







0000-0002-4836-233X ORC ID

Norma Flores-Holguin ARXIV Author ID

NORMA ROSARIO FLORES HOLGUIN

No.CVU 38306

INFORMACIÓN GENERAL

CURP

FOHN631031MCHLLR09

RFC

FOHN631031R27

SEXC

Femenino

DOMICILIO

O CHIH , Cp. 31207

FECHA NACIMIENTO 1963-10-31

PAÍS DE NACIMIENTO

México

NACIONALIDAD [△] Mexicana

_ ESTADO CIVIL

图 Casado(a)

CONTACTO

CORREO PRINCIPAL
norma.flores@cimav.edu.

MÓVIL PRINCIPAL

TELÉFONO PRINCIPAL \$ 526141607210

IDIOMAS

ENGLISH

Intermedio · Certificado

EMPLEO ACTUAL

2017-02-01

TECNICO TITULAR C

CENTRO DE INVESTIGACION EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. (CIMAV) 84 publicaciones en revistas indexadas y memorias de congresos y 10 capítulos de libro. Pláticas impartidas a nivel nacional e internacional y revisor en más de 26 revistas científicas internacionales. Docente con más de 20 cursos de especialidad en el área de modelado molecular y la supervisión de 19 tesis de licenciatura, maestría y doctorado en el área de materiales y medio ambiente y energía. 3 doctores en ciencias, 8 maestros en ciencias y tres licenciados en diferentes especialidades graduados.

TRAYECTORIA ACADÉMICA

DOCTORADO DOCTOR EN CIENCIAS DE MATERIALES

GRADO OBTENIDO

CENTRO DE INVESTIGACION EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. (CIMAV)

MAESTRÍA MAESTRIA EN CIENCIAS DE MATERIALES

GRADO OBTENIDO

CENTRO DE INVESTIGACION EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. (CIMAV)

LICENCIATURA INGENIERO GEOLOGO

GRADO OBTENIDO

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE CHIHUAHUA

LOGROS

2018 CENTRO DE INVESTIGACION EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. (CIMAV)
MÉXICO

MEXICO

COORDINADOR DE SEMINARIOS DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA AMBIENTAL

Designación del Comité de estudios de posgrado del Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C. como coordinadora de los seminarios que se imparten a los alumnos inscritos en los programas de Maestría y Doctorado en Ciencia y Tecnología Ambiental del centro.

2017 INSTITUTO TECNOLOGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES DE MONTERREY

MÉXICO

ORGANIZADOR

Organizador del BioHack, evento organizado por la academia de Ciencias Básicas y ciencias de la Salud del Tecnológico de Monterrey, campus Chihuahua

2017 INSTITUTO TECNOLOGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES DE MONTERREY

MÉXICO

PONENTE INVITADO

Ponente Invitado en el Foro Café ConCiencia organizado por la sociedad de alumnos de la carrera de Ingeniería en Biotecnología

2016 INSTITUTO TECNOLOGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES DE MONTERREY

MÉXICO

ASESOR

Asesor del equipo participante por el Tecnológico de Monterrey campus Chihuahua en el

	concurso 2016 International Genetically Engineered Machine con el proyecto. The Carbon Carriers: Cell Transformation and Transfection by Carbon Nanotubes, a New Nanotechnology Strategy
2015	CENTRO DE INVESTIGACION EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. (CIMAV) MÉXICO
	REDISEÑO DEL PLAN DE ESTUDIOS DE LA MAESTRÍA EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA AMBIENTAL
	Reconocimiento a la participación en el rediseño del programa de estudios de la maestría en Ciencia y Tecnología Ambiental del Programas de posgrado del CIMAV
2015	INSTITUTO TECNOLOGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES DE MONTERREY MÉXICO
	PONENTE INVITADO
	Ponente Invitado en el Foro 4o Café ConCiencia de la carrera de Ingeniería en Biotecnología
2014	UNIVERSIDAD DE PAMPLONA COLOMBIA
	PONENTE INTERNACIONAL INVITADO
	Ponente Internacional Invitado en el Primer Simposio Internacional de Ingeniería Química
2013	UNIVERSIDAD AUTONOMA DEL ESTADO DE HIDALGO MÉXICO ORGANIZADOR
	Miembro del Comité Nacional organizador de la Décima segunda Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica
2013	INSTITUTO TECNOLOGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES DE MONTERREY MÉXICO
	EVALUADOR
	Evaluador de prototipos 3D de la primera ExpoIBTec
2013	INSTITUTO TECNOLOGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES DE MONTERREY MÉXICO
	GANADOR DEL SEGUNDO LUGAR CONCURSO DEL PREMIO AL PROYECTO INNOVADOR DE NEGOCIOS VERDES
	Segundo Lugar en el concurso del Premio al Proyecto Innovador de Negocios Verdes con el Proyecto "Cartón de hojarasca".
2013	UNIVERSIDAD AUTONOMA DE BAJA CALIFORNIA MÉXICO
	EVALUADOR
	Evaluador de varios proyectos de la 17a Convocatoria Interna de Proyectos de Investigación en el área de Ciencias de la Ingeniería y Tecnología
2013	INSTITUTO TECNOLOGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES DE MONTERREY MÉXICO
	MIEMBRO DE COMITÉ EDITORIAL
	Miembro del Consejo Editorial de la Revista del Parque de Innovación y Transferencia de Tecnología, PIT2. Dedicada a incentivar la cultura en creación y transferencia de conocimientos

	en áreas tecnológicas y de innovación.
2012	UNIVERSIDAD AUTONOMA DEL ESTADO DE MEXICO MÉXICO
	ORGANIZADOR
	Miembro del Comité Nacional organizador de la Décima primera Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica
2011	UNIVERSIDAD AUTONOMA DEL ESTADO DE HIDALGO MÉXICO
	MODERADOR
	Moderador de la Décima Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica
2011	UNIVERSIDAD AUTONOMA DEL ESTADO DE HIDALGO MÉXICO
	MIEMBRO DEL COMITÉ NACIONAL
	Miembro del Comité Nacional organizador de la Décima Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica
2010	UNIVERSIDAD AUTONOMA DE CHIHUAHUA MÉXICO
	EVALUADOR
	EVALADOR DE TRABAJOS DE CARTEL EN EL AREA DE QUIMICA DENTRO DE LAS VI JORNADAS DE INVESTIGACION DE LA XXXV SEMANA DE QUIMICA DE LA FACULTAD DE CIENCIAS QUIMICAS DE LA UNIVERSIDAD AUTONOMA DE CHIHUAHUA, LLEVADAS A CABO DEL 26 AL 29 DE OCTUBRE DE 2010 EN L
2010	UNIVERSIDAD AUTONOMA DEL ESTADO DE HIDALGO MÉXICO
	MIEMBRO DEL COMITE NACIONAL DE FISICOQUIMICA TEORICA
	MIEMBRO DEL COMITE NACIONAL ORGANIZADOR DE LAS REUNIONES DE FISICOQUIMICA TEORICA EN EL PERIODO 2009-2010.
2010	UNIVERSIDAD AUTONOMA DEL ESTADO DE HIDALGO MÉXICO
	MODERADOR
	MODERADOR EN LA IX REUNION MEXICANA DE FISICOQUIMICA TEORICA LLEVADA A CABO EN LA CIUDAD DE PACHUCA, HIDALGO, DEL 11 AL 13 DE NOVIEMBRE DE 2010.
2010	UNIVERSIDAD AUTONOMA DE CHIHUAHUA MÉXICO
	MIEMBRO DEL COMITÉ EDITORIAL REVISTA TECNOCIENCIA
	Miembro del Comité Editorial de la Revista arbitreada de ciencia, tecnología y Humanidades de la Universidad Autónoma de Chihuahua
2010	UNIVERSIDAD AUTONOMA DEL ESTADO DE HIDALGO MÉXICO
	MIEMBRO DE COMITÉ NACIONAL
	Organizador Nacional de la Novena reunión Mexicana de Fisicoquímica teórica

ELSEVIER 2009 **NETHERLANDS "TOP 25 HOTTEST ARTICLES"** Reconocimiento al artículo THEOCHEM 905 (2009) 76-80 como "Top 25 Hottest Articles" UNIVERSIDAD AUTONOMA DE CHIHUAHUA 2009 MÉXICO **EVALUADOR** EVALADOR DE TRABAJOS DE CARTEL EN EL AREA DE QUIMICA DENTRO DE LAS V JORNADAS DE INVESTIGACION DE LA XXXIV SEMANA DE QUIMICA DE LA FACULTAD DE CIENCIAS QUIMICAS DE LA UNIVERSIDAD AUTONOMA DE CHIHUAHUA, LLEVADAS A CABO DEL 13 AL 16 DE OCTUBRE DE 2009 EN LA **UNIVERSIDAD DE COLIMA** 2009 MÉXICO MIEMBRO DEL COMITE NACIONAL DE FISICOQUIMICA TEORICA MIEMBRO DEL COMITE NACIONAL ORGANIZADOR DE LAS REUNIONES DE FISICOQUIMICA TEORICA EN EL PERIODO 2009-2010. **ELSEVIER** 2008 **NETHERLANDS TOP 25 HOTTEST ARTICLES** Reconocimiento al artículo THEOCHEM 854 (2008) 81-88 como "Top 25 Hottest Articles" **TECNOLOGICO NACIONAL DE MEXICO** 2008 **MÉXICO** PRESIDENTE DEL JURADO PRESIDENTE DEL JURADO EN LAS AREAS DE PESQUERIAS, QUIMICA Y ALIMENTOS DE LA FASE REGIONAL DEL XIII EVENTO NACIONAL DE CREATIVIDAD, INSTITUTOS **TECNOLOGICOS. UNIVERSIDAD VERACRUZANA** 2008 **MEXICO MODERADOR** MODERADOR EN LA VII REUNION MEXICANA DE FISICOQUIMICA TEORICA LLEVADA A CABO EN LA CIUDAD DE XALAPA, VERACRUZ DEL 13 AL 15 DE NOVIEMBRE DE 2008. SNI₁ 2007

TRAYECTORIA PROFESIONAL

2017-02-01

CENTRO DE INVESTIGACION EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. (CIMAV)

TECNICO TITULAR C

84 publicaciones en revistas indexadas y memorias de congresos y 10 capítulos de libro.

	molecular y la supervisión de 19 tesis de licenciatura, maestría y doctorado en el área de materiales y medio ambiente y energía. 3 doctores en ciencias, 8 maestros en ciencias y tres licenciados en diferentes especialidades graduados.
2015-08-10	INSTITUTO TECNOLOGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES DE MONTERREY PROFESOR DE OBRA DETERMINADA REDUCIDA QUINCENA
	Evaluación colegiada de alumnos de primer semestre con promedio superior a 90 Participación en el concurso iGem competition (International Genetically Engineered Machine) en Massachusetts Institute of Technology (MIT) con el trabajo The Carbon Carriers: Cell Transformation and Transfection by Carbon Nanotubes, a New Nanotechnology Strategy
2013-08-12	INSTITUTO TECNOLOGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES DE MONTERREY PROFESOR DE OBRA DETERMINADA REDUCIDA QUINCENA
2013-01-14	INSTITUTO TECNOLOGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES DE MONTERREY PROFESOR DE OBRA DETERMINADA REDUCIDA QUINCENA
	Certificación de Aprendizaje Basado en Proyectos (POL) impartido por el Tecnológico de Monterrey Campus Chihuahua
2012-08-06	OTRO PROFESOR DE OBRA DETERMINADA REDUCIDA QUINCENA
	Certificaciones en técnicas didácticas de Aprendizaje colaborativo y Diplomado ASESORE impartidas por el Tecnológico de Monterrey campus Chihuahua
2005-10-13	UNIVERSIDAD TECMILENIO (ENSEÑANZA E INVESTIGACION SUPERIOR, A.C.) MAESTRO DEL AREA DE MATEMATICAS
1997-06-01	OTRO ADMINISTRACION GENERAL
1995-02-27	OTRO GEOLOGO CONSULTOR
1991-03-01	SECRETARIA DE HACIENDA DEL ESTADO ANALISTA

Pláticas impartidas a nivel nacional e internacional y revisor en más de 26 revistas científicas internacionales. Docente con más de 20 cursos de especialidad en el área de modelado

1990-04-01

OTRO

ANALISTA DE PROYECTOS

1988-01-06

INDUSTRIAS PEÑOLES, S.A.B. DE C.V.

ASISTENTE DE GERENCIA DE EXPLORACION

organización de archivos de control de exploracion en unidades mineras, (planos geologicos, estratigraficos, etc)

1987-06-09

MINERA FRISCO GEOLOGO DE MINA

DOCENCIA

CURSOS IMPARTIDOS

COMPUTACIÓN/MÓDULO GAUSSIAN

8247524760

2020-12-14 / 2021-01-18

Maestría

SNP

TEMAS SELECTOS DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA

AMBIENTAL I

8247524760

2019-09-02 / 2020-01-24

SNP

COMPUTACIÓN/MÓDULO MODELADO MOLECULAR

8247524760

2018-11-06 / 2018-12-07

SNP

COMPUTACIÓN/MÓDULO MODELADO MOLECULAR

8247524760

2018-06-04 / 2018-07-06

SNP

COMPUTACIÓN/MÓDULO MODELADO MOLECULAR

8247524760

2020-01-13 / 2020-01-24

Maestría

SNP

TEMAS SELECTOS DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA

AMBIENTAL

8247524760

2019-09-02 / 2020-01-24

Doctorado

SNP

COMPUTACIÓN/MÓDULO GAUSSIAN

8247524760

2018-11-06 / 2018-12-07

Maestría

SNP

MODELADO MOLECULAR Y QUÍMICA COMPUTACIONAL

2018-04-18 / 2018-04-18

Licenciatura

SEMANA IBT 2018

NO_SNP

COMPUTACIÓN, MÓDULO DE MODELADO MOLECULAR

8247524760

2017-11-20 / 2017-12-21

Doctorado

SNP

INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA COMPUTACIONAL

8357000000

2016-08-15 / 2017-01-13

Doctorado **SNP**

GEOLOGÍA

2015-08-10 / 2015-12-09

Licenciatura

INGENIERÍA CIVIL

NO_SNP

GEOLOGÍA

2014-08-11 / 2014-12-10

Licenciatura

INGENIERÍA CIVIL

NO_SNP

TERMODINÁMICA DEL EQUILIBRIO

2013-08-12 / 2013-12-10

INGENIERÍA EN BIOTECNOLOGÍA

NO_SNP

LABORATORIO DE TERMOFLUIDOS

2013-01-14 / 2013-05-24 INGENIERÍA MECÁNICA

NO SNP

INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA COMPUTACIONAL

8357000000

2011-09-01 / 2012-01-26

SNP

INTRODUCCION A LA QUIMICA COMPUTACIONAL

2010-12-02 / 2010-12-03

II COLOQUIO DE PROYECTOS DE TITULACION 2010

NO_SNP

SIMULACIÓN

2010-02-24 / 2010-02-26

DIPLOMADO EN SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y

SIMULACIÓN DE MATERIALES

NO SNP

INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA COMPUTACIONAL

8247524760

2009-09-02 / 2010-01-30

Maestría

SNP

COMPUTACIÓN, MÓDULO DE MODELADO MOLECULAR

8247524760

2017-03-20 / 2017-04-21

Doctorado

SNP

GEOLOGÍA

2016-08-08 / 2016-12-13

Licenciatura

INGENIERÍA CIVIL

NO_SNP

APLICACIONES DE LA NANOTECNOLOGÍA

COMPUTACIONAL

8247524760

2015-02-09 / 2016-06-27

Doctorado

SNP

GEOLOGÍA

2013-08-12 / 2013-12-10

INGENIERÍA CIVIL

NO_SNP

INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA COMPUTACIONAL

8357000000

2013-02-25 / 2013-07-19

SNP

TERMODINÁMICA DEL EQUILIBRIO

2012-08-06 / 2012-12-06

INGENIERIA EN BIOTECNOLOGIA

NO_SNP

INTRODUCCION A LA QUIMICA COMPUTACIONAL

8247524760

2011-02-25 / 2011-07-19

Maestría SNP

APLICACIONES DE LA NANOTECNOLOGIA

COMPUTACIONAL

8357000000

2010-09-01 / 2011-01-27

SNP

"LA QUÍMICA COMPUTACIONAL Y SUS APLICACIONES",

8357000000

2009-10-14 / 2009-10-14

SNP

NANOTECNOLOGÍA Y QUÍMICA COMPUTACIONAL EN EL

CIMAV

1049999200

2009-03-25 / 2009-03-25

SNP

INTRODUCCION A L QUIMICA COMPUTACIONAL

8357000000

2009-02-02 / 2009-08-15

SNP

NANOTECNOLOGIA

8357000000

2008-04-16 / 2008-04-16

SNP

MATEMATICAS I (TEC MILENIO)

2005-10-01 / 2005-11-25

MODULO BASICO ADMINISTRACION

NO SNP

TRABAJOS DE TITULACIÓN

ESTUDIO DE LA ESTRUCTURA Y PROPIEDADES ELECTRÓNICAS EN DERIVADOS PIRRÓLICOS Y FULLERENO, EMPLEANDO LA TEORÍA DE FUNCIONALES DE LA DENSIDAD.

