



Cinvestav
Departamento de Química
Coloquio 2024

Programa
Martes 10 de diciembre

Horario	Actividad/Conferencia	Ponente
8:50 – 9:00	Bienvenida	Organizadores
Modera: Raúl Mendoza Báez		
9:00 – 9:40	Modificación estructural de productos naturales y su influencia en la tubulina, una proteína fundamental en la replicación celular	Carlos Martín Cerda García Rojas
9:40 – 10:10	Aromaticidad en hidrocarburos aromáticos policíclicos	Marco Antonio Treviño Kauffmann
10:10 – 11:10	Contribución de la difracción de rayos X al estudio de la alergia	Adela Rodríguez Romero (UNAM)
11:10 – 11:50	Receso	
Modera: Claudia Mireya Ramírez Lozano		
11:50 – 12:30	Cálculos de propagadores en moléculas, más allá del segundo orden electrónico	Roberto Flores Moreno (UdeG)
12:30 – 13:00	Distorsiones estructurales y conmutación de luminiscencia en compuestos de Fe(II), Ni(II) y Zn(II): influencia de los enlaces de hidrógeno	Carmen Anayely Cruz Galván
13:00 – 13:30	Estudio electroquímico de la reducción del ácido perfluorooctanoico (PFOA)	Jonathan Josué Calvillo Solís (UTEPA)
13:30 – 14:10	Desarrollo de polímeros semiconductores para aplicaciones optoelectrónicas: derivados de dicetopirrolpirrol en celdas solares orgánicas ternarias	Marisol Güizado Rodríguez (UAEMor)
14:10 – 15:30	Comida	
Modera: Eusebio Raúl Uc Santos		
15:30 – 16:00	¿Por qué (no) utilizar un funcional híbrido?	Kevin Oswaldo Pérez Becerra
16:00 – 16:30	Estudio espectroscópico de la interacción de la proteína Tau con cobre y zinc	Gerardo Ulises Juárez Romero
16:30 – 17:10	La adsorción electroasistida como método híbrido para la remoción de contaminantes inorgánicos y orgánicos del agua mediante el uso de materiales carbonosos	Luis Felipe Cházaro Ruiz (IPICYT)

Miércoles 11 de diciembre

Horario	Actividad/Conferencia	Ponente
<i>Modera: Alan Gustavo Soto Ángeles</i>		
9:00 – 9:40	Entalpías de sublimación: 25 años de determinaciones exactas en el laboratorio de termoquímica del Cinvestav	Aarón Rojas Aguilar
9:40 – 10:10	Improvements of analytic 2nd order energy derivatives within auxiliary density functional theory	Flor Andrea Olvera Rubalcava
10:10 – 11:10	Aprovechamiento de la energía del océano	Miguel Ángel Alatorre Mendieta (UNAM)
11:10 – 11:50	Receso	
<i>Modera: Lucio Peña Zarate</i>		
11:50 – 12:20	Caballos de Troya moleculares: Innovación en el diseño de moléculas terapéuticas	Andrea Verónica Rodríguez Mayor
12:20 – 12:50	Constrained minimizations on hyperspheres for minimum energy path following	Jorge Alberto Sánchez Álvarez
12:50 – 13:30	La Química Orgánica – compleja o simple en los Ingredientes Activos Farmacéuticos	Roberto Carlos Melgar Fernández (Signa)
13:30 – 14:00	Clausura	
14:00 – 16:00	Comida	