

Programa XVIII RMFQT 24-26 Octubre 2019

Sesión 2: Carteles Viernes 25 de Octubre de 2019

ID Cartel	Autor	Título
1	Joatan Michael Bautista Renedo	Identificando atropoisómeros en bi-1,2,3-triazoles mediante métodos computacionales
2	Cristina Cuautli	Reactividad catalítica de silicatos en el proceso de obtención de biodiesel
3	Humberto G. Laguna	La suma entrópica en átomos hidrogenoides confinados
4	José Roberto Ríos Rivero	Entrenando redes neuronales para predecir la energía de correlación electrónica.
5	Pavel Andrei Montero-Domínguez	Computer Simulation Studies of a Kainate (GluK1) Receptor with Two Glutamate Analogues
6	Julietta Reyna Luna	Constantes de Complejación entre los iones Zn(II) y Acetato, en disolución de Etanol.
7	Carlos Zepactonal Gómez Castro	Análisis Computacional de Variantes de la Enzima CYP Aplicadas a Catálisis Orgánica
8	Mayra Lozano	Dinámica del dominio RBD de la proteína NS1 del virus de influenza
9	Isidoro García-Cruz	Termodinámica de las reacciones de hidroconversión del ácido palmítico para obtener diésel
10	Isaías Morales-Salazar	Estudio teórico de la dimerización espontánea de olefinas captodativas.
11	Xochitl Cruz Núñez	En búsqueda de los mecanismos de acción del carbono negro en el forzamiento radiativo
12	Gustavo Israel Mondragón Solórzano	Origen del red-shifting de las absorciones energéticas de complejos antena fotosintéticos.
13	Elvia Patricia Sánchez Rodríguez	Estudio teórico de la activación de CO ₂ sobre cúmulos soportados en grafeno dopado
14	José Carlos Orozco	Estudio computacional de endofullerenos con clústeres de vanadio
15	Rogelio Chávez Rocha	Estudio computacional de la adsorción de CO ₂ sobre superficies de TiO ₂ (rutilo y anatase)
16	Leonardo I. Lugo-Fuentes	Estabilización del complejo de digalio oro por medio de interacciones no covalentes
17	Dulce Carolina Ruiz Ramírez	Estudio teórico-computacional de la gentamicina y su posible receptor de la megalina
18	Alfonso Esqueda García	Galleta: GPU Accelerated Library for Long ERIs Transformations with Auxiliary Basis
19	Ricardo Enrique Buendia Corona	Análisis in silico de la actividad insecticida de un grupo de limonoides
20	Valeria E. Iniesta	Superficies de Hirshfeld y átomos en moléculas de contraiones orgánicos de decavanadato
21	J.A. Martínez-Espinosa	Estudio teórico de la estabilidad de cúmulos bimetalicos soportados sobre grafeno dopado
22	Diana Marlén Castañeda-Bagatella	Estudio del efecto del tamaño de los iones en una DCE mediante simulación Monte Carlo
23	Lorena Monterrosas-Pérez	Interacciones débiles vs enlaces de hidrógeno en la estabilidad del ácido 3-nitroftálico
24	Karla Botello-Mancilla	Magnetismo en metales de transición con aproximaciones GGA y meta-GGA
25	Kayim Pineda-Urbina	Desechos frutales del estado de colima como materia prima para la síntesis de HMF
26	Andrea Moreno-Ceballos	Acoplamiento molecular de derivados de caespitato con UGM con actividad anti-tuberculosis.
27	Rafael Flores Larrañaga	Estudio MEDT de la reacción de cicloadición [4+2] de C60 con oxo-iminas quirales
28	Jorge Nochebuena	Dinámica molecular de agregados de péptidos cortos amiloides
29	Didier Nivón Ramírez	Determinación de la CMC en Agua de Dodecil Sulfato de Sodio mediante DPD
30	Jorge A. Amador-Balderas	Efectos del sustituyente en la disociación en fase gaseosa del ácido benzoico
31	Andrés Felipe Álvarez García	Estudio teórico del enlazamiento de Cu(I) con el fragmento hIAPP(18-22)
32	América Y. Torres-Boy	Estudio de las geometrías y tiempos de vida en el estado excitado de los cluster 3Cl-H ₂ O
33	Ivan E. Romero Ramirez	Validación de parámetros de potenciales clásicos para clatrato de metano
34	Esaú Israel Álvarez Buendía	Hipercordinación en Complejos de Metales Alcalinos y Alcalinotérreos
35	N. Schuth	Characterizing transition metals in proteins by X-ray spectroscopy and quantum chemistry
36	Jonathan Almazán Celis	Síntesis, caracterización y estudio computacional de cristalinidad en nanoalambres de Ni
37	Valeria García Melgarejo	Estudio computacional de electrolitos usados en baterías de ion litio
