

Líneas de Generación y/o Aplicación del Conocimiento

Participación de **Estudiantes** y Profesores en **Proyectos Derivados de las Líneas de Investigación o de Trabajo Profesional**

LGAC2. Diseño y estudio de mediante Química Computacional de moléculas con posible actividad biológica

Capítulos en libros (CL)

LGAC2_2022_CL01. *Density functional theory on the CO₂ absorption process with ionic liquids*, Diego Román-Montalvo, **Myrna H. Matus**, *Computer Aided Chemical Engineering*, **2022**, 49, 967–972 (Part of volume: Proceedings of the 14th International Symposium on Process Systems Engineering – PSE 2021+ June 19-23, 2022, Kyoto, Japan. Eds. Yoshiyuki Yamashita, Manabu Kano, Ed. Elsevier, Vol. 2, pp. 967–972. ISBN (Volume 2): 978-0-443-18725-4).

Artículos de investigación en revistas indizadas (AI)

LGAC2_2023_AI01. Phenolic compounds extraction from propolis using imidazole based ionic liquids: a theoretical and experimental study. Pale-Ezquivel, Iván; Vera-Guzmán, Mario; **Domínguez, Zaira**; **Matus, Myrna H.** *J. Phys. Org. Chem.* **2023**, 36(6), e4497.

LGAC2_2022_AI01. *Active compounds in Zingiber officinale as possible redox inhibitors of 5-lipoxygenase using an in-silico approach.* Ley-Martínez I, J. S.; Ortega-Valencia, J. E.; **García-Barradas, O.**; Jiménez-Fernández, M.; Uribe-Lam, E.; Vencedor-Meraz, C. I.; Oliva-Ramírez, J. *International Journal of Molecular Sciences* **2022**, 23(11), 6093.

LGAC2_2022_AI02. Arturo Coaviche-Yoval, José G. Trujillo-Ferrara, Marvin A. Soriano-Urzúa, Erik Andrade-Jorge, Luis A. Sánchez-Labastida, Héctor Luna, **Ricardo Tovar-Miranda**. In silico and in vivo neuropharmacological evaluation of two γ -aminoacid isomers derived from 2,3-disubstituted benzofurans, as ligands of GluN1–GluN2A NMDA receptor. *Amino Acids* **2022**, 54(2), 215-218.

LGAC2_2022_AI03. Alejandro Suárez-Méndez, **Myrna H. Matus**, Victor M. Rivera, Protonated α -oligothiophenes as potential sensitizers of TiO₂ supported on zeolite HY – An experimental and theoretical study, *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.* **2022**, 433, 114180 (7 pp.).

LGAC2_2021_AI01. Omar Martínez-Mora, Diana Campa-Guevara, Rocío Meza-Gordillo, Rodrigo Sánchez, **Magali Salas-Reyes**, José Manuel Domínguez, **Myrna H. Matus**, and **Zaira Domínguez**, Imidazole-based ionic liquids as rheological modifiers of heavy crude oil: an experimental and theoretical study. *IAP Advances* (2021) 11, 035204.

LGAC2_2021_AI02. Tomás Guerrero, Sergio F. Juárez-Cerrillo, Francisco J. Meléndez, **Myrna H. Matus**, J. Sergio Durand-Niconoff, Study of local reactivity of isatoic anhydride applying quantum molecular similarity, *ChemistrySelect* **2021**, 6(17), 4390–4399.

LGAC2_2021_AI03. Pablo D. Astudillo-Sánchez, Enrique J. Soriano-Castillo, Brenda Manzanilla, Gilberto Rocha-Ortiz, Lidia G. Trujano-Ortiz, **Myrna H. Matus**, **Zaira Domínguez**,

Magali Salas-Reyes. Electrochemical Oxidation of Symmetrical Antioxidant Chicoric Acid in DMSO: Is this a Sequential or a Simultaneous 2ECE Mechanism? *ChemistrySelect* 2021, 6, 8158 –8164.

LGAC2_2021_AI04. J. Sergio Durand-Niconoff, Erik Ortiz-Blanco, Gabriela Sosa-Ortiz, José L. Olivares-Romero, Enrique Juárez-Aguilar, Eva Luz Montoya Hernández, Cynthia Fernández-Pomares, **Ricardo Tovar-Miranda**, María Eugenia Castro, Francisco J. Meléndez and Tomas Guerrero. Mannich bases of hydroxycoumarins: synthesis, DFT/QTAIM computational study and assessment of biological activity. *Royal Society of Chemistry Advances* 2021, 11, pp 31260-31271.

LGAC2_2020_AI01. Brenda Manzanilla, **Zaira Domínguez**, José Manuel Domínguez, **Magali Salas-Reyes**, **Myrna H. Matus**, Study on the interactions between [BMIM][SCN] and naphthalene/dibenzothiophene: A theory-experiment comparison, *J. Mol. Struct.* 2020, 1207, 127846.

LGAC2_2020_AI02. Maurizio A. Pantoja-Hernández, Josué A. Alemán-Vilis, Analilia Sánchez, **Magali Salas-Reyes**, Judith López-Bonilla, **Myrna H. Matus**, **Zaira Domínguez**, Effect of 1-ethyl-3-methylimidazolium acetate on the oxidation of caffeic acid benzyl ester: an electrochemical and theoretical study, *J. Phys. Org. Chem.* 2020, 33(4), e4044.

LGAC2_2020_AI03. Sánchez-Pavón, E.; Rosete-Luna, S.; Colorado-Peralta, R.; Hernández-Hernández, M. F.; Sánchez, M.; Flores-Parra, A.; **García-Barradas, O.**; Hernández-Romero, D. *Spectroscopic and computational analysis of the (E/Z)-isomers in the synthesis of new alkyl-oxime derivatives.* *Journal of Molecular Structure* 2020, 1219, 128563.

LGAC2_2019_AI01. Tomás Guerrero, Adrián Torices-Saucedo, María Eugenia Castro, Sergio F. Juárez-Cerrillo, Francisco J. Meléndez, **Myrna H. Matus**, J. Sergio Durand-Niconoff, *Global reactivity indexes and nonparametric statistics in the study of the proapoptotic activity of coumarins*, *Intl. J. Quantum Chem.* 2019, 119:e25902, 9 pp.

LGAC2_2018_AI01. Ketzasmin A. Terrón-Mejía, Evelin Martínez-Benavidez, Inocencio Higuera-Ciapara, Claudia Virués, **Javier Hernández**, **Zaira Domínguez**, Waldo Argüelles-Monal, Francisco M. Goycoolea, Roberto López-Rendón, Armando Gama Goicochea, Mesoscopic Modeling of the Encapsulation of Capsaicin by Lecithin/Chitosan Liposomal Nanoparticles, *Nanomaterials* (2018), 8, 425.

LGAC2_2017_AI01. Raiza Hernández-Bravo, Alma Delia Miranda, Omar Martínez-Mora, **Zaira Domínguez**, J. Manuel Martínez-Magadán, R. García-Chávez, J. Manuel Domínguez Esquivel, *On the Structure-Solubility Relationship of Asphaltenes in Ionic Liquids Using COSMO-RS Methods*, *Ind. Eng. Chem. Res.* 2017, 56(17), 5107-5115.

