantes	Importancia de las interacciones no covalentes en los isómeros de la Di-isopropanolamina
75	Héctor Francisco	Análisis del funcional de energía cinética en la aproximación de gradiente generalizado
76	Alfredo Ramírez Torres	Heteroestructuras de dicalcogenuros de metales de transición
77	Rosaura Palma Orozco.	PCA de variantes de Neuraminidasa en presencia de ligandos
78	Jafet Gutiérrez-Valdés	FePt nanoclusters and Graphene/Iridium nano-structured surface, first principle study