38	Montserrat Navarro Espino	Irradiación de patrones de Moiré en bicapas de grafeno
39	Salomón de Jesús Alas Guardado	Simulación computacional de cepillos biológicos
40	Sergio Franco	Hologramas moleculares
41	María Fernanda Padilla Mercado	Nanomateriales basados en dendrímero para el transporte del cisplatino
42	Viridiana Vargas-Castro	Análisis de la interacción de taurina en la dimerización de β -tubulinas
43	Brandon Meza González	Estudio computacional de las interacciones metálicas en una membrana modificada de polipropileno
44	Serafin Jiménez-Apollinar	Cúmulos Mg-O en la estructura de estado sólido del valproato de magnesio
45	Gerardo Bravo-Villegas	Acoplamiento molecular e interacción peptídica entre Neuroglobina y VDAC-1
46	Guillermo Leuman Rodríguez Segura	Estudio de la migración de agua y iones en una membrana de naftión en baterías de flujo
47	Lillian G. Ramírez-Palma	Obtención de la función de onda de biomacromoléculas utilizando ELMO
48	Lisset Noriega	Estudio de complejos organometálicos con cobre y su actividad como posibles fotosensores
49	Norma E. González Díaz	Formación de cristales en forma laminar a través del autoensamblaje de dipéptidos
50	David Ramírez-Palma	El rol de la topología de espín en interacciones metal-ligante
51	Luis Fernando Paredes	Estudio de los parámetros de reactividad global y local de acilfloroglucinolones
52	Rodolfo Alejos-León	Estudio teórico del puente PI de colorantes base acridina en DSSC
53	Maricruz Rangel	Descripción molecular de la interacción de bloqueadores tipo cannabinoide con los Cav3
54	Lucía Alvarez	Estudio del mecanismo de descarboxilación Schenkel-Rudin del etil metil malonato
55	Leticia Feria	Efectos cooperativos entre los sitios de Ni soportados sobre CeO ₂ (111) en la reacción WGS
56	Sebastián García Pineda	Análisis de propiedades termoquímicas y estructurales de derivados del adamantano
57	Violeta Rangel	Estudio conformacional del CNBD del canal HCN con simulaciones de dinámica molecular
58	Humberto Tadeo Flores Trujillo	Simulación molecular multiescala de moléculas orgánicas con aplicación fotovoltaica
59	Jorge Luis Reyes Corrales	Estudio teórico de moléculas inhibidoras de benzimidazol y piridina sobre un clúster de Fe
60	David Ochoa-Resendiz	Estudio teórico de las rutas de disociación del acrilato de metilo
61	Marco Antonio Díaz Villarreal	Multipolo eléctrico cuantizado topológico sobre una red fractal
62	Dayan Bernal Miranda	Docking molecular de derivados de quinolonas en la estructura de topoisomerasa II de TBM
63	Nohemi García Molina	Comportamiento fotoquímico de avobenzona-derivados con estabilidad mejorada mediante TDDFT
64	Joel Ireta Moreno	Cargas dinámicas en sistemas enlazados por puentes de hidrógeno
65	Sabrina Marín	Acoplamiento molecular de derivados de cumarinas con MAO-B en el tratamiento de Parkinson
66	Rodrigo Said Razo-Hernández	Estudio de la interacción entre derivados de triazol y la enzima 17-HSD1
67	Diana L. Campa-Guevara	Estudio teórico de la interacción de líquidos iónicos con modelos de lignina
68	Ricardo Almada Monter	Correlación de Constantes de Formación con Descriptores Atómicos de Compuestos de Cu(II)
69	Alejandra del Río Lima	Evolución temporal del enredamiento cuántico en modelos de interacción radiación-materia
70	Gerardo Daniel Centeno Plaza	Partición de la energía de formación de enlaces de hidrógeno asistidos por carga
71	Karla L. Morales Cerón	Estudio DFT de compuestos Zn(II)-PIR; estabilidad y propiedades termodinámicas
72	Adriana Pérez-González	Melatonina y sus metabolitos como agentes químicos capaces de reparar el ADN oxidado.
73	H. Rojas-Chávez	Structural transition and magnetic properties of Ni m Cu n (m + n = 6) clusters: a DFT analysis
74	C. Quintanar Sierra, R. Caballero	Transferencia de carga y adsorción de hidrogeno en nano superficies de paladio soportado
75	Gabriela Gomez-Jimenez	Classification models of pesticides by Mode Of Action
76	Juan Carlos Dávila-Becerril	Acoplamiento Molecular entre derivados de Triazoles y la proteína STAT3
77	Jorge L. Rosas Trigueros	Exploración del espacio funcional de un FX GGA usando aprendizaje de máquina