2008-07-25 · 2009-02-23

Licenciatura

Terminada

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE CHIHUAHUA - 4120000 - NACIONAL | - CHIHUAHUA - MÉXICO

ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LA ESTRUCTURA ELECTRONICA DE MOLECULAS ORGANICAS Y SU APLICACION EN DISPOSITIVOS FOTOVOLTAICOS

2009-12-15 · 2010-02-05

Licenciatura

Terminada

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE CHIHUAHUA - 4120000 - NACIONAL | - CHIHUAHUA - MÉXICO

ESTUDIO QUIMICO CUANTICO DE LAS PROPIEDADES DE OLIGOMEROS APLICABLES EN DISPOSITIVOS FOTOVOLTAICOS

2011-04-15 - 2011-05-20

Maestría

Terminada

ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES MOLECULARES DEL OLIGOMERO DE 2,3 TIADIAZOL UTILIZANDO LA TEORIA DE FUNCIONALES DE LA DENSIDAD

2010-03-20 · 2010-12-07

Licenciatura

Terminada

TECNOLOGICO NACIONAL DE MEXICO - 177934 - NACIONAL | - CIUDAD DE MÉXICO - MÉXICO

CARACTERIZACION DE NANOTUBOS DE CARBONO FUNCIONALIZADOS CON LECTINA

2012-06-14 · 2012-07-12

Maestría

Terminada

REACTIVIDAD DE LA PLATA CON MOLECULAS BIOLOGICAS, UN ESTUDIO DFT

2012-06-14 · 2012-07-12

Maestría

Terminada

MODELADO QUÍMICO DE COLORANTES CT-300, CT-3S Y CT-325, PARA SU USO EN CELDAS SOLARES SENSIBILIZADAS POR COLORANTE

2012-08-31 · 2013-04-03

Maestría

Terminada
ESTUDIO TEÓRICO DE LA QUÍMICA MODELO PARA ALGUNOS TINTES COMERCIALES 2012-08-31 · 2013-06-17
Maestría
Terminada
CARACTERIZACIÓN TEÓRICA DE TINTES PERTENECIENTES A LA FAMILIA DE ANTOCIANINAS PARA SU APLICACIÓN EN CELDAS SOLARES SENSIBILIZADAS AL COLORANTE 2015-06-17 · 2015-07-08
Doctorado
Terminada
ANÁLISIS DE LAS PROPIEDADES DE TRANSPORTE DE CARGA EN DENDRÍMEROS UTILIZANDO DFT 2012-12-14 · 2013-02-28 Maestría
Terminada
ESTUDIO TEÓRICO-EXPERIMENTAL DE FUNCIONALIZACIÓN DE NANOTUBOS DE CARBONO CON MOLÉCULAS BIOLÓGICAS POR MÉTODO DE AMIDACIÓN UTILIZANDO DIFERENTES ACTIVADORES 2017-02-24 · 2017-03-17
Doctorado
Terminada
CARACTERIZACION MOLECULAR COMPUTACIONAL DE LOS COLORANTES ORGANICOS CT-7 (C33H31IN2O2), CT-500 (C43H59IN2O4) Y CT-525(C40H41IN2O2) PARA SU POSIBLE APLICACION EN CELDAS SOLARES 2012-08-30 · 2013-06-10
Maestría
Terminada
MODELADO MOLECULAR DE LA FUNCIONALIZACIÓN DE NANODIAMANTES CON TAMOXIFENO DIRIGIDO A RECEPTORES DEL CÁNCER MAMARIO 2017-07-03 · 2017-08-18
Doctorado
Terminada
COMPUTATIONAL COMPARISON OF THE MOLECULAR DESIGN OF SOME NATURAL DYES AS SENSITIZERS FOR EFFICIENT DSSC 2020-01-30 · 2020-02-18
Doctorado
Terminada
PERMEABILIDAD DE UNA NANOPARTÍCULA A TRAVÉS DE UN MODELO DE MEMBRANA LIPÍDICA 2018-02-14 · 2018-03-01
Maestría
Terminada
ESTUDIO DE LAS INTERACCIONES DE UNA MEMBRANA CELULAR CON ANTIOXIDANTES Y NANOPARTÍCULAS POR MÉTODOS DE DINÁMICA MOLECULAR 2022-02-16 · 2022-03-04
Doctorado
Terminada

NANODIAMANTES FUNCIONALIZADOS CON ÁCIDO LÁCTICO COMO VEHÍCULO PARA LA LIBERACIÓN DE TAMOXIFENO CONTRA CÉLULAS DE CÁNCER DE MAMA.

2019-10-24 - 2019-11-11

PRODUCCIÓN CIENTÍFICA Y HUMANISTA

ARTÍCULOS

EXPLORING MARINE TOXINS: COMPARATIVE ANALYSIS OF CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES AND POTENTIAL FOR DRUG DISCOVERY

FRONTIERS IN CHEMISTRY

Año: 2024

Objetivo: Investigación Estado: Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 22962646 DOI: 10.3389/fchem.2023.1286804

Autor(es): Norma J Flores-Holguín, oan S. Salas-Leiva, Erick J Núñez-Vázquez, Dariel Tovar-Ramírez, Daniel Glossman-Mitnik

Ver Documento

THERMOSTABILITY IMPROVEMENT OF SUCROSE ISOMERASE PALI NX5: A COMPREHENSIVE STRATEGY

BIOTECHNOLOGY LETTERS

Año: 2023

Objetivo: Investigación Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN impreso: 0141-5492 ISSN electrónico: 1573-6776

DOI: 10.1007/s10529-023-03388-6

Autor(es): Amado Javier SardiñaPeña, Lourdes BallinasCasarrubias, Tania Samanta Siqueiros-Cendón, Edward Alexander

Espinoza Sánchez., Norma FloresHolguín, Blanca Flor Iglesias-Figueroa, Qunitín RascónCruz,

PRELIMINARY EVALUATION OF LABLAB PURPUREUS PHYTOCHEMICALS FOR ANTI- BOHV1 ACTIVITY USING IN VITRO AND IN SILICO APPROACHES

ACS OMEGA Año: 2023

Objetivo: Investigación Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 2470-1343 DOI: 10.1021/acsomega.3c01478.

Autor(es): Smitha S. Bhat, Sushma Pradeep, Sharanagouda S. Patil, Norma Flores-Holguín, Daniel Glossman-Mitnik, Juan

Frau, Sarana Rose Sommano, Nemat Ali, Chandan Shivamallu, Shashanka K. Prasad, Shiva Prasad Kollur,

SYNTHESIS AND EVALUATION OF ANTIMYCOBACTERIAL ACTIVITY AND MOLECULAR DOCKING OF 4-(BENZYLOXY) BENZALDEHYDE-3,5-DINITROBENZOHYDRAZONE: A COMBINED EXPERIMENTAL AND THEORETICAL APPROACHES

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Año: 2023

Objetivo: Investigación Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 0022-2860

ISSN electrónico: 1872-8014 **DOI:** 10.1016/j.molstruc.2023.136135

Autor(es): Riya Singh, Poonam Rawat, Anshu Gautam, Mukesh Kumar, Poonam Bharati, Shipra Gautam, Anant Ram, Amul

Darwari, NNorma Rosario Flores Holquín, R.N. Singh,

CDFTBASED CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES ANALYSIS OF THE FLUORINE SUBSTITUTION IN THE SELECTIVE ESTROGEN RECEPTOR MODULATOR (SERM) TAMOXIFEN

THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS

Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor de correspondencia

ISSN electrónico: 1432-2234 DOI: 10.1007/s00214-023-03018-4

Autor(es): Norma FloresHolguín, Daniel Glossman-Mitnik,

EXPLORING THE POTENTIAL AND LIMITATIONS OF CYCLOPEPTIDES AS PHARMACEUTICAL DRUGS: A COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY APPROACH TO THE STUDY OF GRASSYPEPTOLIDES AG

THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS

Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN electrónico: 1432-2234 DOI: 0.1007/s00214-023-03031-7

Autor(es): Norma FloresHolguín, Juan Frau, Daniel Glossman-Mitnik,

COMPUTATIONAL CHEMISTRY AND MOLECULAR MODELING TECHNIQUES FOR THE STUDY OF MICROPEPTIN EI-964: INSIGHTS INTO ITS CHEMICAL REACTIVITY AND POTENTIAL PHARMACEUTICAL PROPERTIES

COMPUTATIONAL MOLECULAR BIOSCIENCE

Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 2165-3445 ISSN electrónico: 2165-3453 DOI: 10.4236/cmb.2023.133003

Autor(es): Norma Flores-Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman-Mitnik,

TALAROLIDE A AND TALAROPEPTIDES A-D: POTENTIAL MARINE-DERIVED THERAPEUTIC PEPTIDES WITH INTERESTING CHEMISTRY AND BIOLOGICAL ACTIVITY STUDIED THROUGH DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT) AND CONCEPTUAL DFT

MOLECULES

Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN electrónico: 1420-3049 DOI: 10.3390/molecules28186708

Autor(es): Norma Flores-Holguín, Joan S. Salas-Leiva,

UNDERSTANDING THE CHEMICAL REACTIVITY AND BIOLOGICAL PROPERTIES OF PATELLAMIDES USING THEORETICAL AND COMPUTATIONAL METHODS

COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY

Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 2210-271X ISSN electrónico: 2210-2728 DOI: 10.1016/j.comptc.2023.114329

Autor(es): Norma Flores-Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman-Mitnik,

ANALYZING CURRENT TRENDS AND POSSIBLE STRATEGIES TO IMPROVE SUCROSE ISOMERASES' THERMOSTABILITY

INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES

Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 1422-0067 DOI: 10.3390/ijms241914513

Autor(es): Amado Javier Sardiña-Peña, Liber Mesa-Ramos, Blanca Flor Iglesias-Figueroa, Lourdes Ballinas-Casarrubias, Tania Samanta Siqueiros-Cendón, Tani Edward Alexander Espinoza-Sánchez, Norma Rosario Flores-Holguín, Sigifredo Arévalo-

Gallegos,

COMPUTATIONAL DISCOVERY OF MARINE MOLECULES OF THE CYCLOPEPTIDE FAMILY WITH THERAPEUTIC POTENTIAL

PHARMACEUTICALS

Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN electrónico: 1424-8247 DOI: 10.3390/ph16101377.

Autor(es): Norma Flores-Holguín, Joan S. Salas-Leiva, Daniel Glossman-Mitnik,

EXPLORING MARINE TOXINS: COMPARATIVE ANALYSIS OF CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES AND POTENTIAL FOR DRUG DISCOVERY

FRONTIERS IN CHEMISTRY

Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor de correspondencia

ISSN electrónico: 2296-2646 DOI: 10.3389/fchem.2023.1286804

Autor(es): Norma Flores-Holguín, Joan S. Salas-Leiva, Erick J. Núñez-Vázquez, Dariel Tovar-Ramírez, Daniel Glossman-Mitnik

MOLECULAR INSIGHTS INTO THE IN SILICO DISCOVERY OF CORILAGIN FROM TERMINALIA CHEBULA AS A POTENTIAL DUAL INHIBITOR OF SARS-COV-2 STRUCTURAL PROTEINS

JOURNAL OF BIOMOLECULAR STRUCTURE AND DYNAMICS

Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 0739-1102 ISSN electrónico: 1538-0254

DOI: 10.1080/07391102.2022.2158943.

Autor(es): Sushma Pradeepa , Shashank M Patila , Chandan Dharmashekaraa , Anisha Jaina , Ramith Ramua , Prithvi S

Shirahatti, Subhankar P Mandal, Pruthvish Reddyd, Chandrashekar Srinivasae, Sharanagouda S Patil, Joaqun Ortega-Castrog, Juan Frau, Norma Flores-Holgun, Chandan Shivamallua, Shiva Prasad Kollur, Daniel Glossman-Mitnik,

INVESTIGATING THE CHEMICAL REACTIVITY OF KAHALALIDES: A PROMISING SOURCE OF THERAPEUTIC PEPTIDES FROM MARINE NATURAL PRODUCTS USING CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY

CHEMISTRY SELECT

Año: 2023

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 2365-6549 ISSN electrónico: 2365-6549 DOI: 10.1002/slct.202303207

Autor(es): Norma Flores-Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman-Mitnik,

COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY APPROACH TO THE STUDY OF THE CHEMICAL REACTIVITY AND BIOACTIVITY PROPERTIES OF ASPERGILLIPEPTIDE D, A CYCLOPENTAPEPTIDE OF MARINE ORIGIN

SCIENTIFIC REPORTS

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN electrónico: 20452322 DOI: 10.1038/s41598-021-04513-z

Autor(es): Norma Flores Holguin, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

SYNTHESIS, SPECTROSCOPIC AND EVALUATION OF ANTICANCER ACTIVITY OF NEW HYDRAZONE-CONTAINING DIPYRROMETHANE USING EXPERIMENTAL AND THEORETICAL APPROACHES

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00222860

DOI: 10.1016/j.molstruc.2022.132781

Autor(es): Anshu Gautam, Poonam Rawat, R.N. Singh, Norma Flores Holguin,

Ver Documento

OXIDATION DEGREE OF A CELL MEMBRANE MODEL AND ITS RESPONSE TO STRUCTURAL CHANGES, A COARSEGRAINED MOLECULAR DYNAMICS APPROACH

JOURNAL OF BIOMOLECULAR STRUCTURE AND DYNAMICS

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 07391102 ISSN electrónico: 15380254

DOI: 10.1080/07391102.2020.1833759

Autor(es): Hugo Aceves Luna, Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguin,

CONCEPTUAL DFT-BASED COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY, PHARMACOKINETICS STUDY AND ADMET REPORT OF THE VERAGUAMIDES AG FAMILY OF MARINE NATURAL DRUGS

MARINE DRUGS

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN electrónico: 16603397 DOI: 10.3390/md20020097

Autor(es): Norma Flores Holguin, Joaquín Ortega Castro, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

COMPUTATIONAL NANOCHEMISTRY STUDY OF THE ALISPORIVIR AND CYCLOSPORIN ANTIMICROBIAL PEPTIDES THROUGH CONCEPTUAL DFT-BASED COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY AND PHARMACOKINETICS

MUNDO NANO

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN electrónico: 24485691

DOI: 10.22201/ceiich.24485691e.2022.29.69725

Autor(es): Norma Flores Holguin, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

AN INSIGHT INTO REACTIVITY AND BIOACTIVITY PROPERTIES OF QUORUM SENSING PEPTIDES AGAINST PDE10A: A COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY APPROACH

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 09485023 ISSN electrónico: 16102940 DOI: 10.1007/s00894-022-05176-x

Autor(es): Bhargav Shreevatsa, Chandan Dharmashekara, Anisha S. Jain, Raghavendra Amachawadi, Raghu Ram Achar,

Asad Syed, Chandan Shivamallu, Shiva Prasad Kollur, Juan Frau, Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

VIRTUAL PROSPECTION OF MARINE CYCLOPEPTIDES AS THERAPEUTICS BY MEANS OF CONCEPTUAL DFT AND COMPUTATIONAL ADMET

PHARMACEUTICALS

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN electrónico: 14248247 **DOI**: 10.3390/ph15050509

Autor(es): Norma Flores Holguin, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

Ver Documento

N-((1H-PYRROL-2-YL)METHYLENE)-6-METHOXYPYRIDIN-3-AMINE AND ITS CO(II) AND CU(II) COMPLEXES AS ANTIMICROBIAL AGENTS: CHEMICAL PREPARATION, IN VITRO ANTIMICROBIAL EVALUATION, IN SILICO ANALYSIS AND COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY INVESTIGATIONS

MOLECULES

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 14203049 DOI: 10.3390/molecules27041436

Autor(es): Vinusha H. Mariwamy, Shiva Prasad Kollur, Bindya Shivananda, Muneera Begum, Chandan Shivamallu, Chandan Dharmashekara, Sushma Pradeep, Anisha S Jain, Shashanka K. Prasad, Asad Syed, Abdallah M. Elgorban, Salim Al-Rejaie, Joaquín Ortega-Castro, Juan Frau, Norma Flores-Holguín, Daniel Glossman-Mitnik,

Ver Documento

EXPLORATION OF ANTI-HIV PHYTOCOMPOUNDS AGAINST SARS-COV-2 MAIN PROTEASE: STRUCTURE-BASED SCREENING, MOLECULAR SIMULATION, ADME ANALYSIS AND CONCEPTUAL DFT STUDIES

MOLECULES

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 1420-3049 DOI: 10.3390/molecules27238288

Autor(es): Mahadevamurthy Murali, Hittanahalli koppal, Gajendra murthy Gowtham, Natarajamurthy Shilpa, Hemanth Kumar, Naguvanahalli Krishnappa, Ana E. Ledesma, Anisha S. Jain, Ali A. Shati, Mohammad Y. Alfaifi, Serag Eldin I. Elbehairi, Raghu Ram Achar, Ekaterina Silina, Victor Stupin, Joaquín Ortega-Castro, Juan Frau, Norma Flores-Holguín, Daniel Glossman-Mitnik

Ver Documento

PHYTOCONSTITUENTS OF WITHANIA SOMNIFERA UNVEILED ASHWAGANDHANOLIDE AS A POTENTIAL DRUG TARGETING BREAST CANCER: INVESTIGATIONS THROUGH COMPUTATIONAL, MOLECULAR DOCKING AND CONCEPTUAL DFT STUDIES

PLOS ONE Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 1932-6203 DOI: 10.1371/journal.pone.0275432

Autor(es): Hittanahallikoppal Gajendramurthy Gowtham, Mahadevamurthy Murali, Sudarshana Brijesh Singh, Chandan Shivamallu, Sushma Pradeep, C. S. Shivakumar, Satish Anandan, Anjana Thampy, Raghu r Ram Acha, Ekaterina Silina, Joaqun Ortega-Castro, Juan Frau, Norma Flores-Holgun, Shiva Prasad Kollu, Daniel Glossman-Mitnik,

EDITORIAL: RECENT ADVANCES, NEW PERSPECTIVES AND APPLICATIONS OF CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY

FRONTIERS IN CHEMISTRY

Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN electrónico: 2296-2646 DOI: 10.3389/fchem.2022.1003106

Autor(es): Norma Flores-Holguín, Juan Frau, Daniel Glossman-Mitnik,

IN VITRO ANTICANCER SCREENING, MOLECULAR DOCKING AND ANTIMICROBIAL STUDIES OF TRIAZOLE-BASED NICKEL(II) METAL COMPLEXES

MOLECULES Año: 2022

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 1420-3049 DOI: 10.3390/ molecules27196548

