

Miércoles 8 de Noviembre
17:00 – 20:00 hrs Registro en el Hotel Misión Pachuca
20:00 – 21:00 hrs Brindis de bienvenida

	Jueves 9 Noviembre	Viernes 10 Noviembre	Sábado 11 Noviembre
Moderador:	Dr. Julián Cruz Borbolla Carlos Quintanar Sierra	Dr. Simplicio González Montiel Hebert Rodrigo Mojica Molina	Dr. Erwin García Hernández Aldo de Jesús Mortera Carbonell
9:00-9:30	Electronegatividad, afinidad electrónica y potencial de ionización del Pd6/Ag8/Grafene306 Jesús Francisco Monzón Bensojo	Electronic and optical properties of three-dimensional Zn[M(CN)4] tetracyanides Juan Felipe Huan Lew Yee	Descripción de la estructura electrónica y molecular mediante la fuerza de Ehrenfest Eduardo Gabriel Guzmán López
9:30-10:00	Eficiencia FRET de una antena artificial formada por pigmentos naturales y zeolita L Eliud Morales Dávila	Extensión de funcionales de orbitales naturales de Piris al estudio de estados excitados Ignacio Migliaro	Rational Design of Ferulic Acid Derivatives Aimed to Neurodegenerative diseases. Ricardo Alberto Rodríguez Ojeda
10:00-10:30	Simulaciones de dinámica molecular del complejo Aß01-42/a7_nAChR	Machine Learned Force Fields for Crystal Structure Prediction	ESTUDIO COMPUTACIONAL EN FÁRMACOS INHIBIDORES DE LA NEPRILISINA Y RECEPTORES DE LA ANG II
10:30-10:45	<i>Coffee Break</i>	<i>Coffee Break</i>	<i>Coffee Break</i>
Moderador:	Dra. Nelly González Rivas Marcelo Galván	Dr. Salomón Alas Guardado Alexandre Tkachenko	Dr. Joaquín Barroso Flores Raúl Álvarez Idaboy
10:45-11:25	RECONOCIMIENTO María Camila Barrero Moreno	PLENARIA Lesley Mariana Sedano Ortega	RECONOCIMIENTO Martha Magdalena Flores Leonar
11:25-11:55	Aleaciones 2D con estructura tipo Janus: Efecto de la sustitución del grupo halógeno Rodrigo Said Razo Hernández	Estudio Dinámico de Nanogotas de 4He a Temperaturas Ultrafrías José Antonio Sánchez Fernández	Derivados de bencidinas materiales electroactivos para baterías de flujo redox orgánicas Fernando Colmenares Landín
11:55-12:25	Understanding the binding and inhibition of aminopyrazole derivatives towards JNK3: a QSAR	Estrategias estructurales de hidrogeles supramoleculares	Modelo disruptivo para describir reacciones prohibidas por espín que sí ocurren
12:25-12:40	<i>Coffee Break</i>	<i>Coffee Break</i>	<i>Coffee Break</i>
Moderador:	Dr. José Guadalupe Alvarado Rodríguez Luis Armando González Ortiz	Dr. Luis Ángel Zárate Hernández Roberto Flores-Moreno	Dra. Cercis Morera Baado Gerardo Bravo Villegas
12:40-13:10	Exploración metaheurística del espacio químico de isómeros para sistemas orgánicos clásico Armando Gama Goicochea	Calculos de metodos multicomponente con el programa deMon2k Jose Maria Castillo Robles	Interacción de derivados de ftalimida con la cadena de ADN a través de dinámica molecular Esau Israel Álvarez Buendía
13:10-13:40	Transición de fase topológica de un gas de Coulomb en Advance corrosion inhibition modeling: adsorption of 2-mercaptopbenzimidazole on Cu(111)		Hipercordinación en complejos de metales alcalinotérreos.
13:40-16:00	<i>Comida</i>	<i>Comida</i>	<i>Cierre y Anuncios</i>
Moderador:	Dr. Francisco Meléndez Bustamante Oscar Olvera Neria	Dr. Rodolfo Gómez Raymundo Hernandez Esparza	
16:00-16:30	Diseño de perovskitas dobles y libres de plomo para aplicaciones optoelectrónicas Isidoro García-Cruz	Searching Reaction Pathways on Metallic Surfaces through High-Performance Computing Rodolfo Cruz Silva	
16:30-17:00	Estudio teórico de la conversión de fructuosa a 5-hidroximetilfurfural	Dinámica molecular del óxido de grafeno: Modelo y parametrización Lainer Donet	
17:00-17:20	<i>Sesión de Carteles</i>	LUFAC SGA® Un Sistema Gráfico de Administración	
17:20-19:00		<i>Sesión de Carteles</i>	