LGAC2_2017_AI02. Luis I. Perea-Ramírez, Rubicelia Vargas, **Zaira Domínguez**, **Magali Salas-Reyes**, **Myrna H. Matus**, Marcelo Galván, *Theoretical study of the adsorption of substituted guaiacol and catechol radicals on a graphite surface*, *Electrochim. Acta* 2017, 242, 66-72.

LGAC2_2016_AI01. Durand-Niconoff, J. Sergio; **Matus, Myrna H.**; Juárez-Cerrillo, Sergio F.; Meléndez, Francisco J. *Theoretical study of the global and local reactivity of a series of 3-aryl coumarins.* *Theo. Chem. Acc.* 2016, 135(11), 249 (11 páginas).

LGAC2_2016_AI02. Meléndez, F. J.; Durand-Niconoff, J. S.; Domínguez-Ortiz, M. A.; **García-Barradas, O.**; Caballero, N. A.; González, E. *Theoretical Study of Global and Local Reactivities of Coumarin and its Hydroxylated Derivatives.* *Int. J. Quantum Chem.* 2016, 116(9) 663-669.

LGAC2_2015_AI01. Guillén-Villar, R.C.; Vargas-Álvarez, Y.; Vargas, R.; Garza, J.; **Matus, M. H.; Salas-Reyes, M.; Domínguez, Z.** *Study of the oxidation mechanisms associated to new dimeric and trimeric esters of ferulic acid.* J. of Electroanalyt. Chem. **2015**, *740*, 95-104.

LGAC2_2014_AI01. Saavedra-Vélez, M. V.; Correa-Basurto, J.; **Matus, M. H.**; Gasca-Pérez, E.; Bello, M.; Cuevas-Hernández, R.; García Rodríguez, R. V.; Trujillo-Ferrara, J.; **Ramos-Morales, F. R.** *Seeking Potential Anticonvulsant Agents that Target GABA_A Receptors using Experimental and Theoretical Procedures.* J. Computer-Aided Mol. Design **2014**, *28(12)*, 1217-1232.

LGAC2_2014_AI02. Sánchez, A.; Guillén-Villar, R.C.; Sánchez, R.; Vargas, R.; Garza, J.; **Matus, M. H.; Salas-Reyes, M.; Domínguez, Z.** *Electrochemical Oxidation of Symmetrical Amides of Ferulic Acid in Aprotic Medium.* Electrochim. Acta **2014**, *133*, 546-554.

LGAC2_2012_AI01. Correa-Basurto, J.; **Ramos-Morales, F. R.; Matus, M. H.**; Rosales-Hernández, M. C.; Mancilla-Percino, T.; Trujillo-Ferrara, J.; Ilizaliturri-Flores, I. *Docking and DFT studies to explore the topoisomerase II ATP pocket employing 3-substituted-2,6-piperazindiones for drug design.* Molec. Simul. **2012**, *38(13)*, 1072-1084.

LGAC2_2012_AI02. Durand-Niconoff, J. S.; Cruz-Kuri, L.; Cruz-Sánchez, J. S.; **Matus, M. H.; Ramos-Morales, F. R.** *Relationship between local reactivity indices and the hammett constant for isatoic anhydride and its derivatives.* Intl. J. Quantum Chem. **2012**, *112(22)*, 3570-3577.

LGAC2_2012_AI03. Stover, M. L.; Jackson, V. E.; **Matus, M. H.**; Adams, M. A.; Cassady, C. J.; Dixon, D. A. *Fundamental thermochemical properties of amino acids: gas-phase and aqueous acidities and gas-phase heats of formation.* J. Phys. Chem. B **2012**, *116(9)*, 2905-2916.

LGAC2_2011_AI01. Durand-Niconoff, J. S.; Cruz-Kuri, L.; **Matus, M. H.; Correa-Basurto, J.**; Cruz-Sánchez, J. S.; **Ramos-Morales, F. R.** *Relationship between global indices of reactivity, electrodonating and electroaccepting powers, and the Hammett constant in isatoic anhydride derivatives.* J. Chem. Sci. **2011**, *123(5)*, 719-725.

LGAC2_2010_AI01. **Matus, M. H.; Domínguez, Z.; Salas-Reyes, M.; Hernández, J.**; Cruz-Sánchez, S. *Conformational study of caffeic acid derivatives.* J. Molec. Struct.: THEOCHEM **2010**, *953(1-3)*, 175-181.

LGAC2_2010_AI02. Mancilla Percino, T.; Correa-Basurto, J.; Trujillo-Ferrara, J.; **Ramos-Morales, F. R.**; Acosta Hernández, M. E.; Cruz-Sánchez, J. S.; Saavedra-Vélez, M. *Molecular modeling study of isoindolines as inhibitors of L-type Ca²⁺ channel by docking calculations.* J. Molec. Model **2010**, *16*, 1377-1382.

LGAC2_2008_AI01. Mendieta-Wejebe, J. E.; Rosales-Hernández, M. C.; Rios, H.; Trujillo-Ferrara, J.; López-Pérez, G.; Tamay-Cach, F.; **Ramos-Morales, F. R.**; Correa-Basurto, J. *Comparing the electronic properties and docking calculations of heme derivatives on CYP2B4.* J. Mol. Model. **2008**, *14*, 537-545.

LGAC2_2008_AI02. **Ramos-Morales, F. R.**; Durand-Niconoff, S.; Correa-Basurto, J.; Meléndez-Bustamante, F. J.; Cruz-Sánchez, J. S. *Theoretical study of reactivity based on the Hard-Soft/Acid-Base (HSAB) in isatoic anhydride and some derivatives.* J. Mex. Chem. Soc. **2008**, *52(4)*, 241-248.

Artículos de divulgación (AD)

LGAC2_2023_AD01. *El método topológico en química I: el caso de espacio discreto.* Durand-Niconoff, J. S., **Matus, M. H.**, Juárez-Cerrillo, S. F., Guerrero, T. *Educación Química*, **2023**, *34(2)*, 26-

39. Fecha de aceptación: 18 febrero 2023. Fecha de publicación: 11 de abril 2023. Editorial: UNAM, Dirección General de Publicaciones y Fomento Editorial. País: México. ISSN: 0187-893X. ISSNc: 1870-8404 en línea. DOI: <https://doi.org/10.22201/fq.18708404e.2023.2.8360>

Memorias en extenso (ME)

LGAC2_2022_ME01. *Estudio teórico-computacional de la extracción de metabolitos secundarios presentes en la cáscara de café empleando líquidos iónicos*, Diego Román-Montalvo, **Myrna H. Matus**, XLIII Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “La Ingeniería Química, la Sostenibilidad y la Economía Circular”, en línea, 23-26 agosto 2022. *Avances en Ingeniería Química*, Vol. 1, No. 4, pp. TER-1 a TER-5. ISSN: 2683-2925.

LGAC2_2021_ME01. *Estudio teórico de la absorción de CO₂ empleando líquidos iónicos como disolventes verdes*, Diego Román-Montalvo, **Myrna H. Matus**, XLII Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “Desafíos Actuales en la Investigación y Docencia en Ingeniería Química, el Desarrollo Nacional y la Responsabilidad Social”, en línea, 8-11 septiembre 2021. *Avances en Ingeniería Química*, Vol. 1, No. 3, pp. TER-74 a TER-78. ISSN: 2683-2925.