Autor(es): Sachin A. Deodware, Umesh B. Barache, Pratibha C. Dhale, Kundalkesha S. Gaikwad, Chandan Shivamallu, Panchsheela A. Ubale, Ali A. Shati, Mohammad Y. Alfaifi, Serag Eldin I. Elbehairi, Raghu Ram Achar, Ekaterina Silina, Victor

CONAHCYT - RIZOMA - PERFIL ÚNICO

Stupin, Juan Frau, Norma Flores-Holquín, Shashikant H. Gaikwad, Shiva Prasad Kollur,

INVESTIGATION OF ANTIFUNGAL PROPERTIES OF SYNTHETIC DIMETHYL-4-BROMO-1-(SUBSTITUTED BENZOYL)
PYRROLO[1,2-A]QUINOLINE-2,3-DICARBOXYLATES ANALOGUES: MOLECULAR DOCKING STUDIES AND CONCEPTUAL
DFT-BASED CHEMICAL REACTIVITY DESCRIPTORS AND PHARMACOKINETICS EVALUA

MOLECULES

Año: 2021

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 14203049 DOI: 10.3390/molecules26092722

Autor(es): Vijayakumar Uppar , Sandeep Chandrashekharappa , Chandan Shivamallu , Sushma P , Shiva Prasad Kollur , Joaquín Ortega Castro , Juan Frau , Norma Flores Holguin , Atiyaparveen I. Basarikatti , Mallikarjun Chougala , Mrudula Mohan , Govindappa Banuprakash , Katharigatta N. Venugopala , Belakatte P. Nandeshwarappa , Ravindra Veerapur , Abdulaziz A. Al-Kheraif , Abdallah M. Elgorban , Asad Syed , Kiran K. Mudnakudu Nagaraju , Basavaraj Padmashali , Daniel Glossman Mitnik ,

CHEMICAL SYNTHESIS, IN VITRO BIOLOGICAL EVALUATION AND THEORETICAL INVESTIGATIONS OF TRANSITION METAL COMPLEXES DERIVED FROM 2-(((5-MERCAPTO-1 H -PYRROL-2-YL)IMINO) METHYL)6-METHOXYPHENOL

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Año: 2021

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00222860

DOI: 10.1016/j.molstruc.2021.130920

Autor(es): Honnalagere Mariswamy Vinusha, Shiva Prasad Kollur, Muneera Begum, Chandan Shivamallu, Ramith Ramu, Prithvi S. Shirahatti, Nagendra Prasad, Ravindra Veerapur, Joaquín Ortega Castro, Juan Frau, Norma Flores Holguin, Daniel

Glossman Mitnik,

SYNTHESIS, COMPUTATIONAL PHARMACOKINETICS REPORT, CONCEPTUAL DFT-BASED CALCULATIONS AND ANTI-ACETYLCHOLINESTERASE ACTIVITY OF HYDROXYAPATITE NANOPARTICLES DERIVED FROM ACORUS CALAMUS PLANT EXTRACT

FRONTIERS IN CHEMISTRY

Año: 2021

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 22962646 DOI: 10.3389/fchem.2021.741037

Autor(es): Sushma Pradeep, Anisha S. Jain, Chandan Dharmashekara, Shashanka K. Prasad, Nagaraju Akshatha, Raghavendra G Amachawadi, Chandrashekar Srinivasa, Asad Syed, Abdallah M. Elgorban, Abdulaziz A. Al Kheraif, Joaquín Ortega Castro, Juan Frau, Norma Flores Holguín, Chandan Shivamallu, Shiva Prasad Kollur, Daniel Glossman Mitnik,

COMPUTATIONAL PHARMACOKINETICS REPORT, ADMET STUDY AND CONCEPTUAL DFT-BASED ESTIMATION OF THE CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF MARINE CYCLOPEPTIDES

CHEMISTRYOPEN

Año: 2021

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN electrónico: 21911363 DOI: 10.1002/open.202100178

Autor(es): Norma Flores Holguin, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

VIRTUAL SCREENING FOR POTENTIAL PHYTOBIOACTIVES AS THERAPEUTIC LEADS TO INHIBIT NQO1 FOR

SELECTIVE ANTICANCER THERAPY

MOLECULES Año: 2021

Objetivo: Investigación Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 14203049 DOI: 10.3390/molecules26226863

Autor(es): Bhargav Shreevatsa, Chandan Dharmashekara, Vikas Halasumane Swamy, Meghana V. Gowda, Raghu Ram Achar, Vivek Hamse Kameshwar, Rajesh Kumar Thimmulappa, Asad Syed, Abdallah M. Elgorban, Salim S. Al-Rejaie, Joaquín Ortega

Castro, Juan Frau, Norma Flores Holguín, Chandan Shivamallu, Shiva Prasad Kollur, Daniel Glossman Mitnik,

EVALUATION OF ANNONA MURICATA ACETOGENINS AS POTENTIAL ANTI-SARS-COV-2 AGENTS THROUGH COMPUTATIONAL APPROACHES

FRONTIERS IN CHEMISTRY

Año: 2021

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 22962646 DOI: 10.3389/fchem.2020.624716

Autor(es): Sushma Pradeep, Olga Kosakowska, William C. Cho, Kingsley Chukwuemeka, Patrick Iwuanyanwu, Joaquín Ortega Castro, Juan Frau, Chukwuebuka Egbuna, Mihnea-Alexandru Gaman, Norma Flores Holguin, Shiva Prasad Ashok, Chandan

Shimavallu, Asad Syed, Najat Marraiki,

AN INTEGRATED MOLECULAR MODELING PROTOCOL FOR DRUG SCREENING BASED ON CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY AND CHEMOINFORMATICS FOR THE STUDY OF MARINE CYCLOPEPTIDES

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2021

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 09485023 ISSN electrónico: 16102940 DOI: 10.1007/s00894-021-04901-2

Autor(es): Norma Flores Holguin , Juan Frau , Daniel Glossman Mitnik ,

IN SILICO PHARMACOKINETICS, ADMET STUDY AND CONCEPTUAL DFT ANALYSIS OF TWO PLANT CYCLOPEPTIDES ISOLATED FROM ROSACEAE AS A COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY APPROACH

FRONTIERS IN CHEMISTRY

Año: 2021

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN electrónico: 22962646 DOI: 10.3389/fchem.2021.708364

Autor(es): Norma Flores Holguin, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

A CDFT-BASED COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY (CDFT-CP) STUDY OF THE CHEMICAL REACTIVITY AND BIOACTIVITY OF THE MARINE-DERIVED ALTERNARAMIDE CYCLOPENTADEPSIPEPTIDE

JOURNAL OF CHEMISTRY

Año: 2021

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 20909063 ISSN electrónico: 20909071 DOI: 10.1155/2021/2989611

Autor(es): Norma Flores Holguin, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

INFLUENCE ON THE REACTIVITY PROPERTIES OF THE SUBSTITUTION BY DIFFERENT HALOGENS ON THE CONJUGATED BACKBONE OF THE 1,3,5-TRIARYL-2-PYRAZOLINE SKELETON IN RELATION TO THE INCREASING ALKYLOXY CHAIN LENGTH: A CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY STUDY

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2020

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/s00894-020-04420-6

Autor(es): Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik, Asghar Abbas,

MOLECULAR DOCKING AND CONCEPTUAL DFT-BASED STUDY OF SOME POTENTIAL SARS-COV-2 INHIBITORS

COMPUTATIONAL MOLECULAR BIOSCIENCE

Año: 2020

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 21653445 ISSN electrónico: 21653453 DOI: 10.4236/cmb.2020.104008

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguin,

CONCEPTUAL DFT-BASED COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY OF MARINE NATURAL COMPOUNDS: DISCODERMINS AH

MOLECULES Año: 2020

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN electrónico: 14203049 DOI: 10.3390/molecules25184158

Autor(es): Norma Flores Holguin, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

VIRTUAL SCREENING OF MARINE NATURAL COMPOUNDS BY MEANS OF CHEMOINFORMATICS AND CDFT-BASED COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY

MARINE DRUGS

Año: 2020

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN electrónico: 16603397 DOI: 10.3390/md18090478

Autor(es): Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik, Juan Frau,

IN VITRO ANTICANCER ACTIVITY OF 4(3H)-QUINAZOLINONE DERIVED SCHIFF BASE AND ITS CU(II), ZN(II) AND CD(II) COMPLEXES: PREPARATION, X-RAY STRUCTURAL, SPECTRAL CHARACTERIZATION AND THEORETICAL

INVESTIGATIONS

INORGANICA CHIMICA ACTA

Año: 2020

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00201693 DOI: 10.1016/j.ica.2020.119846

Autor(es): Karhale Shrikrishna Suresh, Nishad Anil, Helavi Vasant Baburao, Datta Markad, Joaquín Ortega Castro, Juan Frau, Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik, Ubale Panchsheela Ashoka, Shiva Prasad Kollur, Bansode Prakash Arun,

Chavan Sanjay,

THEORETICAL MODIFICATIONS OF THE MOLECULAR STRUCTURE OF AURANTINIDIN AND BETANIDIN DYES TO IMPROVE THEIR EFFICIENCY AS DYESENSITIZED SOLAR CELLS

JOURNAL OF COMPUTATIONAL ELECTRONICS

Año: 2020

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 15698025 ISSN electrónico: 15728137 DOI: 10.1007/s10825-020-01485-7

Autor(es): Aanuoluwapo Raphael Obasuyi, Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguin,

PREPARATION, SPECTROSCOPIC CHARACTERIZATION, THEORETICAL INVESTIGATIONS, AND IN VITRO ANTICANCER ACTIVITY OF CD(PREPARATIONII), NI(II), ZN(II), AND CU(II) COMPLEXES OF 4(3H)-QUINAZOLINONE-DERIVED SCHI BASE

MOLECULES Año: 2020

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 14203049 DOI: 10.3390/molecules25245973

Autor(es): Sanjay Namdev Jadhav , Sanjay Sarsamkar , Vasant Baburao Helavi , Asha Srinivasan , Sandeep Kaulage , Norma Flores Holguin , Daniel Glossman Mitnik , Ubale Panchsheela Ashok , Shiva Panchsheela Ashok , Nishad Anil , Bansode Prakash

Arun , Ravindra Veerapur , Sarah Al-Rashed , Asad Syed , Joaquín Ortega Castro , Juan Frau ,

A FAST AND SIMPLE EVALUATION OF THE CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF THE PRISTINAMYCIN FAMILY OF ANTIMICROBIAL PEPTIDES

CHEMICAL PHYSICS LETTERS

Año: 2020

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 00092614

DOI: 10.1016/j.cplett.2019.137021

Autor(es): Norma Flores Holguin, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY STUDY OF THE CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES AND BIOACTIVITY SCORES OF THE LEU-ENKEPHALIN OPIOID PEPTIDE NEUROTRANSMITTER

COMPUTATIONAL MOLECULAR BIOSCIENCE

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 21653445 ISSN electrónico: 21653453 DOI: 10.4236/cmb.2019.91002 Autor(es): Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik, Juan Frau,

AN ALTERNATIVE APPROACH TO COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY BASED ON CONCEPTUAL DFT AND EMPIRICAL BIOACTIVITY SCORES

MEDICINAL CHEMISTRY

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN electrónico: 21610444 DOI: 10.4172/2161-0444.1000531

Autor(es): Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik, Juan Frau,

CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES, DRUG-LIKENESS AND BIOACTIVITY SCORES OF THE SERAGAMIDES A-F ANTICANCER MARINE PEPTIDES: THE CONCEPTUAL DFT VIEWPOINT

COMPUTATION

Año: 2019

Objetivo: Investigación Estado: Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN electrónico: 20793197 **DOI:** 10.3390/computation7030052.

Autor(es): Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik, Juan Frau,

COMPUTATIONAL STUDY OF THE CHEMICAL REACTIVITY AND BIOACTIVITY RATES OF MARINE PEPTIDES HEMIASTERLIN AND ITS A AND B DERIVATIVES USED IN THE CANCER TREATMENT THROUGH CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY

COMPUTATIONAL MOLECULAR BIOSCIENCE

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 21653445 ISSN electrónico: 21653453 DOI: 10.4236/cmb.2019.94008

Autor(es): Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik, Juan Frau,

THEORETICAL AND EXPERIMENTAL STUDY OF DIFFERENT CHEMICAL ROUTES TO SYNTHESIZE CRYSTALLINE SODIUM METASILICATE FROM SILICA-RICH SAND

REVISTA MEXICANA DE INGENIERÍA QUÍMICA

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 23958472 DOI: 10.24275/rmiq/Mat419

Autor(es): Armando Tejeda Ochoa, Norma Flores Holguin, Caleb carreño gallardo, José Ernesto Ledezma Sillas, José Martín

Herrera Ramírez, Carolina Prieto Gómez,

COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY ASSISTED BY CONCEPTUAL DFT FOR THE STUDY OF FIVE NEW ANTIFUNGAL TRIPEPTIDES

ACS OMEGA

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN electrónico: 24701343 **DOI:** 10.1021/acsomega.9b01463

Autor(es): Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik, Juan Frau,

A PROPOSAL BASED ON QUANTUM PHENOMENA FOR THE ORR MECHANISM ON NITROGEN-DOPED CARBON-BASED ELECTROCATALYSTS

INTERNATIONAL JOURNAL OF HYDROGEN ENERGY

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 03603199

DOI: 10.1016/j.ijhydene.2018.10.232

Autor(es): Norma Flores Holguin, Marisela Legarreta Mendoza, Daniel Lardizabal Gutiérrez,

CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES, DRUG-LIKENESS FEATURES AND BIOACTIVITY SCORES OF THE CHOLECYSTOKININ PEPTIDE HORMONE

COMPUTATIONAL MOLECULAR BIOSCIENCE

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 21653445 ISSN electrónico: 21653453 DOI: 10.4236/cmb.2019.92004

Autor(es): Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik, Juan Frau,

THEORETICAL ANALYSIS OF THE ARRANGEMENT IN ZINC-PORPHYRINS DERIVATIVES AND ITS EFFECT IN THE ELECTRONIC PROPERTIES.

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00222860

DOI: 10.1016/j.molstruc.2019.04.096

Autor(es): Nora Sánchez Bojorge, Gerardo Zaragoza Galan, Norma Flores Holguin, Marco Antonio Chavez Rojo, Cesar Castro

García, Luz María Rodríguez Valdez,

ANALYSIS OF THE INTERACTIONS BETWEEN CYTOCHROME P450 3A4 AND 1A2 WITH AFLATOXINS. A MOLECULAR DOCKING STUDY

APPLIED SCIENCES

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 20763417 **DOI**: 10.3390/app9122467

Autor(es): Isui Abril García Montoya, Linda Lucila Landeros Martínez, Mónica Alvarado González, Quintín Rascón Cruz, Pedro

Palomares Báez, Norma Flores Holguín, Luz María Rodríguez Valdez,

A COMPARISON OF CONCEPTUAL DFT AND MOLECULAR ELECTRON DENSITY THEORY (MEDT) DESCRIPTORS OF LOCAL CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES: OXYTOCIN AND VASOPRESSIN PEPTIDE HORMONES AS TEST CASES

MOJ BIOORGANIC & ORGANIC CHEMISTRY

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN electrónico: 2574819X

DOI: 10.15406/mojboc.2019.03.00097

Autor(es): Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Miitnik, Juan Frau,

CDFT-BASED REACTIVITY DESCRIPTORS AS A USEFUL MEDT CHEMOINFORMATICS TOOL FOR THE STUDY OF THE VIROTOXIN FAMILY OF FUNGAL PEPTIDES

MOLECULES

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN electrónico: 14203049 DOI: 10.3390/molecules24152707

Autor(es): Juan Frau , Norma Flores Holguin , Daniel Glossman Mitnik ,

CHEMICAL REACTIVITY AND BIOACTIVITY PROPERTIES OF THE PHALLOTOXIN FAMILY OF FUNGAL PEPTIDES BASED ON CONCEPTUAL PEPTIDOLOGY AND DFT STUDY

HELIYON Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 24058440

DOI: 10.1016/j.heliyon.2019.e02335

Autor(es): Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik, Juan Frau,

ELECTRON INJECTION IN ANTHOCYANIDIN AND BETALAIN DYES FOR DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS: A DFT APPROACH

JOURNAL OF COMPUTATIONAL ELECTRONICS

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 15698025 ISSN electrónico: 15728137 DOI: 10.1007/s10825-019-01331-5

Autor(es): Norma Flores Holguín , Daniel Glossman Mitnik , Aanuoluwapo Raphael Obasuyi ,

CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES, SOLUBILITIES, AND BIOACTIVITY SCORES OF SOME PIGMENTS DERIVED FROM CAROTENOIDS OF MARINE ORIGIN THROUGH CONCEPTUAL DFT DESCRIPTORS

JOURNAL OF CHEMISTRY

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 20909063 ISSN electrónico: 20909071 DOI: 10.1155/2019/9624108

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguin, Juan Frau,

COMPUTATIONAL PREDICTION OF BIOACTIVITY SCORES AND CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF THE PARASIN

I THERAPEUTIC PEPTIDE OF MARINE ORIGIN THROUGH THE CALCULATION OF GLOBAL AND LOCAL CONCEPTUAL DFT DESCRIPTORS

THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 1432881X ISSN electrónico: 14322234 DOI: 10.1007/s00214-019-2469-3

Autor(es): Norma FLORES holguin, Daniel Glossman Mitnik, Juan Frau,

PREPARATION, SPECTROSCOPIC INVESTIGATIONS AND CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF NEW SCHIFF BASE LIGAND AND ITS COPPER(II) COMPLEXES

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00222860

DOI: 10.1016/j.molstruc.2019.03.101

Autor(es): Shiva Prasad Kollur, Joaquín Ortega Castro, Govindaraju Shruthi, Daniel Glossman Mitnik, Chandan Shivamallu,

Juan Frau, Norma Flores Holguin,

TOOL FOR STUDYING THE CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF THE AMATOXIN FAMILY OF FUNGAL PEPTIDES,

OPEN CHEMISTRY

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN electrónico: 23915420 DOI: 10.1515/chem-2019-0129

