



QUÍMICA FÍSICA

LÍNEA DE INVESTIGACIÓN: QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL

NOMBRE: GARCÍA REVILLA, MARCO ANTONIO

ADSCRIPCIÓN: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA, DIVISIÓN DE CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS, CAMPUS GUANAJUATO

CORREO ELECTRÓNICO: MAGARCIA@UGTO.MX

S.N.I.: II

CUERPO ACADÉMICO: QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL, QUÍMICA HETEROCÍCLICA Y FISCOQUÍMICA DE POLÍMEROS

ARTÍCULOS CIENTÍFICOS:

STRUCTURE AND CONFORMATION OF NOVEL BODIPY UGI ADDUCTS. DOI: 10.1002/open.202200197

SYNTHESIS AND COMPUTATIONAL CHARACTERIZATION OF ARYL-FLUORINATED THIAZOLES: EXPERIMENTAL, DFT AND MOLECULAR COUPLING STUDIES. DOI: 10.1016/j.jfluchem.2022.110024

COMPUTATIONAL STUDIES ON THE REACTION PATHWAYS OF TRIFLUOROMETHYLOXAZOLONES WITH BOTH ALPHA,BETA AND ALPHA,BETA,GAMMA,DELTA-UNSATURATED FISCHER CARBENES. DOI: 10.1016/j.comptc.2022.113828

GRAMMATICAL EVOLUTION-BASED DESIGN OF SARS-COV-2 MAIN PROTEASE INHIBITORS. DOI: 10.1039/d1cp04159b

MODELING ADSORPTION OF CO₂ IN RUTILE METALLIC OXIDE SURFACES: IMPLICATIONS IN CO₂ CATALYSIS. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules28041776>

LÍNEA DE INVESTIGACIÓN: QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL

NOMBRE: JIMÉNEZ HALLA, JOSÉ ÓSCAR CARLOS

ADSCRIPCIÓN: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA, DIVISIÓN DE CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS CGT, GUANAJUATO

CORREO ELECTRÓNICO: JJIMENEZ@UGTO.MX

S.N.I.: III

ORCID: 0000-0001-7354-3506

CUERPO ACADÉMICO: QUÍMICA APLICADA A CATÁLISIS Y SISTEMAS BIOLÓGICOS

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN: ESTUDIO COMPUTACIONAL DE INTERMEDIARIOS EN LAS REACCIONES DE DIBORENOS ESTABILIZADOS O NO POR BASES DE LEWIS



ARTÍCULOS CIENTÍFICOS:

DIARYLIODONIUM(III) SALTS IN ONE-POT DOUBLE FUNCTIONALIZATION OF C-I-III AND ORTHO C-H BONDS. DOI: 10.1039/d1ob02501e

A BORON, NITROGEN-CONTAINING HETEROCYCLIC CARBENE (BNC) AS A REDOX ACTIVE LIGAND: SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF A LITHIUM BNC-AURATE COMPLEX. DOI: 10.1039/d2dt01083f

IODINE(III)-MEDIATED FREE-ANILINE IODINATION THROUGH ACETYL HYPOIODITE FORMATION: STUDY OF THE REACTION PATHWAY. DOI: 10.1002/ejoc.202201067

A ROLLOVER IR(III) COMPLEX OF 2-(6-BROMOPYRIDIN-2-YL)IMIDAZO[1,2-A]PYRIDINE. DOI: <https://doi.org/10.1039/D2NJ06026D>

MULTICOMPONENT ONE-POT SYNTHESIS OF LUMINESCENT IMIDAZO [1,2-A]PYRIDINE-3-AMINES. STUDIES OF FLUORESCENCE, SOLVATOCHROMISM, TD-DFT CALCULATIONS AND BIOIMAGING APPLICATION. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2022.134797>

LÍNEA DE INVESTIGACIÓN: QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL

NOMBRE: ROBLES GARCÍA, JUVENCIO

ADSCRIPCIÓN: DEPARTAMENTO DE FARMACIA, DIVISIÓN DE CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS, CAMPUS GUANAJUATO

CORREO ELECTRÓNICO: ROBLESJ@UGTO.MX

S.N.I.: III

ORCID: 0000-0002-8702-5782

CUERPO ACADÉMICO: QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL, QUÍMICA HETEROCÍCLICA Y FISCOQUÍMICA DE POLÍMEROS

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN: DISEÑO INSILICO DE FÁRMACOS ANTIHIPERTENSIVOS INHIBIDORES DE RECEPTORES DE ANGIOTENSINA II

ARTÍCULOS CIENTÍFICOS:

ANTIRADICAL PROPERTIES OF CURCUMIN, CAFFEIC ACID PHENETHYL ESTER, AND CHICORIC ACID: A DFT STUDY. DOI: 10.1007/s00894-022-05056-4

THE PEPTIDE BOND RUPTURE MECHANISM IN THE SERINE PROTEASES: AN IN SILICO STUDY BASED ON SEQUENTIAL SCALE MODELS.. DOI: <https://doi.org/10.1039/D2CP04872H>

MODELING ADSORPTION OF CO₂ IN RUTILE METALLIC OXIDE SURFACES: IMPLICATIONS IN CO₂ CATALYSIS. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules28041776>