LGAC2_2021_ME02. *Estudio teórico sobre las interacciones presentes en el complejo de urea/D-fructosa con ibuprofeno*, Oliver A. Landa-Gómez, **Myrna H. Matus**, XLII Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “Desafíos Actuales en la Investigación y Docencia en Ingeniería Química, el Desarrollo Nacional y la Responsabilidad Social”, en línea, 8-11 septiembre 2021. *Avances en Ingeniería Química*, Vol. 1, No. 3, pp. TER-64 a TER-67. ISSN: 2683-2925.

LGAC2_2021_ME03. *Estudio teórico y experimental de α -oligotiofenos protonados como posibles sensibilizadores de TiO₂/HY*, Alejandro Suárez-Méndez, Bertha Hernández-Suárez, Benito Serrano-Rosales, **Myrna H. Matus**, Victor M. Rivera, XLII Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “Desafíos Actuales en la Investigación y Docencia en Ingeniería Química, el Desarrollo Nacional y la Responsabilidad Social”, en línea, 8-11 septiembre 2021. *Avances en Ingeniería Química*, Vol. 1, No. 3, pp. MAT-162 a MAT-167. ISSN: 2683-2925.

LGAC2_2020_ME01. Diego Román-Montalvo, **Myrna H. Matus**, *Estudio de química computacional en la absorción de CO₂ con líquidos iónicos*, XLI Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “La Ingeniería Química, el Desarrollo Nacional y la Responsabilidad Social”, en línea, 22-24 octubre 2020. pp. TER-31 a TER-36. ISSN: 2683-2925.

LGAC2_2020_ME02. Oliver A. Landa-Gómez, **Myrna H. Matus**, *Estudio teórico sobre la termoquímica del proceso de formación del complejo de urea/D-fructosa con ibuprofeno*, XLI Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “La Ingeniería Química, el Desarrollo Nacional y la Responsabilidad Social”, en línea, 22-24 octubre 2020. pp. TER-86 a TER-90. ISSN: 2683-2925.

LGAC2_2019_ME01. Mauricio Méndez Torruco, **Myrna H. Matus**, *Estudio mediante química computacional de las interacciones entre solventes eutécticos y compuestos fenólicos*, Memorias del XL Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “Retos de la Ingeniería Química para el Desarrollo Nacional”, Huatulco, Oax., 7-10 mayo 2019. pp. TER-16 a TER-21. ISSN: 2683-2925.

LGAC2_2019_ME02. Diego Román Montalvo, **Myrna H. Matus**, *Estudio mediante química computacional de las interacciones entre líquidos iónicos y CO₂*, XL Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “Retos de la Ingeniería Química para el Desarrollo Nacional”, Huatulco, Oax., 7-10 mayo 2019. pp. TER-11 a TER-15. ISSN: 2683-2925.

LGAC2_2018_ME01. Mario A. Vera-Guzmán, **Myrna H. Matus**. *Estudio teórico de las interacciones entre líquidos iónicos y compuestos tipo flavonoide*, Memorias del XXXIX Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “La Ingeniería Química como motor de la innovación”, San José del Cabo, B. C. S., del 1 al 4 de mayo de 2018. pp. TER-106 a TER-110. ISBN: 978-607-95593-6-6.

LGAC2_2018_ME02. Maurizio A. Pantoja-Hernández, **Myrna H. Matus**. *Estudio teórico de las interacciones entre líquidos iónicos y compuestos fenólicos*, Memorias del XXXIX Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “La Ingeniería Química como motor de la innovación”, San José del Cabo, B. C. S., del 1 al 4 de mayo de 2018. pp. TER-100 a TER-105. ISBN: 978-607-95593-6-6.

LGAC2_2017_ME01. Diana Lucía Campa Guevara, Ana Cristina Ramírez Gallardo, **Zaira Domínguez**, **Magali Salas-Reyes**, **Myrna H. Matus**, Isidoro García-Cruz. *Estudio de dinámica molecular Born-Oppenheimer y estructura electrónica de cores aromáticos y líquidos iónicos*, Memorias del XXXVIII Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “La Ingeniería Química en el Desarrollo Sostenible de Nuevos Procesos y Productos”, Ixtapa Zihuatanejo, Gro., 9-12 de mayo de 2017. pp. TER-99 a TER-104. ISBN: 978-607-95593-5-9.

LGAC2_2016_ME01. Diana L. Campa-Guevara, **Zaira Domínguez**, **Magali Salas-Reyes**, **Myrna H. Matus**, José Manuel Domínguez. *Estudio Teórico de las Interacciones Intramoleculares presentes en Líquidos Iónicos Derivados de Imidazolio y Piridinio*, XXXVII Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “Nuevas Tecnologías y Tendencias en la Ingeniería Química”, Pto. Vallarta, Jal., Del 3 al 6 de mayo de 2016. TER-101 a TER-106. ISBN: 978-607-95593-4-2.

LGAC2_2016_ME02. Brenda Manzanilla-Viveros, **Zaira Domínguez**, **Magali Salas-Reyes**, **Myrna H. Matus**. *Estudio Conformacional del Ácido Cicórico y de la Curcumina*, XXXVII Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “Nuevas Tecnologías y Tendencias en la Ingeniería Química”, Pto. Vallarta, Jal., Del 3 al 6 de mayo de 2016. pp. TER-107 a TER-110. ISBN: 978-607-95593-4-2.

LGAC2_2015_ME01. Diana L. Campa-Guevara, **Zaira Domínguez**, **Magali Salas-Reyes**, **Myrna H. Matus**. *Interacción con PM3 de Moléculas de Líquidos Iónicos con Moléculas de Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos*, XXXVI Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “Retos de la Ingeniería Química en la Globalización”, Cancún, Q.R., Del 5 al 8 de mayo de 2015. pp. 2367-2372. ISBN: 978-607-95593-3-5.

LGAC2_2015_ME02. Brenda Manzanilla-Viveros, **Zaira Domínguez**, **Magali Salas-Reyes**, **Myrna H. Matus**. *Estudio Teórico con TFD entre Tiocianato de 1-butil-3-metilimidazolio e Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos*, XXXVI Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “Retos de la Ingeniería Química en la Globalización”, Cancún, Q.R., Del 5 al 8 de mayo de 2015. pp. 2329-2333. ISBN: 978-607-95593-3-5.

LGAC2_2014_ME01. Luis Ignacio Perea-Ramírez, Marcelo Galván, **Magali Salas-Reyes**, **Zaira Domínguez**, **Myrna H. Matus**. *Evaluación Teórica de la Interacción de Radicales Tipo Catecol y Guayacol sobre Superficies de Grafito*, XXXV Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “La Interdisciplinariedad en la Ingeniería Química”, Puerto Vallarta, Jal., Del 6 al 9 de mayo de 2014. pp. 2610-2615. ISBN: 978-607-95593-2-8.

LGAC2_2014_ME02. Brenda Manzanilla Viveros, **Zaira Domínguez**, **Magali Salas-Reyes**, **Myrna H. Matus**. *Interacción de una Molécula de Líquido Iónico con Naftaleno*, XXXV Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “La Interdisciplinariedad en la Ingeniería Química”, Puerto Vallarta, Jal., Del 6 al 9 de mayo de 2014. pp. 2433-2437. ISBN: 978-607-95593-2-8.