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Juan Frau, Norma Flores Holguin,

CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF STANDARD AROMATIC AMINO ACIDS STUDIED BY MEANS OF CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY

SOJ BIOCHEMISTRY

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN electrónico: 23764589

DOI: 10.15226/2376- 4589/4/1/00132

Autor(es): Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik, Juan Frau,

TAMOXIFEN-LOADED NANODIAMONDS AS A POTENTIAL NANOSYSTEM FOR DRUG DELIVERY TO BREAST CANCER CELLS

NANOSCIENCE AND NANOTECHNOLOGY LETTERS

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 19414900 **DOI:** 10.1166/nnl.2019.2997

Autor(es): Mario Loya Rivera, Sara Garcia Ruiz, Erasmo Orrantia Borunda, Norma Flores Holguín, David Chavez Flores, Maria

CALCULATION OF THE GLOBAL AND LOCAL CONCEPTUAL DFT INDICES FOR THE PREDICTION OF THE CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF THE PAPUAMIDES A-F MARINE DRUGS

MOLECULES

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN electrónico: 14203049 **DOI**: 10.3390/molecules24183312

Autor(es): Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik, Juan Frau,

CHEMICAL REACTIVITY THEORY AND EMPIRICAL BIOACTIVITY SCORES AS COMPUTATIONAL PEPTIDOLOGY ALTERNATIVE TOOLS FOR THE STUDY OF TWO ANTICANCER PEPTIDES OF MARINE ORIGIN

MOLECULES

Año: 2019

Objetivo: Investigación Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 14203049

DOI: 10.3390/molecules24061115

Autor(es): Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik, Juan Frau,

CONCEPTUAL DFT AS A CHEMOINFORMATICS TOOL FOR THE STUDY OF THE TALTOBULIN ANTICANCER PEPTIDE

BMC RESEARCH NOTES

Año: 2019

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN electrónico: 17560500 DOI: 10.1186/s13104-019-4478-7

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguin, Juan Frau,

CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES, PKA VALUES, AGES INHIBITOR ABILITIES AND BIOACTIVITY SCORES OF THE MIRABAMIDES A-H PEPTIDES OF MARINE ORIGIN STUDIED BY MEANS OF CONCEPTUAL DFT

MARINE DRUGS

Año: 2018

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) ISSN electrónico: 16603397 DOI: 10.3390/md16090302

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik , Juan Frau , Norma Flores Holguin ,

INTERACTION OF TAMOXIFEN ANALOGS WITH THE POCKET SITE OF SOME HORMONE RECEPTORS. A MOLECULAR DOCKING AND DENSITY FUNCTIONAL THEORY STUDY

FRONTIERS IN CHEMISTRY

Año: 2018

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN electrónico: 22962646 DOI: 0.3389/fchem.2018.00293

Autor(es): Linda Lucila Lucero Landeros Martínez, Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguín,

STUDYING THE CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF THE TARGET TUMOR-ENVIRONMENT TRIPEPTIDES NGR (ASPARAGINE-GLYCINE-ARGININE) AND RGD (ARGININE-GLYCINE-ASPARTIC ACID) IN THEIR INTERACTIONS WITH TAMOXIFEN THROUGH CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2018

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/s00894-018-3868-4

Autor(es): Linda Lucila Lucero Landeros Martínez, Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguín,

CHEMICAL REACTIVITY THEORY (CRT) STUDY OF THE MELANOIDIN M8: LOCAL CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY DESCRIPTORS

COMPUTATIONAL MOLECULAR BIOSCIENCE

Año: 2018

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 21653445 ISSN electrónico: 21653453 DOI: 10.4236/cmb.2018.82004

Autor(es): Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik, Juan Frau,

CALCULATION OF GLOBAL AND LOCAL REACTIVITY DESCRIPTORS OF CARBODIIMIDES, A DFT STUDY. DOI: 10.1142 /S021963361750019

JOURNAL OF THEORETICAL AND COMPUTATIONAL CHEMISTRY

Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 02196336 ISSN electrónico: 17936888 DOI: 10.1142/S021963361750019

Autor(es): ERASMO ORRANTIA-BORUNDA, KATHY ALEJANDRA RAMÍREZ-BALDERRAMA, Norma Flores-Holguin,

HIGH ENHANCED MAGNETIZATION IN CARBON-DOPED MN3GA THIN FILMS. D.O.I 10.1016/J.INTERMET.2017.03.026

INTERMETALLICS

Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 09669795

DOI: 10.1016/j.intermet.2017.03.026

Autor(es): Francisco Espinosa Magaña , Norma Rosario Flores Holguin , Rocío Margarita Gutiérrez Pérez , Jose Andres Matutes Aquino , Sion Federico Olive Mendez , Carlos Roberto Santillan Rodriguez , Martha Teresita Ochoa Lara , Jose Trinidad Holguin

Momaca,

THEORETICAL CALCULATION OF UV-VIS, IR SPECTRA AND REACTIVITY PROPERTIES OF TAMOXIFEN DRUG: A METHODOLOGY COMPARISON. DOI: 10.15406/MOJBOC.2017.01.00017

MOJ BIOORGANIC & ORGANIC CHEMISTRY

Año: 2017

Objetivo: Investigación

Estado: Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 2574819X

DOI: 10.15406/mojboc.2017.01.00017

Autor(es): Erasmo Orrantia Borunda, Daniel Glossman Mitnik, Norma Rosario Flores Holguin, Linda Lucila Landeros Martínez,

EVALUATION OF ANTITUBERCULOSIS ACTIVITY AND DFT STUDY ON DIPYRROMETHANE-DERIVED HYDRAZONE DERIVATIVES. D.O.I. 10.1016/J.MOLSTRUC.2017.08.008

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00222860

DOI: 10.1016/j.molstruc.2017.08.008

Autor(es): Alok Ranjan , Norma Rosario Flores Holguín , Priydarshni Niranjan , Poonam Rawat ,

NEW METHODS OF ESTERIFICATION OF NANODIAMONDS IN FIGHTING BREAST CANCER - A DENSITY FUNCTIONAL THEORY APPROACH. DOI:10.3390/MOLECULES22101740

MOLECULES Año: 2017

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 14203049

DOI: 10.3390/molecules22101740

Autor(es): Linda Lucila Landeros Martinez. Erasmo Orrantia Borunda, Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holquín,

CONSTRUCTION OF A NANODIAMOND-TAMOXIFEN COMPLEX AS A BREAST CANCER DRUG DELIVERY VEHICLE DOI10.1155/2016/2682105

JOURNAL OF NANOMATERIALS

Año: 2016

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 16874110 ISSN electrónico: 16874129 DOI: 10.1155/2016/2682105

Autor(es): LINDA-LUCILA LANDEROS-MARTINEZ, Norma Flores-Holguin, DAVID CHÁVEZ-FLORES, ERASMO ORRANTIA-

BORUNDA,

DFT CHEMICAL REACTIVITY ANALYSIS OF BIOLOGICAL MOLECULES IN THE PRESENCE OF SILVER ION. DOI:10.4172 /2161-0401.1000153

ORGANIC CHEMISTRY: CURRENT RESEARCH

Año: 2015

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 21610401

DOI: 10.4172/2161-0401.1000153

Autor(es): ERASMO ORRANTIA-BORUNDA, Norma Flores-Holquin, LINDA-LUCILA LANDEROS-MARTINEZ,

UNEXPECTED ELECTRON ACCEPTOR BEHAVIOR OF THE 1,3,4-THIADIAZOLE OLIGOMER, A DFT STUDY. DOI.ORG/10. 1016/J.COMPTC.2015.06.024

COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY

Año: 2015

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 2210271X

DOI: 10.1016/j.comptc.2015.06.024

Autor(es): LUZ-MARÍA RODRÍGUEZ-VALDEZ, Norma Flores-Holguín, NORA-AYDEE SÁNCHEZ-BOJORGE, Isidoro Garcia-

Cruz,

THEORETICAL CALCULATION OF THE MAXIMUM ABSORPTION WAVELENGTH FOR CYANIDIN MOLECULES WITH SEVERAL METHODOLOGIES. DOI.ORG/10.1016/J.COMPTC.2015.06.002

COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY

Año: 2015

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 2210271X

DOI: 10.1016/j.comptc.2015.06.002

Autor(es): Norma Flores-Holguín, LUZ MARÍA RODRÍGUEZ-VALDEZ, NORA AYDEÉ SÁNCHEZ-BOJORGE, Daniel Glossman-

Mitnik,

STRUCTURE-FLUORESCENCE RELATIONSHIP: INTERPLAY OF NON-COVALENT INTERACTIONS IN HOMOLOGOUS 1,3,5-TRIARYL-2-PYRAZOLINES. DOI: 10.1039/C5NJ00179J

NEW JOURNAL OF CHEMISTRY

Año: 2015

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 11440546 ISSN electrónico: 13699261 DOI: 10.1039/c5nj00179j

Autor(es): Muhammad Moazzam, NORMA ROSARIO FLORES HOLGUIN, ASGHAR ABBAS,

COMPARATIVE STUDY OF COPPER COMPLEXES WITH DIFFERENT ANCHORING GROUPS BY MOLECULAR MODELING AND ITS APPLICATION TO DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS . DOI.ORG/10.1016/J.POLY.2014.04.044

POLYHEDRON

Año: 2014

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 02775387 DOI: 10.1016/j.poly.2014.04.044

Autor(es): Daniel Glossman-Mitnik, José Castorena-González, NORMA FLORES-HOLGUÍN, JESÚS BALDENEBRO-LÓPEZ,

QUANTUM CHEMICAL STUDY OF A NEW CLASS OF SENSITIZERS: INFLUENCE OF THE SUBSTITUTION OF AROMATIC RINGS ON THE PROPERTIES OF COPPER COMPLEXES. DOI: 10.1080/00268976.2013.825340

MOLECULAR PHYSICS

Año: 2014

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 00268976 ISSN electrónico: 13623028

DOI: 10.1080/00268976.2013.825340

Autor(es): Norma Flores-Holguín, JOSÉ CASTORENA-GONZÁLEZ, JESÚS BALDENEBRO-LÓPEZ, Daniel Glossman-Mitnik,

COMPARISON OF SEVERAL PROTOCOLS FOR THE COMPUTATIONAL PREDICTION OF THE MAXIMUM ABSORPTION WAVELENGTH OF CHRYSANTHEMIN. DOI 10.1007/S00894-014-2378-2

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2014

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/s00894-014-2378-2

Autor(es): RODY SOTO-ROJO, JESÚS BALDENEBRO-LÓPEZ, Daniel Glossman-Mitnik, Norma Flores-Holguín,

MOLECULAR DESIGN OF COPPER COMPLEXES AS SENSITIZERS FOR EFFICIENT DYE SENSITIZED SOLAR CELLS.

DOI: 10.1016/J.JPHOTOCHEM.2013.06.005

JOURNAL OF PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY A: CHEMISTRY

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 10106030

DOI: 10.1016/J.JPHOTOCHEM.2013.06.005

Autor(es): Daniel Glossman-Mitnik, José Castorena-González, NORMA FLORES-HOLGUÍN, JESÚS BALDENEBRO-LÓPEZ,

THEORETICAL STUDY OF COPPER COMPLEXES: MOLECULAR STRUCTURE, PROPERTIES, AND ITS APPLICATION TO

SOLAR CELLS. ISSN: , DOI: 10.1155/2013/613064

INTERNATIONAL JOURNAL OF PHOTOENERGY

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 1110662X ISSN electrónico: 1687529X DOI: 10.1155/2013/613064

Autor(es): Daniel Glossman-Mitnik , JOSE CASTORENA-GONZALEZ , NORMA FLORES-HOLGUIN , JORGE ALMARAL-

SANCHEZ, JESUS BALDENEBRO-LOPEZ,

DFT CALCULATION OF THE ELECTRONIC PROPERTIES OF FLUORENE-1,3,4-THIADIAZOLE OLIGOMERS, DOI 10.1007 /S00894-013-1878-9

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/S00894-013-1878-9

Autor(es): NORA AYDEÉ SÁNCHEZ-BOJORGE & amp; LUZ MARÍA ROD, Norma Flores Holguín, Luz María Rodríguez Valdez,

EXPERIMENTAL AND QUANTUM CHEMICAL STUDIES OF A NOVEL SYNTHETIC PRENYLATED CHALCONE. ISSN: , DOI: 10.1186/1752-153X-7-17

CHEMISTRY CENTRAL JOURNAL

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 1752153X **DOI:** 10.1186/1752-153X-7-17

Autor(es): DANIEL GLOSSMAN-MITNIK, NORMA R. FLORES-HOLGUÍN, JOSÉ C. ESPINOZA-HICKS, Luz Maria Rodriguez-

Valdez, ALEJANDRO A. CAMACHO-DÁVILA, GUADALUPE V. NEVÁREZ-MOORILLÓN,

COMPUTATIONAL NANOCHEMISTRY STUDY OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND PROPERTIES OF ETHAMBUTOL. DOI 10.1007/S00894-013-1884-Y

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/S00894-013-1884-Y

Autor(es): Samuel Ruiz Nieto, Lorena Gerli Candia, Norma Flores Holguín, Daniel Glossman Mitnik, Guillermo Salgado-Morán

& amp; Samuel Ruiz-Niet,

COMPUTATIONAL NANOCHEMISTRY STUDY OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND PROPERTIES OF CHLOROPHYLL A. DOI: 10.1155/2013/424620

INTERNATIONAL JOURNAL OF PHOTOENERGY

Año: 2013

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 1110662X ISSN electrónico: 1687529X DOI: 10.1155/2013/424620

Autor(es): MÓNICA ALVARADO-GONZÁLEZ, Daniel Glossman-Mitnik, NORMA FLORES-HOLGUÍN,

COMPUTATIONAL MOLECULAR NANOSCIENCE STUDY OF THE PROPERTIES OF COPPER COMPLEXES FOR DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS. DOI: 10.3390/IJMS131216005

INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES

Año: 2012

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 16616596 ISSN electrónico: 14220067 DOI: 10.3390/IJMS131216005

Autor(es): JORGE ALMARAL-SÁNCHEZ AND DANIEL GLOSSMAN-MITNIK, NORMA FLORES-HOLGUÍN, JESÚS

BALDENEBRO-LÓPEZ, JOSÉ CASTORENA-GONZÁLEZ,

DFT STUDY OF THE INTERACTION BETWEEN THE CONJUGATED FLUORESCEIN AND DABCYL SYSTEM, USING FLUORESCENCE QUENCHING DOI: 10.1007/S00894-012-1413-4

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2012

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/S00894-012-1413-4

Autor(es): MÓNICA ALVARADO-GONZÁLEZ, Daniel Glossman-Mitnik, PABLO LÓPEZ-ALBARRÁN, NORMA FLORES-

HOLGUÍN, MARCO GALLO,

A THEORETICAL STUDY OF THE CARBOCATION FORMATION ENERGY INVOLVED IN THE ISOMERIZATION OF ALPHA-PINENE. DOI: 10.1016/J.CPLETT.2012.07.071

CHEMICAL PHYSICS LETTERS

Año: 2012

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 00092614

DOI: 10.1016/J.CPLETT.2012.07.071

Autor(es): LUZ MARÍA RODRÍGUEZ-VALDEZ, NORMA FLORES-HOLGUIN, ALFREDO AGUILAR-ELGUÉZABAL, DANIEL

GLOSSMAN-MITNIK,

COMPUTATIONAL SIMULATION OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND PROPERTIES OF DYE-7 FOR ORGANIC PHOTOVOLTAICS. DOI: 10.1007/S00894-011-1120-6

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

Año: 2012

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/S00894-011-1120-6

Autor(es): NORMA FLORES-HOLGUIN, JOEL CALDERÓN-GUILLÉN, JOSÉ CASTORENA-GONZÁLEZ, JESÚS

BALDENEBRO-LÓPEZ, DANIEL GLOSSMAN-MITNIK.,

DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT) STUDY OF TRIPHENYLAMINE DYES FOR THEIR USE AS SENSITIZERS IN MOLECULAR PHOTOVOLTAICS. DOI: 10.3390/IJMS13044418

INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES

Año: 2012

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 14220067 **DOI**: 10.3390/IJMS13044418

Autor(es): JOSÉ CASTORENA-GONZÁLEZ, NORMA FLORES-HOLGUÍN, JESÚS BALDENEBRO-LÓPEZ, JORGE ALMARAL-

SÁNCHEZ, Daniel Glossman-Mitnik,

COMPUTATIONAL STUDY OF 3,4-DIPHENYL-4-(4-METOXYPHENYL)-1,2,5-THIADIAZOLINE 1,1-DIOXIDE FOR MOLECULAR PHOTOVOLTAICS, DOI: 10.1166/JCTN.2011.1661

JOURNAL OF COMPUTATIONAL AND THEORETICAL NANOSCIENCE

Año: 2011

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 15461955 **DOI:** 10.1166/JCTN.2011.1661

Autor(es): LUZ MARÍA RODRÍGUEZ-VALDEZ, NORMA FLORES-HOLGUÍN, DANIEL GLOSSMAN-MITNIK,

COMPUTATIONAL MOLECULAR CHARACTERIZATION OF THE FLAVONOID MORIN AND ITS PT(II), PD(II) AND ZN(II)

JOURNAL OF MOLECULAR MODELING

COMPLEXES, DOI: 10.1007/S00894-010-0789-2

Año: 2011

Objetivo: Investigación

Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/S00894-010-0789-2

Autor(es): ANTONINO PÉREZ-HERNÁNDEZ, MANUEL PIÑÓN-MIRAMONTES, NORMA FLORES-HOLGUÍN, Daniel

Glossman-Mitnik, SERGIO A. PAYÁN-GÓMEZ,

STRUCTURE STUDY USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY IN ORGANIC DENDRIMERS, DOI: 10.1007/S00894-010-0894-2

JOURNAL OF MOLECULAR MODELLING

Año: 2011

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 16102940 ISSN electrónico: 09485023 DOI: 10.1007/S00894-010-0894-2

Autor(es): NORMA FLORES-HOLGUÍN, LUZ MARÍA RODRÍGUEZ-VALDEZ, ROCÍO MARGARITA GUTIÉRREZ-PÉREZ,

Daniel Glossman-Mitnik,

COMPUTATIONAL MOLECULAR CHARACTERIZATION OF THE FLAVONOID RUTIN. DOI: 10.1186/1752-153X-4-12

CHEMISTRY CENTRAL JOURNAL

Año: 2010

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 1752153X **DOI**: 10.1186/1752-153X-4-12

Autor(es): MANUEL PIÑÓN-MIRAMONTERS, DANIEL GLOSSMAN-MITNIK, SERGIO A. PAYÁN-GÓMEZ, ANTONINO PÉREZ-

HERNÁNDEZ, NORMA FLORES-HOLGUÍN,

TD-DFT/IEFPCM DETERMINATION OF THE ABSORPTION AND EMISSION SPECTRA OF DABCYL. ISSN: 0166-1280, DOI: 10.1016/J.THEOCHEM.2010.01.014

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2010

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/J.THEOCHEM.2010.01.014

Autor(es): MÓNICA ALVARADO-GONZÁLEZ, DANIEL GLOSSMAN-MITNIK, ERASMO ORRANTIA-BORUNDA, MARCO

GALLO, NORMA FLORES-HOLGUÍN,

NATURAL CAROTENOIDS AS PRECURSORS OF NANOMATERIALS FOR MOLECULAR PHOTOVOLTAICS: A COMPUTATIONAL DFT STUDY. DOI: 10.3390/MOLECULES15074490

MOLECULES

Año: 2010

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 14203049

DOI: 10.3390/MOLECULES15074490

Autor(es): DANIEL GLOSSMAN-MITNIK, TERESITA RUIZ-ANCHONDO, NORMA FLORES-HOLGUÍN,

NANOMATERIALS FOR PHOTOELECTROCHEMICAL SOLAR CELLS: COMPUTATIONAL MOLECULAR

CHARACTERIZATION OF 3,4-DIPHENYL-4-(4-HYDROYPHENYL)-1,2,5-THIADIAZOLINE 1,1-DIOXIDE. DOI: HTTPS://DOI. ORG/10.14447/JNMES.V13I4.142

JOURNAL OF NEW MATERIALS FOR ELECTROCHEMICAL SYSTEMS

Año: 2010

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 14802422 DOI: 10.14447/jnmes.v13i4.142

Autor(es): LUZ MARÍA RODRÍGUEZ-VALDEZ, DANIEL GLOSSMAN-MITNIK, NORMA FLORES-HOLGUÍN,

COMPUTATIONAL PREDICTION OF THE MELTING TEMPERATURE OF A DNA BIOSENSOR TO DETECT MYCOBACTERIUM TUBERCULOSIS. DOI:10.1016/J.THEOCHEM.2009.03.003

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2009

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Estudiante es el autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2009.03.003

Autor(es): MÓNICA ALVARADO-GONZÁLEZ, DANIEL GLOSSMAN-MITNIK, NORMA FLORES-HOLGUÍN, ERASMO

ORRANTIA-BORUNDA , PAUL S. CROZIER ,

THEORETICAL CALCULATIONS OF MOLECULAR DIPOLE MOMENT, POLARIZABILITY, AND FIRST HYPERPOLARIZABILITY OF GLYCINE-SODIUM NITRATE

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE, "THEOCHEM"

Año: 2009

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2009.03.014

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguín, Javier Hernández Paredes, Alberto Duarte Moller,

COMPUTATIONAL NOTE ON THE CHEMICAL REACTIVITY OF PYRROL DERIVATIVES. DOI:10.1016/J.THEOCHEM. 2009.07.037

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2009

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) para correspondencia

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2009.07.037

Autor(es): NORA SÁNCHEZ-BOJORGE, DANIEL GLOSSMAN-MITNIK, LUZ M. RODRÍGUEZ-VALDEZ, NORMA FLORES-

HOLGUÍN,

THEORETICAL STUDY OF ELECTRONIC PROPERTIES OF ORGANIC PHOTOVOLTAIC MATERIALS. DOI 10.1002/JCC. 21126

JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY

Año: 2009

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a)

ISSN impreso: 1096987X **DOI:** 10.1002/jcc.21126

Autor(es): Norma Flores Holguin , Erika Lopez Martínez , Luz María Rodríguez Valdez , Alfredo Márquez Lucero , Daniel Glossman Mitnik ,

COMPUTATIONAL NOTE ON THE CALCULATION OF THE DIPOLE MOMENT, POLARIZABILITY AND HIPERPOLARIZABILITY OF SOLANIDINE. DOI:10.1016/J.THEOCHEM.2007.09.022

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Año: 2008

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2007.09.022

Autor(es): Luz María Rodríguez Valdez, Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik,

CHIH-DFT COMPUTATIONAL MOLECULAR CHARACTERIZATION OF PHENANTHRO[9,10,-C]-1,2,5-THIADIAZOLE 1,1-DIOXIDE. DOI:10.1016/J.THEOCHEM.2008.04.030

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE: THEOCHEM

Año: 2008

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2008.04.030

Autor(es): Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik, Luz Maria Rodriguez Valdez,

THEORETICAL STUDY OF CHEMICAL REACTIVITY OF THE MAIN SPECIES IN THE ALPHA-PINENE ISOMERIZATION REACTION. DOI:10.1016/J.THEOCHEM.2007.12.046

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Año: 2008

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2007.12.046

Autor(es): Luz María Rodríguez Valdez, Alfredo Aguilar Elguézabal, Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik,

CHIH-DFT DETERMINATION OF THE ELECTRICAL, OPTICAL, AND MAGNETIC PROPERTIES AND NICS AROMATICITY OF MEGAZOL. DOI:10.1016/J.THEOCHEM.2004.10.089

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE, (THEOCHEM)

Año: 2005

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2004.10.089

Autor(es): Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik,

CHIH-DFT DETERMINATION OF THE REACTIVITY SITES OF THE ANTIPARASITIC DRUG MEGAZOL ELSEVIER B.V. ALL RIGHTS RESERVED. DOI:10.1016/J.THEOCHEM.2005.02.048

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE, (THEOCHEM)

Año: 2005

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2005.02.048

Autor(es): Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik,

DETERMINATION OF THE MOLECULAR STRUCTURE, INFRARED AND ULTRAVIOLET SPECTRA OF THE ANTIPARASITIC DRUG MEGAZOL. DOI:10.1016/J.THEOCHEM.2004.04.056

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE, (THEOCHEM),

Año: 2004

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 10.1016/j.theochem.2004.04.056

Autor(es): Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik,

AN INTRODUCTORY STUDY OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND PROPERTIES OF OLIGOTHIADIAZOLES

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE, (THEOCHEM),

Año: 2003

Objetivo: Investigación **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

ISSN impreso: 01661280

DOI: 0.1016/S0166-1280(03)00253-7

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holguin,

CAPÍTULOS

ABOUT THE COMPUTATIONAL PREDICTION OF THE MAXIMUM ABSORPTION WAVELENGTHS OF INDIGO IN DIFFERENT SOLVENTS WITH THE MINNESOTA FAMILY OF DENSITY FUNCTIONALS,

BOOK PUBLISHERS INTERNATIONAL

Año: 2021

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: About the Computational Prediction of the Maximum Absorption Wavelengths of Indigo in Different Solvents

with the Minnesota Family of Density Functionals,

Número del capítulo: 8 Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) DOI: 10.9734/bpi/nicb/v1/12155D

ISBN: 9789391473815

Autor(es): Norma Flores Holguin, Juan Frau, Daniel glossman mitnik,

STUDY ON THE COMPUTATIONAL NUTRACEUTICS OF A CITRUS FLAVONOID: AN APPROACH USING CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY (CDFT),

BOOK PUBLISHERS INTERNATIONAL

Año: 2021

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Study on the Computational Nutraceutics of a Citrus Flavonoid: An Approach Using Conceptual Density

Functional Theory (CDFT), **Número del capítulo:** 10

Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) DOI: 10.9734/bpi/nicb/v1/12157D

ISBN: 9789391473815

Autor(es): Norma Flores Holguin , Juan Frau , Daniel Glossman Mitnik ,

DETERMINING THE INFORMATICS AND CONCEPTUAL DFT STUDY OF PIGMENTS DERIVED FROM CAROTENOIDS OF MARINE ORIGIN

BOOK PUBLISHERS INTERNATIONAL

Año: 2021

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Determining the Informatics and Conceptual DFT Study of Pigments Derived from Carotenoids of Marine

Origin

Número del capítulo: 11 Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) DOI: 10.9734/bpi/nicb/v1/12158D

ISBN: 9789391473815

Autor(es): Norma Flores Holguin, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

CONCEPTUAL DFT AS A HELPFUL CHEMOINFORMATICS TOOL FOR THE STUDY OF THE CLAVANIN FAMILY OF ANTIMICROBIAL MARINE PEPTIDE

INTECH Año: 2021

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Conceptual DFT as a Helpful Chemoinformatics Tool for the Study of the Clavanin Family of Antimicrobial

Marine Peptide

Número del capítulo: 4 Estado: Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

DOI: 10.5772/intechopen.88657

ISBN: 9781838810832

Autor(es): Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik, Juan Frau,

DETERMINATION OF CHEMICAL REACTIVITIES OF OXYTOCIN AND VASOPRESSIN PEPTIDE HORMONES STUDIED THROUGH CONCEPTUAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY (CDFT) AND MOLECULAR ELECTRON DENSITY THEORY (MEDT)

BOOK PUBLISHERS INTERNATIONAL

Año: 2021

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Determination of Chemical Reactivities of Oxytocin and Vasopressin Peptide Hormones Studied through

Conceptual Density Functional Theory (CDFT) and Molecular Electron Density Theory (MEDT)

Número del capítulo: 3 Estado: Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

DOI: 10.9734/bpi/nicb/v2/4072F

ISBN: 978939188280

Autor(es): Norma Flores Holguin, Juan Frau, daniel glossman mitnik,

REPURPOSING DRUGS FOR THE INHIBITION OF ADVANCED GLYCATION INHIBITION: A COMPUTATIONAL STUDY OF THE CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF THE MET-ENKEPHALIN NEUROTRANSMITTER PEPTIDE BY MEANS OF CONCEPTUAL DFT

NOVA SCIENCE PUBLISHERS

Año: 2021

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Repurposing Drugs for the Inhibition of Advanced Glycation Inhibition: A Computational Study of the Chemical

Reactivity Properties of the Met-Enkephalin Neurotransmitter Peptide by Means of Conceptual DFT

Número del capítulo: 8 Estado: Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

DOI: 0

ISBN: 9781536191769

Autor(es): Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik, Juan Frau,

STUDY ON THE MOLECULAR REACTIVITY OF THE DANSYLGLYCINE IN WATER AND DIOXANE ESTIMATED THROUGH CONCEPTUAL DFT

BOOK PUBLISHERS INTERNATIONAL

Año: 2021

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Study on the Molecular Reactivity of the Dansylglycine in Water and Dioxane Estimated through Conceptual

DFT

Número del capítulo: 9 Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) DOI: 10.9734/bpi/nicb/v1/12156D

ISBN: 9789391473815

Autor(es): Norma Flores Holguin, Juan frau, Daniel Glossman Mitnik,

REVISITING THE VALIDATION OF THE KID METHODOLOGY THROUGH CDFT DESCRIPTORS OF FLUORESCENT DNA STAINING DYES.

BOOK PUBLISHERS INTERNATIONAL

Año: 2021

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Revisiting the Validation of the KID Methodology through CDFT Descriptors of Fluorescent DNA Staining Dyes,

Número del capítulo: 5 **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) **DOI:** 10.9734/bpi/cacs/v2/2422F

ISBN: 9789391312077

Autor(es): Norma Flores Holguin, Juan Frau, Daniel Glossman Mitnik,

CONCEPTUAL DFT AS A NOVEL CHEMOINFORMATICS TOOL FOR STUDYING THE CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES OF THE AMATOXIN FAMILY OF FUNGAL PEPTIDES

VIDE LEAF Año: 2020

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Conceptual DFT as a Novel Chemoinformatics Tool for Studying the Chemical Reactivity Properties of the

Amatoxin Family of Fungal Peptides

Número del capítulo: 12 Estado: Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

DOI: 10.1515/chem-2019-0129

ISBN: 9789390014088

Autor(es): Norma Flores Holguin , Daniel Glossman Mitnik , Juan Frau ,

CDFT-BASED REACTIVITY DESCRIPTORS AS A USEFUL MEDT CHEMOINFORMATICS TOOL FOR THE STUDY OF THE VIROTOXIN FAMILY OF FUNGAL PEPTIDES

VIDE LEAF Año: 2020

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: CDFT-Based Reactivity Descriptors as a Useful MEDT Chemoinformatics Tool for the Study of the Virotoxin

Family of Fungal Peptides Número del capítulo: 18 Estado: Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

DOI: 10.3390/molecules24152707

ISBN: 9788194517528

Autor(es): Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik, Juan Frau,

CHEMICAL REACTIVITY PROPERTIES AND BIOACTIVITY SCORES OF THE ANGIOTENSIN II VASOCONSTRICTOR OCTAPEPTIDE

INTECH

Año: 2020

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Chemical Reactivity Properties and Bioactivity Scores of the Angiotensin II Vasoconstrictor Octapeptide

Número del capítulo: 5 Estado: Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

DOI: 10.5772/intechopen.86736

ISBN: 9781839625183

Autor(es): Norma Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik, Juan Frau,

A COMBINED MOLECULAR DOCKING AND ELECTRONIC STRUCTURE STUDY FOR A BREAST CANCER DRUG DESIGN

INTECH

Año: 2018

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: A Combined Molecular Docking and Electronic Structure Study for a Breast Cancer Drug Design

Número del capítulo: 7 **Estado:** Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) DOI: 10.5772/intechopen.72895

ISBN: 9789535158547

Autor(es): Daniel Glossman Mitnik, Norma Flores Holquin, Linda Lucila Landeros Martínez,

ASSESSMENT OF THE VALIDITY OF SOME MINNESOTA DENSITY FUNCTIONALS FOR THE PREDICTION OF THE CHEMICAL REACTIVITY OF THE SYBR GREEN I AND ETHIDIUM BROMIDE NUCLEIC ACID STAINS

INTECH

Año: 2018

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: Assessment of the Validity of Some Minnesota Density Functionals for the Prediction of the Chemical

Reactivity of the SYBR Green I and Ethidium Bromide Nucleic Acid Stains

Número del capítulo: 3 Estado: Publicado

Rol de participación: Co-autor (a) **DOI:** 10.5772/intechopen.70455 **ISBN:** 978-953-51-56826

Autor(es): Norma Rosario Flores Holguin, Daniel Glossman Mitnik,

MOLECULAR DESIGN OF ORGANIC NONLINEAR OPTICAS : DIPOLE MOMENT, POLARIZABILITY AND HIPERPOLARIZABILITIES OF THIADIAZOLE OLIGOMERS INVESTIGATED BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY METHODS

PROCEEDINGS OF SPIE

Año: 2002

Objetivo: Investigación

Título del capítulo: MOLECULAR DESIGN OF ORGANIC NONLINEAR OPTICAS : DIPOLE MOMENT, POLARIZABILITY AND HIPERPOLARIZABILITIES OF THIADIAZOLE OLIGOMERS INVESTIGATED BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY METHODS

Número del capítulo: 0 **Estado:** Publicado

Rol de participación: Autor (a) principal

DOI: 0 **ISBN:** 0

Autor(es): Norma Flores-Holguin,

DIFUSIÓN

ARTÍCULOS

THEORETICAL AND EXPERIMENTAL STUDY OF DIFFERENT CHEMICAL ROUTES TO SYNTHESIZE CRYSTALLINE SODIUM METASILICATE FROM SILICA-RICH SAND

REVISTA MEXICANA DE INGENIERÍA QUÍMICA

Año: 2019

ISSN electrónico: 23958472

Autor(es): Norma Flores Holquin, Armando Tejeda Ochoa, Caleb Carreño Gallardo, José Ernesto Ledezma Sillas, José Martín

Herrera Ramírez,

PARTICIPACIÓN EN CONGRESOS

27ÈME CONGRÈS DE CHEMISTES THÈORICIENS D¿EXPRESSION LATINE (CHITEL 2001), TOULOUSE, FRANCIA, SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE LA ESTRUCTURA Y REACTIVIDAD QUÍMICA DE OLIGOTIADIAZOLES

2001-09-07

FRANCE

9TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON THE APPLICATIONS OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY IN CHEMISTRY AND PHYSICS (DFT 2001), SAN LORENZO DE EL ESCORIAL, MADRID, ESPAÑA, DFT COMPUTATIONAL TERMOCHEMISTRY OF OLIGOTHIADIAZOLES

2001-09-12

SPAIN

ELECTRONIC STRUCTURE AND CHEMICAL REACTIVITY INTERNATIONAL SIMPOSIUM (ESCR 2001), COMPUTATIONAL SIMULATION OF THE MOLECULAR STRUCTURE OF OLIGOTHIADIAZOLES,

2001-09-20

SPAIN

VII INTERNATIONAL CONFERENCE ON ADVANCED MATERIALS, CANCÚN, MÉXICO A THEORETICAL STUDY ON THE AROMATICITY OF THIADIAZOLES AND RELATED COMPOUNDS.

2001-08-28

MÉXICO

VII INTERNATIONAL CONFERENCE ON ADVANCED MATERIALS
A DFT APPROACH TO THE MOLECULAR STRUCTURE AND NONLINEAR OPTICAL PROPERTIES OF OXYDIZED THIADIAZOLE DERIVATES.