LGAC2_2013_ME01. Guillén-Villar, Roberto C.; Vargas, Rubicelia; Garza, Jorge; **Salas-Reyes, Magali**; **Domínguez, Zaira**; **Matus, Myrna H.** Evaluación de la Capacidad Antioxidante por medio de Índices de Reactividad de Derivados Tipo bis y tris de Ácido Ferúlico, XXXIV Encuentro Nacional y III Congreso Internacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química, Mazatlán, Sin., 7-10 Mayo 2013. pp. 1042–1046. ISBN: 978-607-95593-1-1.

LGAC2_2012_ME01. **Matus, M. H.**; Guillén-Villar, R. C.; Hernández-Guillermo, A.; Hernández-Pérez, P. I.; Tornero-Saldaña, J. A.; Morales-Cabrera, M. A. Computational chemistry study in the thermodynamics for the reaction of CO₂ and a series of amines using H₂O as a catalyst, Memorias del XXXIII Encuentro Nacional y II Congreso Internacional de la AMIDIQ: “La Ingeniería Química y La Sustentabilidad”, San José del Cabo, BCS, México 1 al 4 de Mayo del 2012, pp. 1664–1668. ISSN: 978-607-507-121-3.

LGAC2_2010_ME01. Medel Matus, J. S.; **Morales Ramos, F. R.**; Correa Basurto, J.; Saavedra Vélez, M. V.; Cruz Sánchez, J.S. Modelado y acoplamiento molecular de derivados de isoindolinas 2-sustituidas con variaciones estructurales en el anillo aromático al canal de calcio dependiente de voltaje tipo “L”. Evaluación del efecto anticonvulsivante del metil-(4-nitro-1,3-dihidro-2h-isoindol-2-il)-fenilacetato. Memorias del I Congreso Internacional de Docencia e Investigación en Química 2010, pp 1169-1182.

LGAC2_2010_ME02. Gasca Pérez, E.; **Ramos Morales, F. R.**; Correa Basurto, J.; Saavedra Vélez, M. V.; Cruz Sánchez, J. S. Estudio teórico por acercamiento molecular de algunas benzodiazocinas y benzazepinas al receptor GABA_A. Evaluación del posible efecto anticonvulsivante de la dibenzo(b,f)(1,4)diazocin-6,11(5H,12H)-diona. Memorias del I Congreso Internacional de Docencia e Investigación en Química 2010, pp 1199-1211.

Congresos nacionales e internacionales (C)

LGAC2_2023_C01. *Termodinámica de la desulfuración oxidativa de compuestos azufrados presentes en el crudo pesado*, Luis Ignacio Perea Ramírez, Paulino Zerón, Luis Ángel Zárate Hernández, Guadalupe Castro, Marco Franco Pérez, Julián Cruz, Marcelo Galván, **Myrna H. Matus**. XLIV Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química, A.C. (AMIDIQ), Huatulco, Oax., 30 mayo a 2 junio 2023.

LGAC2_2022_C01. *Density functional theory on the CO₂ absorption process with ionic liquids*, Diego Román-Montalvo, **Myrna H. Matus**, 14th International Symposium on Process Systems Engineering – PSE 2021+, Kyoto, Japan, June 19-23, 2022.

LGAC2_2022_C02. *Estudio teórico de la desulfuración de compuestos azufrados en combustibles fósiles*, Luis Ignacio Perea Ramírez, Paulino Guillermo Zerón Espinosa, José Marco Antonio Franco Pérez, **Myrna H. Matus**, Julián Cruz Borbolla. XX Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Cuernavaca, Mor., 17-19 noviembre 2022.

LGAC2_2022_C03. *Estudio teórico-computacional de la extracción de metabolitos secundarios presentes en la cáscara de café empleando líquidos iónicos*, Diego Román-Montalvo, **Myrna H. Matus**, XLIII Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “La Ingeniería Química, la Sostenibilidad y la Economía Circular”, Puerto Vallarta, Jal., México, 23-26 agosto 2022.

LGAC2_2022_C04. *Oxidative desulfurization of sulfur compounds present in crude oil: A DFT study*, Luis Ignacio Perea-Ramírez, Paulino Zerón, Marco Franco-Pérez, **Myrna H. Matus**, Julián Cruz. LatinXChem Twitter Conference, en línea, 28 noviembre 2022.

LGAC2_2022_C05. *Theoretical study on the non-covalent interactions between caffeine and ionic liquids as green solvents*, Diego Román-Montalvo y **Myrna H. Matus**. LatinXChem Twitter Conference, en línea, 28 noviembre 2022.

LGAC2_2022_C06. *Estudio teórico de la extracción de cafeína a partir de cáscara de café empleando LIs*, Diego Román Montalvo, **Myrna H. Matus**. 3er Simposio “Tópicos Selectos y Aplicaciones de la Química Analítica”, Twitter, 24 noviembre 2022.

LGAC2_2022_C07. *Estudio teórico de la extracción de compuestos policíclicos aromáticos con DEPs*, Carlos I. Oliva-López y **Myrna H. Matus**. XX Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Cuernavaca, Mor., 17-19 noviembre 2022.

LGAC2_2022_C08. *Evaluación de la solubilidad de las benzofenonas en DEPs derivados del L-mentol*, Juan Pablo M.-Sáenz, **Myrna H. Matus** y **Zaira Domínguez**. XX Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Cuernavaca, Mor., 17-19 noviembre 2022.

LGAC2_2022_C09. *Estudio teórico de la extracción de cafeína a partir de cáscara de café empleando LIs*, Diego Román-Montalvo y **Myrna H. Matus**. XX Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Cuernavaca, Mor., 17-19 noviembre 2022.

LGAC2_2021_C01. *Estudio Computacional Sobre la Interacción de un Nuevo Péptido Cíclico formado por Diketopiperazinas como Co-formador del Fármaco Fenofibrato*. Ponce Román, O. D.; Domínguez Chávez, J. G.; Mondragón Vásquez, K.; **Mendoza López, M. R.**; **García-Barradas, O.** 2º congreso Internacional de Química, Sustentabilidad Energética y Ambiental “Dr. Mario Molina Henríquez”. 6 a 10 de diciembre de 2021. Universidad Juárez Autónoma de Tabasco.

LGAC2_2021_C02. *Estudio Computacional de Diketopiperazinas Fluorescentes Obtenidas a Partir de aminoácidos Naturales*. Hernández Méndez, J. J. P.; **Mendoza-López, M. R.**; **García-Barradas, O.** #LatinXChem Twitter Conference 2021, 20 de septiembre de 2021.

LGAC2_2021_C03. *Estudio Computacional del Efecto de la Transferencia Fotoinducida de electrones (PET) en Péptidos Fluorescentes*. Hernández-Méndez, J. J. P.; **Mendoza López, M. R.**; **García Barradas, O.** 2º Simposio “Tópicos Selectos y Aplicaciones de la Química analítica”, 29 de octubre de 2021, Facultad de QFB, Universidad Veracruzana, Xalapa, Ver.

LGAC2_2021_C04. *Estudio teórico de las interacciones entre el complejo de urea/D-galactosa con ibuprofeno*, Oliver A. Landa, **Myrna H. Matus**. XIX Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, en línea, 18 y 19 noviembre 2021.

LGAC2_2021_C05. *Estudio teórico-computacional de la extracción de metabolitos secundarios presentes en la cáscara de café empleando líquidos iónicos, Diego Román Montalvo, **Myrna H. Matus**. XIX Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, en línea, 18 y 19 noviembre 2021.*

LGAC2_2021_C06. *Estudio teórico de las interacciones entre el complejo de urea/D-galactosa con ibuprofeno, Oliver A. Landa, **Myrna H. Matus**. 2° Simposio “Tópicos Selectos y Aplicaciones de la Química Analítica”, en línea, 28 octubre 2021.*

LGAC2_2021_C07. *Estudio teórico-computacional de la extracción de metabolitos secundarios presentes en la cáscara de café empleando líquidos iónicos, Diego Román Montalvo, **Myrna H. Matus**. 2° Simposio “Tópicos Selectos y Aplicaciones de la Química Analítica”, en línea, 28 octubre 2021.*

LGAC2_2021_C08. *Estudio teórico y experimental de α -oligotiofenos protonados como posibles sensibilizadores de TiO_2/HY , Alejandro Suárez-Méndez, Bertha Hernández-Suárez, Benito Serrano-Rosales, **Myrna H. Matus**, Victor M. Rivera. 2° Simposio “Tópicos Selectos y Aplicaciones de la Química Analítica”, en línea, 28 octubre 2021.*

LGAC2_2021_C09. *Theoretical study on the interactions between ionic liquids and CO_2 including the solvent effect, Diego Román-Montalvo y **Myrna H. Matus**. LatinXChem Twitter Conference, en línea, 20 septiembre 2021.*

LGAC2_2021_C10. *Theoretical study on the interactions between ibuprofen and D-galactose/urea, Oliver A. Landa y **Myrna H. Matus**. LatinXChem Twitter Conference, en línea, 20 septiembre 2021.*

LGAC2_2021_C11. *Protonated α -oligothiophenes as potential sensitizers for TiO_2 supported on protonic zeolite Y – An experimental and theoretical study, Alejandro Suárez-Méndez, **Myrna H. Matus**, Victor M. Rivera. LatinXChem Twitter Conference, en línea, 20 septiembre 2021.*

LGAC2_2021_C12. *Estudio de teórico de la absorción de CO_2 empleando líquidos iónicos como disolventes verdes, Diego Román-Montalvo, **Myrna H. Matus**, XLII Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “Desafíos Actuales en la Investigación y Docencia en Ingeniería Química, el Desarrollo Nacional y la Responsabilidad Social”, en línea, 8-11 septiembre 2021.*

LGAC2_2021_C13. *Estudio teórico sobre las interacciones presentes en el complejo de urea/D-fructosa con ibuprofeno, Oliver A. Landa, **Myrna H. Matus**, XLII Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “Desafíos Actuales en la Investigación y Docencia en Ingeniería Química, el Desarrollo Nacional y la Responsabilidad Social”, en línea, 8-11 septiembre 2021.*

LGAC2_2021_C14. *Estudio teórico y experimental de α -oligotiofenos protonados como posibles sensibilizadores de TiO_2/HY , Alejandro Suárez-Méndez, Bertha Hernández-Suárez, Benito Serrano-Rosales, **Myrna H. Matus**, Victor M. Rivera, XLII Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “Desafíos Actuales en la Investigación y Docencia en Ingeniería Química, el Desarrollo Nacional y la Responsabilidad Social”, en línea, 8-11 septiembre 2021.*

LGAC2_2021_C15. *Estudio teórico y experimental de α -oligotiofenos protonados como posibles sensibilizadores de TiO_2/HY , Alejandro Suárez-Méndez, **Myrna H. Matus**, Victor M. Rivera, 9° Simposio Nacional y 2° Internacional de Ingeniería Química y Bioquímica Aplicada, en línea, 30 agosto al 1 de septiembre 2021.*

LGAC2_2020_C01. Diego Román-Montalvo y **Myrna H. Matus**. Estudio con química computacional de las interacciones entre líquidos iónicos y CO₂, #LatinXChem Twitter Conference 2020, Septiembre 7, 2020.

LGAC2_2020_C02. Oliver A. Landa-Gómez, y **Myrna H. Matus**. Estudio teórico sobre la termoquímica del proceso de formación del complejo de urea/D-fructosa con ibuprofeno, #LatinXChem Twitter Conference 2020, Septiembre 7, 2020.

LGAC2_2020_C03. Karina Pitalu Ortiz Falfan, **Zaira J. Domínguez Esquivel** y **Myrna H. Matus**. Estudio teórico de la extracción de quercetina de las hojas de *Psidium guajava* mediante disolventes verdes, #LatinXChem Twitter Conference 2020, Septiembre 7, 2020.

LGAC2_2020_C04. Diego Román-Montalvo, **Myrna H. Matus**, *Estudio de química computacional en la absorción de CO₂ con líquidos iónicos*, XLI Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “La Ingeniería Química, el Desarrollo Nacional y la Responsabilidad Social”, en línea, 22-24 octubre 2020.

LGAC2_2020_C05. Mauricio Méndez-Torruco, **Myrna H. Matus**, *Estudio teórico de las interacciones entre disolventes eutécticos profundos y compuestos fenólicos*, XLI Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “La Ingeniería Química, el Desarrollo Nacional y la Responsabilidad Social”, en línea, 22-24 octubre 2020.

LGAC2_2020_C06. Oliver A. Landa-Gómez, **Myrna H. Matus**, *Estudio teórico sobre la termoquímica del proceso de formación del complejo de urea/D-fructosa con ibuprofeno*, XLI Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “La Ingeniería Química, el Desarrollo Nacional y la Responsabilidad Social”, en línea, 22-24 octubre 2020.

LGAC2_2019_C01. Mauricio Méndez Torruco, **Myrna H. Matus**, *Estudio mediante química computacional de las interacciones entre solventes eutécticos y compuestos fenólicos*, XL Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “Retos de la Ingeniería Química para el Desarrollo Nacional”, Huatulco, Oax., 7-10 mayo 2019.

LGAC2_2019_C02. Diego Román Montalvo, **Myrna H. Matus**, *Estudio mediante química computacional de las interacciones entre líquidos iónicos y CO₂*, XL Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “Retos de la Ingeniería Química para el Desarrollo Nacional”, Huatulco, Oax., 7-10 mayo 2019.

LGAC2_2019_C03. Mauricio Méndez Torruco, **Myrna H. Matus**. *Estudio teórico de las interacciones entre disolventes eutécticos profundos y compuestos fenólicos*, XVIII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Universidad Autónoma del Estado de México, Toluca, Edo. Méx., 24-26 octubre 2019.

LGAC2_2019_C04. Diego Román Montalvo, **Myrna H. Matus**. *Estudio teórico de las interacciones entre líquidos iónicos y CO₂ empleando TFD*, XVIII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Universidad Autónoma del Estado de México, Toluca, Edo. Méx., 24-26 octubre 2019.

LGAC2_2018_C01. Alejandra T. Cadillo-Martínez, Edgar Núñez-Rojas, **Myrna H. Matus**, José Alejandre, *Estudio mediante dinámica molecular de la interacción entre líquidos iónicos y pinocembrina*, XVII Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Tecnológico de Monterrey, Mty., N.L., del 22 al 24 de noviembre de 2018.

LGAC2_2018_C02. Jahaziel Domínguez Sánchez, Edgar Núñez-Rojas, **Myrna H. Matus**, José Alejandre, *Estudio mediante dinámica molecular clásica de líquidos iónicos y pinobanksina*, XVII Reunión

Mexicana de Fisiología Teórica, Tecnológico de Monterrey, Mty., N.L., del 22 al 24 de noviembre de 2018.