2001-08-29

MÉXICO

VII INTERNATIONAL CONFERENCE ON ADVANCED MATERIALS SEMIEMPIRICAL CALCULATIONS ON EMULSION POLYMERIZATION PRECURSORS

2001-08-29

MÉXICO

VII INTERNATIONAL CONFERENCE ON ADVANCED MATERIALS, CANCÚN, MÉXICO, COMPUTATIONAL SIMULATION OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND PROPERTIES OF OLIGOTHIADIAZOLES

2001-08-27

MÉXICO

VII INTERNATIONAL CONFERENCE ON ADVANCED MATERIALS NONLINEAR OPTICAL PROPERTIES OF THIADIAZOLE OLIGOMERS 2001-08-28 MÉXICO VII INTERNATIONAL CONFERENCE ON ADVANCED MATERIALS DFT COMPUTATIONAL THERMOCHEMISTRY OF OLIGOTHIADIAZOLES 2001-08-29 MÉXICO THE INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON OPTICAL SCIENCE AND TECHNOLOGY, SPIE'S 47TH ANNUAL MEETING MOLECULAR DESIGN OF ORGANIC NONLINEAR OPTICAS: DIPOLE MOMENT, POLARIZABILITY AND HIPERPOLARIZABILITIES OF THIADIAZOLE OLIGOMERS INVESTIGATED BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY METHODS 2002-09-19 MÉXICO 4TH EUROPEAN COMPUTATIONAL CHEMISTRY CONFERENCE (EUCO CC4) COMPUTATIONAL SIMULATION OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND PROPERTIES OF OLIGOTHIADIAZOLES 2002-09-04 **ITALY ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS (ESPA 2002)** NEW MATERIALS FOR OPTICS AND ELECTRONICS: DFT CALCULATIONS OF OLIGOTHIADIAZOLES. 2002-09-12 **SPAIN** PRIMERA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUIMICA TEORICA SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE LA ESTRUCTURA MOLECULAR Y PROPIEDADES DE LOS OLIGOTIADIAZOLES 2002-12-12 MÉXICO SEGUNDA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUIMICA TEORICA CARACTERIZACIÓN COMPUTACIONAL DE ANTIPARASITARIOS BASADOS EN EL ANILLO TIADIAZÓLICO 2003-11-20 MÉXICO SEMANA DE NANOTECNOLOGÍA EN CIMAV. LABORATORIO DE QUÍMICA COMPUTACIONAL 2004-01-15 MÉXICO TERCERA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA, CARACTERIZACIÓN COMPUTACIONAL DE LA MOLÉCULA DE MEGAZOL Y SUS ANÁLOGOS 2004-11-19 MÉXICO

XVII CONGRESO NACIONAL DE LA SOCIEDAD POLIMÉRICA DE MÉXICO SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE LA ESTRUCTURA MOLECULAR Y PROPIEDADES DE LOS OLIGOTIADIAZOLES 2004-11-25

MÉXICO

CUARTA REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA ESTUDIO TEÓRICO DE LA REACTIVIDAD DE LAS MOLÉCULAS DE ALFA; PINENO, CANFENO Y LIMONENO

MÉXICO **QUINTA REUNION MEXICANA DE FISICOQUIMICA TEORICA** ESTUDIO TEORICO ESTADISTICO DE LAS MOLECULAS DE MEGAZOL Y ANALOGOS 2005-11-17 MÉXICO PAN AMERICAN ADVANCED STUDY INSTITUTE PASI 2007 A STUDY OF THE MOLECULAR STRUCTURE AND PROPERTIES OF OLIGOTHIADIAZOLES 2007-07-18 MÉXICO SEXTA REUNION MEXICANA DE FISICOQUIMICA TEORICA ESTUDIO TEORICO DEL MECANISMO DE REACCION DEL ALFA PINENO A CANFENO 2007-11-15 MÉXICO 3RD MEXICAN WORKSHOP ON NANOSTRUCTURED MATERIALS ESTUDIO TEÓRICO DE LAS ENERGÍAS DE FORMACIÓN DE CARBOCATIONES PRESENTES EN LA ISOMERIZACIÓN DEL **ALFA-PINENO** 2008-06-11 MÉXICO 3RD MEXICAN WORKSHOP ON NANOSTRUCTURED MATERIALS ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE MATERIALES ORGÁNICOS SEMICONDUCTORES Y SUS **DERIVADOS** 2008-06-11 MÉXICO **V CONGRESO CIMAV** ESTUDIO TEORICO DE LAS PROPIEDADES INDICADORAS DEL DESEMPEÑO COMO SEMICONDUCTORES DE **DERIVADOS PIRROLICOS** 2008-11-21 MÉXICO 6TH CONGRESS ON ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS ESPA 2008 THEORETICAL STUDY OF CHEMICAL REACTIVITY OF PYRROL DERIVATES 2008-09-02 **SPAIN** VII REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA ESTUDIO DE LA ESTRUCTUDETRA Y PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE DERIVADO SPIRRÓLICOS Y FULLERENO, EMPLEANDO LA TEORÍA DE FUNCIONALES DE LA DENSIDAD 2008-11-14 **MÉXICO**

XXXIII SEMANA DE LA QUÍMICA

ESTUDIO TEÓRICO DE LOS SITIOS DE REACCIÓN EN DERIVADOS PIRRÓLICOS

2008-10-16

MÉXICO

XVIII INTERNATIONAL MATERIALS RESEARCH CONGRESS (ICM 2009)
THEORETICAL STUDY OF THE ELECTRONIC STRUCTURE IN ORGANIC MOLECULES AND THE APPLICATIONS IN PHOTOVOLTAIC DEVICES

XVIII INTERNATIONAL MATERIALS RESEARCH CONGRESS (ICM 2009)

THIADIAZOLES AS ORGANIC PHOTOVOLTAIC MATERIALS: A THEORETICAL PROPERTIES STUDY

2009-08-20

MÉXICO

PRIMER REUNION DE MATERIALES 2009 QUIMICA COMPUTACIONAL, CONCEPTOS Y OPORTUNIDADES

2009-10-22

MÉXICO

65TH SOUTHWEST REGIONAL MEETING OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY COMPUTATIONAL STUDY OF ELECTRONIC PROPERTIES IN PIRROLIC DERIVATIVES AND THEIR APPLICATIONS IN PHOTOVOLTAIC DEVICES

2009-11-05

UNITED STATES OF AMERICA

SEXTA REUNION MEXICANA DE FISICOQUIMICA TEORICA

DETERMINACIÓN TEÓRICA DE ESPECTROS ELECTRÓNICOS EN MATERIALES FOTOVOLTAICOS ORGÁNICOS.

2007-11-15

MÉXICO

V JORNADAS DE INVESTIGACION XXXIV SEMANA DE QUIMICA

DERIVADOS PIRROLICOS EMPLEADOS COMO SEMICONDUCTORES ORGANICOS: UN ESTUDIO QUIMICO CUANTICO

2009-10-14

MÉXICO

, XIX INTERNATIONAL MATERIALS RESEARCH CONGRESS

INVESTIGATION OF PYRENE AND ITS DERIVATIVES FOR PHOTOVOLTAIC APPLICATION,S

2010-08-17

MÉXICO

XIX INTERNATIONAL MATERIALS RESEARCH CONGRESS

DENSITY FUNCTIONAL THEORY STUDY OF SPECTROSCOPIC PROPERTIES OF CHLOROPHYLL A AND ANALOGUES **MOLECULES**

2010-08-17

MÉXICO

IX REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

ESTUDIO QUÍMICO TEÓRICO DE OLIGÓMEROS DE FLUOROTIADIAZOLES Y SU APLICACIÓN EN DISPOSITIVOS **FOTOVOLTAICOS**

2010-11-11

MÉXICO

IX REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

ANÁLISIS TEÓRICO DE LAS PROPIEDADES DEL ESTADO EXCITADO EN SEMICONDUCTORES ORGÁNICOS CON **PIRENO SUSTITUIDO**

2010-11-12

MÉXICO

IX REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

MODELADO Y ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LAS PROPIEDADES MOLECULARES DE UN BIOSENSOR PARA

DETECTAR MYCROBACTERIUM TUBERCULOSIS 2010-11-11 MÉXICO PHOTOVOLTAIC TECHNICAL CONFERENCE - THIN FILM ADVANCED SOLUTIONS 2011. THEORETICAL STUDY OF FLUORENE-THIADIAZOLE OLIGOMERS FOR PHOTOVOLTAIC 2011-05-25 **FRANCE** 3RD HYBRID AND ORGANIC PHOTOVOLTAICS CONFERENCE - HOPV 2011. NANOMATERIALS FOR MOLECULAR AND ORGANIC PHOTOVOLTAICS: THE CONCEPTUAL DFT PERSPECTIVE, 2011-05-12 **SPAIN** II MEETING OF THE BRAZIL-MÉXICO NANOTECHNOLOGY CENTER (CBMNANO), XX INTERNATIONAL MATERIALS RESEARCH CONGRESS THEORETICAL ANALYSIS OF THE ELECTRONIC STRUCTURE IN SUBSTITUTED PYRENE COMPOUNDS AS ORGANIC **SEMICONDUCTORS** 2011-08-17 MÉXICO II MEETING OF THE BRAZIL-MÉXICO NANOTECHNOLOGY CENTER (CBMNANO), XX INTERNATIONAL MATERIALS RESEARCH CONGRESS, THEORETICAL STUDY OF CHEMICAL FLUORENE-THIADIAZOLE OLIGOMERS AND ITS APPLICATION IN PHOTOVOLTAIC DEVICES 2011-08-17 MÉXICO 4TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON HYBRID AND ORGANIC PHOTOVOLTAICS DFT STUDY OF TRIPHENYLAMINE-BASED DYES FOR THEIR USE AS SENSITIZERS IN MOLECULAR PHOTOVOLTAICS 2012-05-08 **SWEDEN** INTERNATIONAL MATERIALS RESEARCH CONGRESS SILVER REACTIVITY WITH BIOLOGICAL MOLECULES, A THEORETICAL STUDY 2012-08-15 MÉXICO XI REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA CARACTERIZACIÓN TEÓRICA DE TINTES PERTENECIENTES A LA FAMILIA DE ANTOCIANINAS PARA SU APLICACIÓN EN CELDAS SOLARES SENSIBILIZADAS AL COLORANTE 2012-11-08 **MÉXICO**

XI REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LAS PROPIEDADES DE COMPLEJOS DE COBRE PARA SU USO EN CELDAS SOLARES SENSIBILIZADAS AL COLORANTE

2012-11-08

MÉXICO

XI REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA ANÁLISIS DE LAS PROPIEDADES DE TRANSPORTE DE CARGA EN DENDRÍMEROS UTILIZANDO DFT 2012-11-08

MÉXICO

XI REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA ESTUDIO TEÓRICO DE NANOTUBOS DE CARBONO FUNCIONALIZADOS 2012-11-08 MÉXICO XI REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA THEORETICAL STUDY OF THE INTERACTION BETWEEN THE CONJUGATED FLUORESCEIN AND DABCYL SYSTEM. USING FLUORESCENE QUENCHING METHOD 2012-11-08 MÉXICO XI REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA REACTIVIDAD DE LA PLATA CON MOLÉCULAS BIOLÓGICAS 2012-11-09 MÉXICO XXXIX CONGRESO INTERNACIONAL DE QUÍMICOS TEÓRICOS DE EXPRESIÓN LATINA - QUITEL 2013 COMPARISON OF SEVERAL PROTOCOLS FOR THE COMPUTATIONAL PREDICTION OF THE ABSORPTION SPECTRUM **OF CHRYSANTHEMIN** 2013-07-03 **SPAIN HYBRID AND ORGANIC PHOTOVOLTAICS CONFERENCE - HOPV 13** MOLECULAR DESIGN OF COPPER COMPLEXES AS SENSITIZERS FOR EFFICIENT DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS 2013-05-29 **SPAIN** INTERNATIONAL CONFERENCE ON SIMULATION OF ORGANIC ELECTRONICS AND PHOTOVOLTAICS, Study of the Molecular Properties and the Chemical Reactivity of Coumarin Based Photosensitizers for Dye Sensitized Solar Cells Using Density Functional Theory 2014-10-02 **SPAIN** INTERNATIONAL CONFERENCE ON SIMULATION OF ORGANIC ELECTRONICS AND PHOTOVOLTAICS, A Theoretical Characterization of Charge-Transport Properties in Organic Semiconductors 2014-10-03 **SPAIN** INTERNATIONAL CONFERENCE ON SIMULATION OF ORGANIC ELECTRONICS AND PHOTOVOLTAICS. Theoretical Characterization of Pyranoanthocyanin Donor-¿-Acceptor Organic Semiconductors 2014-10-02 **SPAIN** XIII REUNIÓN MEXICANA DE FÍSICO QUÍMICA TEÓRICA Estudio teórico comparativo de complejos de cobre con diferentes grupos de anclaje y su aplicación en DSSC 2014-11-08 MÉXICO XIII REUNIÓN MEXICANA DE FÍSICO QUÍMICA TEÓRICA

Derivados moleculares de cumarinas para celdas solares sensibilizadoas por colorante: un estudio DFT

2014-11-08 MÉXICO

XIII REUNIÓN MEXICANA DE FÍSICO QUÍMICA TEÓRICA CARACTERIZACION TEORICA DE COLORANTES DEL TIPO DONADOR pi ACEPTOR FORMADOS A PARTIR DE ANTOCIANIDINAS 2014-11-07 MÉXICO XIII REUNIÓN MEXICANA DE FÍSICO QUÍMICA TEÓRICA

Reactividad química global y local de carbodiimidas

2014-11-07

MÉXICO

XIV REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Energías de formación en reacciones de funcionalización de nanotubos de carbono

2015-11-19

MÉXICO

EXPO-FORO 2015 CHIHUAHUA VIVE INOVANDO

Funcionalización de nanodiamantes con tamoxifen

2015-10-01

MÉXICO

EXPO-FORO 2015 CHIHUAHUA VIVE INOVANDO

Evaluación computacional de cumarinas para celdas solares sensibilizadas al colorante

2015-10-01

MÉXICO

EXPO-FORO 2015 CHIHUAHUA VIVE INOVANDO

Funcionalización de nanotubos de carbono

2015-10-01

MÉXICO

XXIV INTERNATIONAL MATERIALS RESEARCH CONGRESS

THEORETICAL CHARACTERIZATION OF DONOR-p-ACCEPTOR ORGANIC SEMICONDUCTORS

2015-01-01

MÉXICO

XXIV INTERNATIONAL MATERIALS RESEARCH CONGRESS
THEORETICAL INVESTIGATION OF THE ELECTRONIC AND CHARGE-TRANSPORT PROPERTIES IN ORGANIC SEMICONDUCTORS

2015-08-19

MÉXICO

XXV INTERNATIONAL MATERIALS RESEARCH CONGRESS 2016
DFT CALCULATION OF REACTIVITY PARAMETERS OF CELL-SURFACE RECEPTORS

2016-08-17

MÉXICO

NTERNATIONAL CONFERENCE ON NANOMEDICINE AND NANOBIOTECHNOLOGY & ICONAN 2016
THEORETICAL REACTIVITY OF CELL-SURFACE RECEPTORS IN PRESENCE OF NANODIAMONDS AS CARRIERS
2016-09-30

FRANCE

80 CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA MULTIDISCIPLINARIA 2016 PREDICCIÓN DE LA REACTIVIDAD QUÍMICA DE TAMOXIFENO EN RECEPTORES HORMONALES

XV REUNÍON MEXICANA DE FISICO QUÍMICA TEÓRICA

Estudio teórico-experimental de funcionalización de nanotubos de carbono con moléculas biológicas por el método de amidación utilizando diferentes activadores

2016-11-18

MÉXICO

XV REUNÍON MEXICANA DE FISICO QUÍMICA TEÓRICA

Reactividad química del dominio de unión de los receptores hormonales con el tamoxifeno y sus diferentes metabolitos 2016-11-18

MÉXICO

14TH INTERNATIONAL DFT CONFERENCE APPLICATIONS IN PHYSICS, CHEMISTRY, BIOLOGY AND PHARMACY DFT Nanomaterials for Molecular and Organic Photovoltaics: The Conceptual DFT Perspective

2011-09-01

GREECE

XVI REUNION MEXICANA DE FISICOQUIMICA TEORICA

DINÁMICA MOLECULAR DE LA PERMEABILIDAD DE NANOTUBOS DE CARBONO Y NANODIAMANTES EN UNA BICAPA LIPÍDICA

2017-11-16

MÉXICO

XVI REUNION MEXICANA DE FICISOQUIMICA TEORICA

DFT STUDIES OF MAXIMUM WAVELENGTH AND GEOMETRIC PARAMETERS OF ANTHOCYANIN FAMILY USING DIFFERENT METHODOLOGIES

2017-11-16

MÉXICO

XVI REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUIMICA TEÓRICA

INTERACCIONES MOLECULARES DE AFLATOXINAS CON EL CITOCROMO P450

2017-11-16

MÉXICO

NOVENO CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA MULTIDISCIPLINARIA

Análisis de nuevas propuestas de esterificación del nanodiamante con tamoxifeno dirigido a receptores del cáncer mamario

2017-11-17

MÉXICO

NOVENO CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA MULTIDISCIPLINARIA EL MODELADO MOLECULAR, LA QUÍMICA COMPUTACIONAL Y SUS APLICACIONES.