LGAC2_2018_C03. Maurizio A. Pantoja-Hernández, **Myrna H. Matus**, *Estudio teórico del efecto de los líquidos iónicos en la oxidación de compuestos fenólicos*, XVII Reunión Mexicana de Fisiología Teórica, Tecnológico de Monterrey, Mty., N.L., del 22 al 24 de noviembre de 2018.

LGAC2_2018_C04. Alejandra T. Cadillo-Martínez, Edgar Núñez-Rojas, **Myrna H. Matus**, José Alejandro, *Molecular dynamics study on the interaction between ionic liquids and pinocembrin*, 10th Meeting on Molecular Simulations: From simple fluids to chemical reactions, Cuernavaca, Mor., del 8 al 10 de noviembre de 2018.

LGAC2_2018_C05. Jahaziel Domínguez-Sánchez, Edgar Núñez-Rojas, **Myrna H. Matus**, José Alejandro, *Classical molecular dynamics study on ionic liquids and pinobanksin*, 10th Meeting on Molecular Simulations: From simple fluids to chemical reactions, Cuernavaca, Mor., del 8 al 10 de noviembre de 2018.

LGAC2_2018_C06. Mario A. Vera-Guzmán, **Myrna H. Matus**. *Estudio teórico de las interacciones entre líquidos iónicos y compuestos tipo flavonoide*, XXXIX Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “La Ingeniería Química como motor de la innovación”, San José del Cabo, B. C. S., del 1 al 4 de mayo de 2018.

LGAC2_2018_C07. Maurizio A. Pantoja-Hernández, **Myrna H. Matus**. *Estudio teórico de las interacciones entre líquidos iónicos y compuestos fenólicos*, XXXIX Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “La Ingeniería Química como motor de la innovación”, San José del Cabo, B. C. S., del 1 al 4 de mayo de 2018.

LGAC2_2018_C08. Mario A. Vera Guzmán, **Myrna H. Matus**. *Estudio teórico de las interacciones entre líquidos iónicos y compuestos tipo flavonoide*, XVI Reunión Mexicana de Fisiología Teórica, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, Pue., 16-18 noviembre 2017.

LGAC2_2018_C09. Maurizio A. Pantoja-Hernández, **Myrna H. Matus**. *Estudio teórico de las interacciones entre líquidos iónicos y compuestos fenólicos*, XVI Reunión Mexicana de Fisiología Teórica, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, Pue., 16-18 noviembre 2017.

LGAC2_2018_C10. José Sergio Durand Niconoff, **Myrna H. Matus**., Sergio Francisco Juárez Cerrillo, Francisco Meléndez, *Un modelo estadístico de la apoptosis inducida por hidroxycumarinas en una línea celular de leucemia*, XVI Reunión Mexicana de Fisiología Teórica, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, Pue., 16-18 noviembre 2017.

LGAC2_2017_C01. Diana Lucía Campa Guevara, Ana Cristina Ramírez Gallardo, **Zaira Domínguez**, **Magali Salas-Reyes**, **Myrna H. Matus**, Isidoro García-Cruz. *Estudio de dinámica molecular Born-Oppenheimer y estructura electrónica de cores aromáticos y líquidos iónicos*, XXXVIII Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “La Ingeniería Química en el Desarrollo Sostenible de Nuevos Procesos y Productos”, Ixtapa Zihuatanejo, Gro., 9-12 de mayo de 2017.

LGAC2_2017_C02. Maurizio A. Pantoja-Hernández, **Myrna H. Matus**, **Zaira Domínguez**. *Estudio teórico de las interacciones entre acetato de 1-etil-3-metilimidazolio y el éster bencílico del ácido cafeico (CABE)*, 1ª Exposición de Carteles de Alumnos y Egresados de la Maestría en Química Bioorgánica, Unidad SARA, Universidad Veracruzana, Xalapa, Veracruz, 4 de Enero 2017.

LGAC2_2017_C03. Diana L. Campa-Guevara, Zaira Domínguez, Magali Salas-Reyes, Myrna H. Matus, J. M. Domínguez, Isidoro García Cruz. *Estudio teórico de las interacciones intermoleculares presentes entre líquidos iónicos de imidazolio y piridinio e hidrocarburos aromáticos*, 1ª Exposición de carteles de alumnos y egresados de la Maestría en Química Bioorgánica, Unidad de Servicios y Apoyo en Resolución Analítica (SARA), Universidad Veracruzana, Xalapa, Ver., 4 Enero 2017.

LGAC2_2017_C04. Brenda Manzanilla-Viveros, Zaira Domínguez, Magali Salas-Reyes, Myrna H. Matus, José Manuel Domínguez Esquivel. *Estudio teórico-experimental con TFD entre el tiocianato de 1-butil-3-metilimidazolio e hidrocarburos aromáticos policíclicos*, 1ª Exposición de carteles de alumnos y egresados de la Maestría en Química Bioorgánica, SARA, Universidad Veracruzana, Xalapa, Ver., 4 Enero 2017.

LGAC2_2016_C01. Maurizio A. Pantoja-Hernández, Myrna H. Matus, Zaira Domínguez. *Estudio teórico de las interacciones entre acetato de 1-etil-3-metilimidazolio y el éster bencílico del ácido cafeico (CABE)*, XV Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Cinvestav, Mérida, Yucatán, 17-19 Noviembre 2016.

LGAC2_2016_C02. Diana L. Campa-Guevara, Zaira Domínguez, Magali Salas-Reyes, Myrna H. Matus, J. M. Domínguez, Isidoro García Cruz. *Estudio teórico de las interacciones intermoleculares presentes entre líquidos iónicos de imidazolio y piridinio e hidrocarburos aromáticos*, XV Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Unidad Mérida, Mérida, Yucatán, 17-19 Noviembre 2016.

LGAC2_2016_C03. Brenda Manzanilla-Viveros, Zaira Domínguez, Magali Salas-Reyes, Myrna H. Matus, José Manuel Domínguez Esquivel. *Estudio teórico-experimental con TFD entre el tiocianato de 1-butil-3-metilimidazolio e hidrocarburos aromáticos policíclicos*, XV Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Unidad Merida, Mérida, Yucatán, 17-19 Noviembre 2016.

LGAC2_2016_C04. Eduardo Castro-Zárata, J. Sergio Durand-Niconoff, Myrna H. Matus, Rafael Ramos-Morales, Francisco J. Meléndez. *Estudio de reactividad local mediante similitud cuántica en sistemas orgánicos con estructura común*, XV Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados Unidad Mérida, Mérida, Yucatán, 17-19 Noviembre 2016.

LGAC2_2016_C05. Luis Ignacio Perea-Ramírez, Rubicelia Vargas-Fosada, Zaira Domínguez, Magali Salas-Reyes, Myrna H. Matus, Marcelo Galván. *Theoretical Study of the Adsorption of Substituted Catechol and Guaiacol Radicals on a Graphite Surface*, MicroEchem 2016 – Energy Storage Discussions, Querétaro, Qro., 7-9 Noviembre 2016. **1er Lugar en la Modalidad de Cartel.**

LGAC2_2016_C06. Maurizio Alejandro Pantoja Hernández, Zaira Domínguez, Myrna H. Matus. *Estudio Teórico de las Interacciones entre Líquidos Iónicos y el Éster Bencílico del Ácido Cafeico (CABE)*, 12a Reunión Internacional en Investigación en Productos Naturales, Universidad Veracruzana, Xalapa, Ver., 18-20 Mayo 2016.

LGAC2_2016_C07. Eduardo Castro Zárata, J. Sergio Durand Niconoff, Myrna H. Matus, F. Rafael Ramos Morales, Francisco J. Meléndez Bustamante. *Estudio de Reactividad mediante Similitud Cuántica en Anhídrido Isatoico y Derivados*, 12a Reunión Internacional en Investigación en Productos Naturales, Universidad Veracruzana, Xalapa, Ver., 18-20 Mayo 2016.

LGAC2_2016_C08. Brenda Manzanilla-Viveros, Zaira Domínguez, Magali Salas-Reyes, Rubicelia Vargas, Jorge Garza, **Myrna H. Matus.** *Estudio Teórico del Ácido Cícórico y de la Curcumina*, 12a Reunión Internacional en Investigación en Productos Naturales, Universidad Veracruzana, Xalapa, Ver., 18-20 Mayo 2016.

LGAC2_2016_C09. Diana L. Campa-Guevara, Zaira Domínguez, Magali Salas-Reyes, **Myrna H. Matus,** José Manuel Domínguez. *Estudio Teórico de las Interacciones Intramoleculares presentes en Líquidos Iónicos Derivados de Imidazolio y Piridinio*, XXXVII Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “Nuevas Tecnologías y Tendencias en la Ingeniería Química”, Pto. Vallarta, Jal., Del 3 al 6 de mayo de 2016.

LGAC2_2016_C10. Brenda Manzanilla-Viveros, Zaira Domínguez, Magali Salas-Reyes, **Myrna H. Matus.** *Estudio Conformacional del Ácido Cícórico y de la Curcumina*, XXXVII Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “Nuevas Tecnologías y Tendencias en la Ingeniería Química”, Pto. Vallarta, Jal., Del 3 al 6 de mayo de 2016.

LGAC2_2015_C01. Eduardo Castro-Zárata, J. Sergio Durand-Niconoff, Myrna H. Matus, **Rafael Ramos-Morales.** *Estudio Teórico de la Reactividad Local del Anhídrido Isatoico*, XIV Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Universidad Autónoma de Guadalajara, Guadalajara, Jal., 19-21 Noviembre 2015.

LGAC2_2015_C02. Diana L. Campa-Guevara, Zaira Domínguez, Magali Salas-Reyes, **Myrna H. Matus,** J. M. Domínguez. *Estudio Teórico de las Interacciones Intramoleculares de Líquidos Iónicos Derivados de Imidazolio y Piridinio*, XIV Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Universidad Autónoma de Guadalajara, Guadalajara, Jal., 19-21 Noviembre 2015.

LGAC2_2015_C03. Brenda Manzanilla-Viveros, Zaira Domínguez, Magali Salas-Reyes, Rubicelia Vargas, Jorge Garza, **Myrna H. Matus.** *Estudio AIM del Ácido Cícórico y de la Curcumina*, XIV Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Universidad Autónoma de Guadalajara, Guadalajara, Jal., 19-21 Noviembre 2015.

LGAC2_2015_C04. Diana L. Campa-Guevara, Zaira Domínguez, Magali Salas-Reyes, **Myrna H. Matus.** *Interacción con PM3 de Moléculas de Líquidos Iónicos con Moléculas de Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos*, XXXVI Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “Retos de la Ingeniería Química en la Globalización”, Cancún, Q.R., Del 5 al 8 de mayo de 2015.

LGAC2_2015_C05. Brenda Manzanilla-Viveros, Zaira Domínguez, Magali Salas-Reyes, **Myrna H. Matus.** *Estudio Teórico con TFD entre Tiocianato de 1-butil-3-metilimidazolio e Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos*, XXXVI Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “Retos de la Ingeniería Química en la Globalización”, Cancún, Q.R., Del 5 al 8 de mayo de 2015.

LGAC2_2014_C01. Brenda Manzanilla Viveros, Zaira Domínguez, Magali Salas-Reyes, **Myrna H. Matus.** *Estudio Teórico con TFD entre Líquidos Iónicos e Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos*, XIII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Universidad Nacional Autónoma de México, Unidad Morelia, Morelia, Mich., 5-8 Noviembre 2014.

LGAC2_2014_C02. Luis Ignacio Perea Ramírez, Marcelo Galván Espinosa, Zaira Domínguez **Esquivel, Magali Salas Reyes, Myrna H. Matus.** *Evaluación Teórica de la Interacción de Sistemas Radicales Derivados de Catecol y Guayacol sobre Superficies de Grafito*, XIII Reunión Mexicana de

Fisicoquímica Teórica, Universidad Nacional Autónoma de México, Unidad Morelia, Morelia, Mich., 5-8 Noviembre 2014.

LGAC2_2014_C03. M. H. Matus, L. I. Perea-Ramírez, R. C. Guillén Villar, M. Salas-Reyes, Z. Domínguez, R. Vargas, M. Galván. *Theoretical Study of New Derivatives of Ferulic Acid*. 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC 2014, Santiago, Chile, 5-10 Octubre 2014.

LGAC2_2014_C04. Fernando Rafael Ramos Morales, Aracely Eufemia Romero López, Rosa Virginia García Rodríguez, Myrna Hernández Matus, Jesús Samuel Cruz Sánchez, José Correa Basurto. Estudios de acoplamiento molecular del Anhídrido isatoico sobre las enzimas COX-2, PLA2s y 5-LOX, para tratar de inferir su posible efecto antiinflamatorio. 49° Congreso Mexicano de Química y 33° Congreso Nacional de Educación Química, 17 al 21 de septiembre de 2014, Mérida, Yucatán.

LGAC2_2014_C05. Luis Ignacio Perea-Ramírez, Marcelo Galván, Magali Salas-Reyes, Zaira Domínguez, Myrna H. Matus. *Evaluación Teórica de la Interacción de Radicales Tipo Catecol y Guayacol sobre Superficies de Grafito*, XXXV Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “La Interdisciplinariedad en la Ingeniería Química”, Puerto Vallarta, Jal., Del 6 al 9 de mayo de 2014.

LGAC2_2014_C06. Brenda Manzanilla Viveros, Zaira Domínguez, Magali Salas-Reyes, Myrna H. Matus. *Interacción de una Molécula de Líquido Iónico con Naftaleno*, XXXV Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química “La Interdisciplinariedad en la Ingeniería Química”, Puerto Vallarta, Jal., Del 6 al 9 de mayo de 2014.

LGAC2_2013_C01. Brenda Manzanilla Viveros, Zaira Domínguez Esquivel, Magali Salas Reyes, Myrna H. Matus. *Interacción de una Molécula de Líquido Iónico con Naftaleno*, XII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Universidad Nacional Autónoma de México, Unidad Juriquilla, Juriquilla, Qro., 13-16 Noviembre 2013.

LGAC2_2013_C02. Luis Ignacio Perea Ramírez, Marcelo Galván Espinosa, Zaira Domínguez Esquivel, Magali Salas Reyes, Myrna H. Matus. *Evaluación Teórica de la Interacción de Radicales de Derivados de Ácido Cafeico y Ácido Ferúlico sobre Superficies de Grafito*, XII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Universidad Nacional Autónoma de México, Unidad Juriquilla, Juriquilla, Qro., 13-16 Noviembre 2013.