2017-11-17

MÉXICO

OCTAVO CONGRESO INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA MULTIDISCIPLINARIO

Predicción de la reactividad química de Tamoxifeno en receptores hormonales

2016-11-18

MÉXICO

INTERNATIONAL CONFERENCE ON NANOMEDICINE AND NANOBIOTECHNOLOGY

Chemical Reactivity of the Domain of Union of the Hormonal Receptors with the Tamoxifen and its Different Metabolites

SPAIN

XVII REUNIÓN MEXICANA DE FÍSICO QUÍMICA TEÓRICA

Permeabilidad de Nanotubos de Carbono en una bicapa lípidica

2018-11-23

MÉXICO

XVII REUNIÓN MEXICANA DE FÍSICO QUÍMICA TEÓRICA

Electron injection in anthocyanidin and betalain dyes for dye-sensitized solar cells

2018-11-25

MÉXICO

XVIII REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

El grado de oxidación de una membrana celular y la respuesta en sus propiedades

2019-10-25

MÉXICO

XVIII REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Modifications of the molecular structure of Aurantinidin dyes for DSSCs

2019-10-26

MÉXICO

8VO. ENCUENTRO EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA (ENCITE 8)

Aplicaciones del modelado molecular en nanobiotecnología

2020-12-12

MÉXICO

XIX REUNIÓN MEXICANA DE FISICOQUÍMICA TEÓRICA

Permeabilidad de Antioxidantes a través de un Modelo de Bicapa Lipídica con Simulaciones de Grano Grueso

2021-11-18

MÉXICO

1ER. CONGRESO NACIONAL DE NANOTECNOLOGÍA Y ENERGÍAS RENOVABLES

El Modelado Molecular y la Química Computacional en el diseño de fármacos

2023-10-18

MÉXICO

EVALUACIONES

FONDO INFRAESTRUCTURA INFR-2013-01

CONACYT | 2013-07-19

El incremento en la satisfacción de las demandas de combustibles fósiles se ha convertido en una preocupación mundial, como consecuencia del agotamiento y sobrexplotación de los hidrocarburos. Aunado a esto, existen graves problemas ambientales que han producido un calentamiento global, resultado del incremento de estas emisiones de carbono. México tiene una fuerte dependencia energética de los combustibles fósiles, tanto así, que la gasolina y el diesel son los productos que más se importan. Se estima que al ritmo de extracción actual, las reservas de petróleo duren aproximadamente 30 años, y que además, los precios del petróleo continúen incrementándose a nivel mundial, lo que ocasionará un grave problema para satisfacer las demandas energéticas que el país requiere. Así, en vías de garantizar un desarrollo energético sustentable que favorezca el crecimiento económico del país, es necesario impulsar la investigación de nuevos materiales catalíticos para fuentes alternas de energía.

FONDO INFRAESTRUCTURA INFR-2013-01

CONACYT | 2013-07-19

considerando la importancia de los organismos fúngicos como fuentes primarias en la biosíntesis de metabolitos secundarios únicos y activos, es de particular interés la creación de nuevas colecciones de organismos fúngicos de nuestro país aislados a partir de localidades inexploradas, como son hongos endófitos, terrestres y/o acuáticos, lo que representa un punto de partida fundamental para futuros desarrollos biotecnológicos, además de que se ha demostrado que el descubrimiento de organismos novedosos generalmente conlleva a la obtención de entidades químicas únicas.

FONDO INFRAESTRUCTURA " 10015 " EN SU CONVOCATORIA INFR-2013-01

CONACYT | 2013-07-19

Con este proyecto pretendemos estudiar propiedades fisicoquímicas tales como estructura, textura y propiedades rédox de catalizadores de óxido de hierro y su influencia en la actividad catalítica para transformar glicerol a acroleína o alcohol alílico. Nos interesa hierro pues es un metal con propiedades catalíticas para la reducción y oxidación parciales y, además, los procesos con hierro son ambientalmente amigables. Por su parte el glicerol es un subproducto de la trasformación de biomasa a diesel. En el mundo, las plantas que producen glicerol están cerrando y se están abriendo otras que utilizan al glicerol como compuesto de inicio para sintetizar productos de mayor valor agregado y reducir así los costos de producción del biodiesel

FONDO SEP - CONACYT CONVOCATORIA: CB-2010-01

CONACYT | 2011-05-02

El Estado de Veracruz posee una abundante variedad de especies vegetales. De dichas especies puede extraerse, a su vez, una gran variedad de compuestos con posible actividad biológica. La Unidad SARA de la Universidad Veracruzana está llevando a cabo estudios experimentales de diversos tipos de compuestos como los anteriormente mencionados, sin embargo, con la ayuda de un extenso análisis teórico de los mismos, así como la búsqueda de nuevos compuestos derivados de aquellos de origen natural, se pueden desarrollar nuevos productos fitofarmacéuticos con potencial aplicación como agentes terapéuticos de una forma más rápida y eficaz.

FONDO FONDO SEP - CONACYT, CIENCIA BASICA CB-2011-01

CONACYT | 2011-10-07

Nuestro proyecto con título Determinación teórica del incremento en la eficiencia de celdas solares plásticas tipo heterouniónbulto al variar el tipo de donadores poliméricos, tiene como objetivo general contribuir al aumento de la eficiencia de celdas solares orgánicas tipo heterounión-bulto, mediante el entendimiento a nivel molecular (vía cálculos ab-initio) del proceso de generación de las cargas (corriente) en la capa activa de dichas celdas

FONDO SEP - CONACYT, INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA BÁSICA 2014

CONACYT | 2014-10-06

En este proyecto se caracterizará a nivel molecular la unión de Cu(II) y Zn(II) a la Amilina humana y de rata, para elucidar los diferentes modos de coordinación de Cu(II) y Zn(II) a la hormona y entender su efecto en el mecanismo de formación de fibras amiloides. Comprender las causas de la formación de fibras amiloides y como evitar su formación es muy importante, pues en principio, inhibir la formación de oligómeros y fibras amiloides podría ser un tratamiento potencial para prevenir la diabetes tipo 2, que actualmente es un problema que afecta a la mitad de la población mundial.

FONDO SEP - CONACYT, INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA BÁSICA 2015

CONACYT | 2015-09-14

Evaluación de proyectos CONACYT para la convocatoria de Ciencia Básica 2015

FONDO SEP - CONACYT CONVOCATORIA: CB-2009-01 CIENCIA BÁSICA 2009

CONACYT | 2010-02-10

obtener los micro y nano encapsulados, así como la evaluación de los cambios estructurales a nivel macro y micro de las espumas de lacto albúmina

FONDO SEP - CONACYT CONVOCATORIA: CB-2009-01 CIENCIA BÁSICA 2009

CONACYT | 2009-04-10

implementación de modelos de control y desarrollo a nivel industrial en el caso de este proyecto con la generación de bio combustible. La generación del etanol a partir de levadura silvestre impacta en la relevante y actual necesidad de generación de energías limpias, además del uso de materiales existentes en la naturaleza lo cual deriva en procesos económicos y redituables

CONVOCATORIA 2019 (1) APOYO PARA ESTANCIAS POSDOCTORALES EN EL EXTRANJERO VINCULADAS A LA CONSOLIDACIÓN DE GRUPOS DE INVESTIGACIÓN Y FORTALECIMIENTO DEL POSGRADO NACIONAL¿.

CONACYT 2019-09-19 Colaboración con el CONACYT para establecer elementos sólidos para definir a los aspirantes con mayor mérito para recibir el apoyo solicitado en la Convocatoria Convocatoria 2019 (1) ¿Apoyo para Estancias Posdoctorales en el Extranjero Vinculadas a la Consolidación de Grupos de Investigación y Fortalecimiento del Posgrado Nacional¿. CONVOCATORIA DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA BÁSICA 2017-2018 2018-07-10 CONACYT Evaluación de las propuestas de la Convocatoria de Investigación Científica Básica 2017-2018 ESTANCIAS POSDOCTORALES EN EL EXTRANJERO 2019 - 1 2019-07-12 CONACYT | Evaluación de solicitudes para estancias posdoctorales en el Extranjero UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA OTROS evaluador 2016-01-15 - 2016-01-27 Investigación de Perovskitas Híbridas a Escala Nanométrica UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA | Evaluador | 2016-01-15 - 2016-01-27 SÍNTESIS DE POLIESTERES LINEALES BIOCATALIZADA CON LIPASA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA evaluador externo 2016-01-15 - 2016-01-27 Análisis no lineal de la estabilidad hidrodin¿amica termocnvectiva en fluidos con dependencia lineal en la temperatura UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA evaluador externo 2016-01-15 - 2016-01-27 OTROS Estudio Teórico de Sistemas de interés en Foto-catálisis UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA OTROS | Evaluador de proyectos | 2013-03-08 - 2013-03-13 ANÁLISIS TÉRMICO DE MATERIALES DE CAMBIO DE FASE EN SISTEMAS DE ALMACENAMIENTO DE ENERGÍA TÉRMICA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA | Evaluador de proyectos 2013-03-07 - 2013-03-11 PROTOTIPO DIDACTICO DE ESTACIÓN DE ALMACENAMIENTO DE CELDA DE MANUFACTURA HAS 200 CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN ALIMENTACIÓN Y DESARROLLO A.C. (CIAD) evaluador externo | 2010-08-13 - 2010-08-31 POTENCIAL DE LOS POLIFENOLES DE EXTRACTOS POLARES DE PIEL DE MANZANA COMO INHIBIDORES DE RADICALES LIBRES: UN ESTUDIO EXPERIMENTAL Y COMPUTACIONAL CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) 2007-02-13 - 2007-03-13 OTROS sinodal Francisco Javier Holguin Coca CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) OTROS | sinodal 2008-02-14 - 2008-02-14 Hazel Jaynelle Morales Rodríguez CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) OTROS | sinodal | 2009-04-28 - 2009-04-28

Isis Rodríguez Sánchez

CENTRO DE I	INVESTIGACIÓN sinodal	EN MATERIALES AVANZADOS S. 2009-04-29 - 2009-04-29	C. (CIMAV)
	a Alvarado Gonzá		
	a 7 va. a a a a a a a a a		
CENTRO DE I OTROS Silvia Esther S	sinodal	EN MATERIALES AVANZADOS S. 2010-07-08 - 2010-07-08	C. (CIMAV)
	sinodal	EN MATERIALES AVANZADOS S. 2010-07-08 - 2010-07-08	C. (CIMAV)
	Sinodal	EN MATERIALES AVANZADOS S.0 2010-07-08 - 2010-07-08	C. (CIMAV)
OTROS		EN MATERIALES AVANZADOS S. 2010-10-07 - 2010-10-07	C. (CIMAV)
	Sinodal	EN MATERIALES AVANZADOS S. 2013-02-14 - 2013-02-14	C. (CIMAV)
OTROS		EN MATERIALES AVANZADOS S. 2013-07-05 - 2013-07-05 JON	C. (CIMAV)
OTROS		EN MATERIALES AVANZADOS S. 2013-09-20 - 2013-09-20 /a	C. (CIMAV)
CENTRO DE I OTROS Diana María C	sinodal	EN MATERIALES AVANZADOS S. 2014-01-10 - 2014-01-10	C. (CIMAV)
OTROS		EN MATERIALES AVANZADOS S.0 2014-06-18 - 2014-06-18	C. (CIMAV)
OTROS		EN MATERIALES AVANZADOS S. 0 2014-08-19 - 2014-08-19 ANES	C. (CIMAV)
	sinodal	EN MATERIALES AVANZADOS S. 2014-08-20 - 2014-08-20	C. (CIMAV)
OTROS		EN MATERIALES AVANZADOS S. 2015-02-03 - 2015-02-03 pez	C. (CIMAV)
OTROS		EN MATERIALES AVANZADOS S. 2015-05-29 - 2015-05-29 rrero	C. (CIMAV)

CONAHCYT - RIZOMA - PERFIL ÚNICO

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) sinodal | 2015-12-08 - 2015-12-08 OTROS | Rody Abraham Soto Rojo CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) OTROS | sinodal | 2015-12-17 - 2015-12-17 Alfonso Bendaña CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) OTROS | sinodal 2015-12-17 - 2015-12-17 Mónica Araceli Camacho González CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) | sinodal | 2015-12-17 - 2015-12-17 Patricia Simón Bastida CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV) OTROS | sinodal | 2016-02-19 - 2016-02-19 Juan Pablo Flores De los Ríos **AMERICAN CHEMICAL SOCIETY PUBLICATIONS** | Evaluador | 2017-03-11 - 2017-03-31 Study of the molecular structure and chemical 3 reactivity of a serie of p-nitrophenyl benzene-fused bis 4 tetrathiafulvalenes by **DFT** calculations SCIENCEDOMAIN INTERNATIONAL OTROS | Evaluador | 2016-05-13 - 2016-05-31 A Theoretical Study of the Enol Contents of Cyclohexanone, Cyclopentanone and Acetone **BENTHAM SCIENCE PUBLISHERS** OTROS | Evaluador | 2015-08-20 - 2015-09-17 Design, Synthesis and Docking Study of Some Novel Isatin- Quinoline Hybrids as Potential Antitubercular Agents **SPRINGER EDITORIAL** 2015-10-26 - 2015-11-07 OTROS Evaluador A combined experimental and theoretical study of cyanidin natural dye extracted from Karkadah used in dye-sensitized solar cells **ELSEVIER** OTROS Evaluador | 2013-09-23 - 2013-10-16 Quantitative structure-property relationship study of standard formation enthalpies of acyclic alkanes using atom-type-based AI topological indices JAPANESE SOCIETY FOR MÉDICAL AND BIOLOGICAL ENGINEERING (JSMBE) 2013-08-09 - 2013-08-13 OTROS Evaluador er Review Spectral analysis, structural elucidation and evaluation of chemical reactivity of synthesized ethyl-4-[(2-cyanoacetyl)hydrazonomethyl]-3,5-dimethyl-1H-pyrrole-2- carboxylate through experimental studies and quantum chemical calculations **HINDAWI PUBLISHING COMPANY** OTROS | Evaluador 2014-06-04 - 2014-06-20 A conformational model for MTPA esters of chiral N-(2- hydroxyalkyl)acrylamides **ELSEVIER** OTROS | Evaluador | 2017-10-19 - 2017-10-29

ADSORPTION ENERGIES OF H2 MOLECULE ON SURFACE (110) OF Mg1-xMx ALLOYS (M= AI, Ni, Zn; 0.0¿ x ¿ 0.20) **JOHN WILEY & SONS** OTROS | Evaluador 2015-05-27 - 2015-06-19 Theoretical exploitation on electronic structures and the excited states of blue luminescent copper(I) complexes based on the pyrazolyl-pyridine ligands INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL OTROS | Evaluador | 2014-09-04 - 2014-09-14 1 Theoretical study of the formation of complexes between CO2 and nitrogen heterocycles SPRINGER EDITORIAL OTROS | Evaluador | 2013-09-19 - 2013-10-18 Azadirachtin structure and electronic properties **ELSEVIER** Evaluador | 2016-10-14 - 2016-10-17 OTROS | Green Synthesis, NMR Spectral Characterization, DFT and Antibacterial studies of -methyl-(2r,6c-diarylthian-4- ylidene)hydrazono) thiazolidin-4-one derivatives **ELSEVIER** OTROS Evaluador | 2015-10-21 - 2015-11-11 Synthesis of novel Steroidal-naproxen prodrugs, its molecular docking on COX-1 and COX-2 enzyme and their NBO, NLO, FT-IR, MEP, reactivity analysis by quantum chemical calculation **ELSEVIER** 2018-01-23 - 2018-02-14 OTROS Evaluador Synthesis, spectroscopic analysis (FT-IR, UV and NMR) and DFT analysis of novel prodrugs of pregnane, their apoptotic activity in cervical cancer cell lines HINDAWI PUBLISHING COMPANY **OTROS** Evaluador - 1 2013-11-06 - 2013-12-02 Estimation of Bite Angle Effect on the Electronic Structure of Cobalt-Phosphine Complexes: A QTAIM Study **ELSEVIER** OTROS Evaluador 2014-08-07 - 2014-08-21 Assessment of conformational, spectral, Antimicrobial activity, chemical reactivity and NLO application of Pyrrole-2,5dicarboxaldehyde bis(oxaloyldihydrazone) **ELSEVIER** 2011-01-04 - 2011-01-29 OTROS Evaluador Experimental and DFT investigation of surface degradation of polyvinylidene fluoride membrane in alkaline solution **ELSEVIER** OTROS Evaluador | 2014-03-31 - 2014-04-14 Reactivity in the Nucleophilic Aromatic Substitution Reactions of Pyridinium Ions AMERICAN CHEMICAL SOCIETY PUBLICATIONS OTROS Evaluador 2013-02-13 - 2013-02-27 Theoretical Analysis of Built-in Interfacial Electric Dipole Field in Dye-Sensitized Solar Cells

CONAHCYT - RIZOMA - PERFIL ÚNICO

2013-02-13 - 2013-04-04

Effects of Soft Insulating Polymer Doping on the Photovoltaic Properties of Polymer-Fullerene Blend Solar Cells

AMERICAN CHEMICAL SOCIETY PUBLICATIONS

Evaluador |

OTROS |

OTROS Evaluador 2013-01-24 - 2013-02-13 Theoretical Analysis of Built-In Interfacial Electric Dipole Field in Dye-Sensitized Solar Cells" **AMERICAN CHEMICAL SOCIETY PUBLICATIONS** OTROS | Evaluador | 2016-01-07 - 2016-01-12 Unusual electrochemical properties of the electropolymerized thin layer based on a s-tetrazinetriphenylamine monomer AMERICAN CHEMICAL SOCIETY PUBLICATIONS | Evaluador | 2012-11-05 - 2012-11-16 OTROS Evaluation of Acceptor Strength in Thiophene Coupled Donor-Acceptor Chromophores for Optimal Design of Organic Photovoltaic Materials CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. sinodal | 2019-02-01 - 2019-02-01 OTROS | Rosa Isela Ruvalcaba UNVERSIDAD CATÓLICA DE TEMUCO OTROS | Evaluador | 2019-05-01 - 2019-06-19 DESARROLLO DE CELDAS SOLARES FOTOVOLTAICAS SENSIBILIZADAS POR COLORANTES OBTENIDOS A PARTIR DE ALGAS MARINAS." SPRINGER OTROS | Evaluador 2019-05-14 - 2019-05-31 3D-QSAR and Docking studies of benzimidazoles, benzoxazoles, benzothiazoles and thiazolopyridines as Leukotriene A4 Hydrolase Inhibitors. MDPI MOLECULES OTROS | Evaluador 2019-08-20 - 2019-08-28 DFT investigations of the vibrational spectra and translational modes of ice II. **SN APPLIED SCIENCES - SPRINGER** OTROS | Evaluador | 2019-08-26 - 2019-09-16 Conceptual DFT Study of the Chemical Reactivity of four Natural Products with Anti-Sickling Activity **ELSEVIER** 2019-09-10 - 2019-09-30 OTROS Evaluador Theoretical construction of thermodynamic relations for a solvent-controlled phase transition to improve the bioavailability of drugs: A case study of indomethacin SCIENTIFIC RESEARCH PUBLISHING INC. OTROS | evaluador | 2020-04-21 - 2020-04-24 potentially highly effective drugs for COVID-2019: Virtual screening and molecular docking study through PyRx-Vina Approach **ELSEVIER** OTROS evaluador 2022-05-20 - 2022-06-09 Computational and Theoretical Chemistry A DFT study of the chemical reactivity properties of Alzheimer's disease medications CONSEJO NACIONAL DE CIENCIA Y TECNOLOGIA JOURNAL OF MEXICAN CHEMICAL SOCIETY OTROS | evaluador | 2020-09-18 - 2020-09-21 A Study on Screening of Anti-cancer Activity and SAR Study of C-dimethyl Chalcones against A549 Cell line ELSEVIER/JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS AND MODELLING OTROS | evaluador | 2020-10-25 - 2020-12-07 The chemical reactivity and QSPR of organic compounds applied to dye-sensitized solar cells using DFT