LGAC2_2013_C03. Roberto C. Guillén-Villar, Rubicelia Vargas, Jorge Garza, Magali Salas-Reyes, Zaira Domínguez, Myrna H. Matus. *Estudio Electroquímico y Teórico de la Capacidad Antioxidante de Derivados Éster Tipo bis y tris de Ácido Ferúlico*, XII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Universidad Nacional Autónoma de México, Unidad Juriquilla, Juriquilla, Qro., 13-16 Noviembre 2013.

LGAC2_2013_C04. Guillén-Villar, Roberto C.; Vargas, Rubicelia; Garza, Jorge; Salas-Reyes, Magali; Domínguez, Zaira; Matus, Myrna H. Evaluación de la Capacidad Antioxidante por medio de Índices de Reactividad de Derivados Tipo bis y tris de Ácido Ferúlico, XXXIV Encuentro Nacional y III Congreso Internacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química, Mazatlán, Sin., 7-10 Mayo 2013.

LGAC2_2013_C05. Guillén-Villar, Roberto C.; Vargas, Rubicelia; Garza, Jorge; Salas-Reyes, Magali; Domínguez, Zaira; Matus; Myrna H. Estudio Teórico-Experimental de la Capacidad

Antioxidante de Derivados bis y tris de Ácido Ferúlico 9ª Reunión de la Academia Mexicana de Química Orgánica, Universidad Veracruzana, Campus Veracruz-Boca del Río, Boca del Río, Ver., 24-26 Abril 2013.

LGAC2_2012_C01. Romero López A. E.; **Ramos Morales F. R.**; Cuevas Hernández R. I.; Correa Basurto J.; **García Rodríguez R. V.** Análisis *in silico* de derivados de Anhídrido Isatoico con la enzima Fosfolipasa A2 de secreción. XI Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. Toluca de Lerdo, Estado de México. 8-10 Noviembre 2012.

LGAC2_2012_C02. Daniel Morales Martínez, J. Sergio Durand Niconoff, **Myrna H. Matus, Zaira Domínguez, Magali Salas-Reyes.** *Caracterización Mediante QTAIM de los Puentes de Hidrógeno en los Sistemas Moleculares Menadiona-Etilguanina, Menadiona-Metiltimina*, XI Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Universidad Autónoma del Estado de México, Toluca, Edo. de Mex., 8-10 Noviembre 2012.

LGAC2_2012_C03. Roberto C. Guillén-Villar, Rubicelia Vargas, Jorge Garza, **Magali Salas-Reyes, Zaira Domínguez, Myrna H. Matus.** Evaluación Teórica de la Capacidad Antioxidante de Derivados Tipo bis y tris de Ácido Ferúlico, XI Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Universidad Autónoma del Estado de México, Toluca, Edo. de Mex., 8-10 Noviembre 2012.

LGAC2_2012_C04. Luis Ignacio Perea-Ramírez, Analilia Sánchez-García, **Magali Salas-Reyes, Zaira Domínguez, Myrna H. Matus.** Evaluación de Mecanismos Relacionados con la Capacidad Antioxidante de Sistemas bis-amida de Ácido Ferúlico, XI Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Universidad Autónoma del Estado de México, Toluca, Edo. de Mex., 8-10 Noviembre 2012.

LGAC2_2012_C05. Andrés Tornero-Saldaña, Roberto C. Guillén-Villar, Anahí Hernández-Guillermo, Pedro I. Hernández-Pérez, Miguel A. Morales-Cabrera, **Myrna H. Matus.** Estudio de la Absorción de CO₂ a través de Aminas en Presencia de H₂O, XI Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Universidad Autónoma del Estado de México, Toluca, Edo. de Mex., 8-10 Noviembre 2012.

LGAC2_2012_C06. Jesús Servando Medel-Matus, **Fernando Rafael Ramos-Morales**, José Correa-Basurto, **Myrna H. Matus**, Ma. Leonor López Meraz, Margarita V. Saavedra-Vélez, Teresa Mancilla-Percino, Jesús Samuel Cruz-Sánchez. *Estudio Teórico, Síntesis y Evaluación de la Actividad Anticonvulsivante de un Nuevo Derivado de Isoindolinas 2-sustituidas*, Congreso del XX Aniversario del Instituto de Neurootología, Universidad Veracruzana, Xalapa, Ver., 29-31 Agosto 2012.

LGAC2_2012_C07. **Matus, M. H.**; Guillén-Villar, R. C.; Hernández-Guillermo, A.; Hernández-Pérez, P. I.; Tornero-Saldaña, J. A.; Morales-Cabrera, M. A. Computational chemistry study in the thermodynamics for the reaction of CO₂ and a series of amines using H₂O as a catalyst, Memorias del XXXIII Encuentro Nacional y II Congreso Internacional de la AMIDIQ: "La Ingeniería Química y La Sustentabilidad", San José del Cabo, BCS, México I al 4 de Mayo del 2012.

LGAC2_2011_C01. **M. H. Matus, R. C. Guillén-Villar, L. I. Perea-Ramírez, J. Hernández, M. Salas-Reyes, Z. Domínguez.** La Química Computacional en el Estudio de Moléculas con Posible Actividad Biológica (Computational Chemistry in the Study of Molecules with Possible Biological Activity). XXXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 2011), Riviera Maya, Cancún, Q. R., 4-9 Diciembre 2011.

LGAC2_2011_C02. Guillén-Villar, R. C.; Virués, C.; **Domínguez Esquivel, Z. J.; Matus, M. H.** Búsqueda conformacional de derivados de ácidos fenólicos y de un compuesto tipo ciclofano para

su posterior formación de complejos. X Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. Pachuca, Hgo., México. 10-12 de noviembre de 2011.

LGAC2_2011_C03. Perea-Ramírez, L. I.; **Domínguez Esquivel, Z. J.**; **Salas Reyes, M.**; **Matus, M. H.** Estudio mediante química computacional de los compuestos de xililendiamina y 1,3-fenilendiamina. X Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica. Pachuca, Hgo., México. 10-12 de noviembre de 2011.

LGAC2_2010_C01. Medel Matus, J. S.; **Morales Ramos, F. R.**; Correa Basurto, J.; Saavedra Vélez, M. V.; Cruz Sánchez, J.S. Modelado y acoplamiento molecular de derivados de isoindolinas 2-sustituidas con variaciones estructurales en el anillo aromático al canal de calcio dependiente de voltaje tipo "L". Evaluación del efecto anticonvulsivante del metil-(4-nitro-1,3-dihidro-2h-isoindol-2-il)-fenilacetato. I Congreso Internacional de Docencia e Investigación en Química 2010.

LGAC2_2010_C02. Gasca Pérez, E.; **Ramos Morales, F. R.**; Correa Basurto, J.; Saavedra Vélez, M. V.; Cruz Sánchez, J. S. Estudio teórico por acercamiento molecular de algunas benzodiazocinas y benzazepinas al receptor GABA_A. Evaluación del posible efecto anticonvulsivante de la dibenzo(b,f)(1,4)diazocin-6,11(5H,12H)-diona. I Congreso Internacional de Docencia e Investigación en Química 2010.

LGAC2_2008_C01. Melendez, F. J.; **Ramos Morales, R.**; Durand, J. S.; Muñoz, C.; Niño, A. Theoretical study of reactivity base on the hard-soft/acid-base (HSAB) in isatoic anhydride and some derivatives. Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA) 2008.