AMERICAN CHEMICAL SOCIETY PUBLICATIONS

ELSEVIER/JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS AND MODELLING OTROS evaluador 2020-12-29 - 2021-01-07 The above is a constitute and CORR of constitute and consti
The chemical reactivity and QSPR of organic compounds applied to dye-sensitized solar cells using DFT
ELSEVIER/JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS AND MODELLING OTROS evaluador 2020-06-29 - 2020-07-06 Prediction of critical properties of sulfur-containing compounds: New QSPR models
OPPINISTRY INVESTIGATION OF MALES WAS TO MADE IN INC.
SPRINGER/ JOURNAL OF MOLECULAR MODELING OTROS evaluador 2020-04-24 - 2020-05-12
JMMO-D-20-00205 entitled theoretical approach of star-shaped molecules with triphenylamine core as sensitizer for their potential application in dye sensitized solar cells
ELSEVIER/ JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS AND MODELING OTROS evaluador 2020-04-29 - 2020-05-19
Prediction of critical properties of sulfur-containing compounds: New QSPR models,
NATURE/ SCIENTIFIC REPORTS OTROS evaluador 2020-03-18 - 2020-04-13
Chemical reactivity and bioactivity properties of Pyrazinamide Analogs of Acetylsalicylic Acid and Salicylic Acid using Conceptual Density Functional Theory
ACS/JOURNAL OF OF PHYSICAL CHEMISTRY OTROS evaluador 2020-03-10 - 2020-03-20 Fusing thienyl with N-annulated perylene dyes and photovoltaic parameters for dye-sensitized solar cells
BMS CORONAVIRUSES OTROS evaluador 2021-09-06 - 2021-09-14 In silico analysis for the repurposing of broad-spectrum antiviral drugs against multiple targets from SARS CoV-2: A molecular docking and ADMET approach
ELSEVIER OTROS evaluador 2021-10-06 - 2021-10-19 Molecular structure, Spectroscopic, Antituberculosis/Antimicrobial activity and Quantum Chemical calculations (Chemical Reactivity, NBO, AIM, First hyperpolarizability) of a new Ethyl-pyrrole-2-carboxylate
MDPI MULTIDISCIPLINARY DIGITAL PUBLISHING INSTITUTE OTROS evaluador 2021-09-22 - 2021-09-29
A Comprehensive In Silico Exploration of Pharmacological Properties, Bioactivities, Molecular docking, and anticancer potential of Vieloplain F from Xylopia vielana targeting B-Raf Kinase
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MÉXICO OTROS evaluador 2021-09-13 - 2021-09-24 Au-Ru nanoparticles in catalysis, analysis from first-principles calculations
MDPI MULTIDISCIPLINARY DIGITAL PUBLISHING INSTITUTE OTROS evaluador 2021-06-16 - 2021-06-29
Molecular docking and SAR studies to explore the Amoxicillin and Clavulanate as multiple effect inhibitors of 2019 coronavirus main protease and RNA-dependent RNA polymerase with strong receptor-binding domain (RBD)
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA
OTROS evaluador 2021-02-12 - 2021-02-27 Síntesis y caracterización de micelas de quitosano para la liberación de fármacos

ELSEVIER OTROS evaluador - 1 2021-01-15 - 2021-01-22 The chemical reactivity and QSPR of organic compounds applied to dye sensitized solar cells using DFT INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL OTROS | sinodal | 2020-06-30 - 2020-06-30 Edgar Uriel Valdivia Landeros **ELSEVIER** 2022-02-04 - 2022-02-12 OTROS evaluador Electronic Properties and Chemical Reactivity of Biogenic Amine Neurotransmitters in Gas and Solution Phase: A DFT Study **ELSEVIER** OTROS | evaluador - 1 2022-06-06 - 2022-06-11 Comparative Electrochemistry and Chemical Reactivity of Biogenic Amine Neurotransmitters in Gas and Solution Phase: A DFT Study SOCIEDAD QUÍMICA DE MÉXICO 2022-02-02 - 2022-02-25 OTROS | evaluador | On the pro-oxidant activity of curcumin in lipid media: a theoretical study **ELSEVIER** OTROS | evaluador 2022-01-15 - 2022-02-04 A DFT study of the chemical reactivity properties, spectroscopy and bioactivity scores of bioactive flavonols UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA | 2021-10-14 - 2021-10-14 evaluador OTROS XXII Jornadas de Investigación - Sección Química. UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA OTROS | MIEMBRO DEL COMITÉ CIENTÍFICO 2019-12-31 - 2020-12-31 Revista Tecno Ciencias UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA Editor y miembro del comité científico 2021-06-14 - 2021-11-08 OTROS Revista Tecnociencia CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. OTROS | sinodal | 2019-06-21 - 2019-06-21 Sara Carolina García Ruiz CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. OTROS | sinodal | 2019-08-15 - 2019-08-15 Lucero Evelia Acuña Aguilar CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. OTROS sinodal 2018-12-07 - 2018-12-07 Daniel Alberto Carballo Córdova UNIVERSIDAD CATÓLICA DE TEMUCO | Evaluador de proyectos internos de investicagión, LÍNEA PROFONDECYT | 2019-05-29 - 2019-06-19 DESARROLLO DE CELDAS SOLARES FOTOVOLTAICAS SENSIBILIZADAS POR COLORANTES OBTENIDOS A PARTIR DE

CONAHCYT - RIZOMA - PERFIL ÚNICO

ALGAS MARINAS

SISTEMA NACIONAL DE INVESTIGADORAS E INVESTIGADORES 2024-03-07 miembro de la Comisión Dictaminadora del Área II. Biología y Química, derivado del proceso de insaculación que se llevó a cabo en la referida Sesión, con fundamento en los artículos 7, fracciones II y X, 10 y 12 del Reglamento del Sistema Nacional de Investigadores (Reglamento), así como en los Lineamientos de las Comisiones Dictaminadoras del Sistema Nacional de Investigadores (Lineamientos). CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. PROGRAMA DE DOCTORADO EN CIENCIA DE **MATERIALES** OTROS Sinodal - 1 2019-09-02 - 2023-09-11 Obtención de Un Marcador Fluorescente Mediante la Funcionalización de Nanodiamantes con ZnS CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. Sinodal | 2021-02-22 - 2023-03-24 Flor Mireya Moran, Desarrollo de una Membrana Flexible con Propiedades de Conducción Eléctrica Basada en CNTs Entrecruzados CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS, S.C. 2019-03-04 - 2023-02-24 | Sinodal | Rosa Isela Ruvalcaba, Efecto de Nanoestructuras Oro-Sílice en Artritis Reumatoide Inducida por Colágena OTROS | evaluador | 2021-09-14 - 2022-07-13 In silico analysis for the repurposing of broad-spectrum antiviral drugs against multiple targets from SARS CoV-2: A molecular docking and ADMET approac COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY OTROS | evaluador | 2022-06-27 - 2022-07-26 Electronic Properties and Chemical Reactivity of Biogenic Amine Neurotransmitters in Gas and Solution Phase: A DFT Study COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY OTROS | evaluador | 2022-06-09 - 2022-06-10 DFT study of the chemical reactivity properties of Alzheimer's disease medications COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY evaluador | 2023-01-22 - 2023-02-03 Exploring the Impact of Electron Acceptor Tuning in D--A--A photosensitizers on the Photovoltaic Performance of Acridine-Based DSSCs: A DFT Perspective COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY 2023-02-20 - 2023-03-13 OTROS evaluador | Computationally designed Compound Library from the Phyto-chemicals present in the Himalayan Buransh Flower for Inhibiting Corona Virus COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY evaluador | 2023-06-03 - 2023-06-17 OTROS | The use of global and local reactivity descriptors of conceptual DFT to describe toxicity of benzoic acid derivatives COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY evaluador 2023-07-21 - 2023-08-18 OTROS | Redefining the electrophilic descriptor: effect of hyperhardness on the chemical reactivity of electrophiles **JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE** 2024-01-12 - 2024-02-02 OTROS evaluador : Identification of natural regulators of nephrolithiasis by targeting SIRT1 through in-silico study

MOLECULES, MDPI

OTROS | evaluador | 2023-05-12 - 2023-05-24

Essential Oil Components Interacting with Insect Odorant-2 binding Proteins: A Molecular Docking Approach

THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS

OTROS | evaluador | 2023-11-20 - 2023-11-29

Computational Insight of Repurpose Drug for Treatment of COVID-19: A CDFT Approach

COMPUTATION

OTROS | evaluador | 2023-04-10 - 2023-04-17 Azidofullerene C60N60: Density Functional Theory Study

DIVULGACIÓN

DILATACIÓN Y CONTRACCIÓN EL SR. BURBUJA LLEGA A LA TIERRA

Medio impreso | 2009-10-04

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA

LAS COMPUTADORAS EN LA CIENCIA

Conferencia | 2010-04-23

COORDINACIÓN GENERAL DE EDUCACIÓN MEDIA SUPERIOR, SUPERIOR, CIENCIA Y TECNOLOGÍA

UNA AVENTURA PARA DERRETIRSE

Teatro | 2010-04-17

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA

MOLÉCULAS ORGÁNICAS PARA CELDAS SOLARES

Revista de divulgación | 2011-01-08

COLEGIO DE INGENIEROS CIVILES DE MÉXICO, A.C.

MOLÉCULAS ORGÁNICAS Y CELDAS SOLARES

Revista de divulgación | 2010-10-01

CONSEJO NACIONAL DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA

MOLECULAS ORGANICAS PARA CELDAS SOLARES

Revista de divulgación | 2011-05-29

CAMARA DE LA INDUSTRIA DE TRANSFORMACION DE NUEVO LEON

UNA AVENTURA PARA DERRETIRSE

Teatro | 2011-10-03

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA

EL CORREDOR DE LA CIENCIA COORDINACIÓN DE EXPERIMENTOS CIENTÍFICOS DE CIMAV

Feria científica y tecnológica | 2011-10-07 UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA

UN RINCÓN PARA LA CIENCIA

Seminario | 2012-10-22

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV)

DAME CINCO EN LAS TERCERAS JORNADAS DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA 2012

Teatro | 2012-10-08

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA

EL COLOR DE LOS SABORES COORDINACIÓN DE EXPERIMENTOS CIENTÍFICOS 3A JORNADAS DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA

Feria científica y tecnológica | 2012-10-12
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA

EL COLOR DE LOS SABORES PRESENTACIÓN A ALUMNOS DE LA ESCUELA ELIZABETH SETON

Feria científica y tecnológica | 2013-02-28

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV)

DILATACIÓN Y CONTRACCIÓN, EL SR. BURBUJA LLEGA A LA TIERRA

Feria científica y tecnológica | 2013-04-26

INSTITUTO CHIHUAHUENSE DE LA CULTURA

CINCO SENTIDOS PRESENTACIÓN A LAS ALUMNOS DEL COLEGIO BELMONT

Teatro | 2013-04-30

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS S.C. (CIMAV)

EL GLOBO GLOTÓN EN LA FERIA INFANTIL DE ARTE Y CIENCIA

Organización de evento | 2013-04-30

INSTITUTO CHIHUAHUENSE DE LA CULTURA

COORDINACIÓN DE LOS EXPERIMENTOS CIENTÍFICOS IV JORNADAS DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA

Feria científica y tecnológica | 2013-10-11 UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA

FERIA INFANTIL 2014 DE ARTE Y CIENCIA

Feria científica y tecnológica | 2014-04-30

SECRETARÍA DE EDUCACIÓN, CULTURA Y DEPORTE

FERIA INFANTIL DE ARTE Y CIENCIA 2015

Feria científica y tecnológica | 2015-05-04

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA

FERIA INFANTIL Y JUVENIL DE ARTE Y CIENCIA 2016

Feria científica y tecnológica | 2016-04-28

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA

NUEVA ALTERNATIVA CONTRA EL CÁNCER DE MAMA A TRAVÉS DE QUÍMICA COMPUTACIONAL

Entrevista | 2016-09-19

CONSEJO NACIONAL DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA

FERIA INFANTIL DE ARTE Y CIENCIA 2017

Organización de evento | 2017-04-24

SECRETARÍA DE EDUCACIÓN, CULTURA Y DEPORTE

JUGANDO CON ÁTOMOS

Demostración | 2017-04-27

SECRETARÍA DE EDUCACIÓN, CULTURA Y DEPORTE

CUÉNTAME LAS CALORÍAS DENTRO DEL LIBRO "CUENTOS PARA EL CIENTÍFICO QUE LLEVAS DENTRO"

Presentación de libro | 2018-02-19

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATEMÁTICAS A.C. (CIMAT)

EL SOL Y LA ENERGÍA

Taller | 2019-05-01

ALAS Y RAÍCES GOBIERNO DEL ESTADO DE CHIHUAHUA

TALLER JUGANDO CON LA ENERGÍA

Feria científica y tecnológica | 2020-10-27

LA SECRETARÍA DE CULTURA DEL GOBIERNO DEL ESTADO DE CHIHUAHUA

LAS MUJERES EN LA CIENCIA

Moderación de mesa redonda | 2021-02-11

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS, S.C.

APLICACIONES DEL MODELADO MOLECULAR Y LA QUÍMICA COMPUTACIONAL

Seminario | 2021-06-24

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS, S.C.

APRENDIENDO CIENCIA EN TIEMPOS DE PANDEMIA

Taller | 2021-04-30

SECRETARÍA DE CULTURA DEL GOBIERNO DEL ESTADO DE CHIHUAHUA

CIENTÍFICAS CHIHUAHUENSES

Radio | 2021-02-10

PROGRAMA DE RADIO NUESTRAS VOCES

CÁPSULAS DE CIENCIA PARA GENERAR CONCIENCIA "LA CIENCIA"

Radio | 2021-12-19 102.5 FM Y ANTENA TV

CÁPSULAS DE CIENCIA PARA GENERAR CONCIENCIA "LA QUÍMICA DEL AMOR"

Radio | 2022-02-12 102.5 FM Y ANTENA TV

-

CÁPSULAS DE CIENCIA PARA GENERAR CONCIENCIA ¿MUJERES EN LA CIENCIA ¿

Radio | 2022-03-19 **102.5 FM Y ANTENA TV**

CÁPSULAS DE CIENCIA PARA GENERAR CONCIENCIA ¿DÍA MUNDIAL DE LA CIENCIA Y LA TECNOLOGÍA ¿

Radio | 2022-04-09 102.5 FM Y ANTENA TV

CÁPSULAS DE CIENCIA PARA GENERAR CONCIENCIA ¿LOS COLORES DE LA PRIMAVERA¿

Radio | 2022-05-21 102.5 FM Y ANTENA TV

.

EL DÍA MUNDIAL DEL MEDIO AMBIENTE

Entrevista | 2022-06-04 102.5 FM Y ANTENA TV

CÁPSULAS DE CIENCIA PARA GENERAR CONCIENCIA "EL AGUA, FUENTE DE VIDA"

Radio | 2022-06-25 102.5 FM Y ANTENA TV DIVULGACIÓN ¿POR VOCACIÓN O POR OBLIGACIÓN?

Conferencia | 2022-05-24

CLUB DE DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA "ENTRE CIENTÍFICOS TE VEAS"

AGENDA DE GÉNERO. CÁPSULA DE RADIO EN PROGRAMA PALABRAS QUE SANAN

Radio | 2022-08-27 ANTENA RADIO CHIHUAHUA

DIVULGACIÓN, ¿POR OBLIGACIÓN O POR VOCACIÓN?

Conferencia magistral | 2023-10-26

ESCUELA SUPERIOR DE INGENIARÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA DEL INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL, CIUDAD DE

MÉXICO (MÉXICO)

SCIENCE CAFÉ" CONFERENCIA

Conferencia | 2023-07-12

TECNOLÓGICO DE MONTERREY, CAMPUS CHIHUAHUA (MÉXICO)

PRIMER FESTIVAL DE JUEGOS DE LA RONDA A LA ARIWETA EVENTO, ORGANIZADOR

Feria científica y tecnológica | 2023-05-28

SECRETARÍA DE CULTURA DEL GOBIERNO DEL ESTADO DE CHIHUAHUA (MÉXICO)

DESAYUNO GLOBAL DE MUJERES EN LA CIENCIA 2023 ENTREVISTA

Entrevista | 2023-02-14

TECNOLÓGICO DE MONTERREY, CAMPUS CHIHUAHUA (MÉXICO)

1ER ENCUENTRO CON LA CIENCIA CONFERENCIA

Conferencia | 2023-02-02

MUSEO SEMILLA CHIHUAHUA, CHIHUAHUA (MÉXICO)

LA IMPORTANCIA DE LOS MATERIALES

Revista de divulgación | 2024-05-02

LA CRÓNICA DIGITAL

📭 rizoma