

**Pósters área i. Química Teórica y Computacional: Modelado y Simulaciones Computacionales**

| Póster                 | Autores   | Título   |
|------------------------|---|--|
| i-AlegreCIA.pdf        | Clara Iris Aymara Alegre, María Fernanda Zalazar, Nélica María Peruchena  | ANÁLISIS DEL LAPLACIANO DE LA DENSIDAD ELECTRÓNICA $[-\nabla^2\rho(r)]$ PARA EL ESTUDIO DE LA REACCIÓN DE ACETATO DE ETILO Y METANOL SOBRE EL CATALIZADOR [CTA+]-Si-MCM-41 |
| i-AlvarezEscaladaF.pdf | Fanny Cecilia Alvarez Escalada, Ana Estela Ledesma  | ANALISIS DE LA INTERACCIÓN DE N-METILCITISINA CON RECEPTORES BIOLÓGICOS COMBINANDO CÁLCULOS DFT Y DOCKING MOLECULAR  |
| i-AmbrusiRE.pdf        | Rubén E Ambrusi, Mauro Patrignani, Victoria Gutierrez, María A. Volpe, Estela Pronsato  | ESTUDIO TEÓRICO Y EXPERIMENTAL DE SUPERFICIES LIBRES O FUNCIONALIZADAS DE CNTs PARA LA DEPOSICIÓN DE Rh y Pd   |
| i-ArangoBE.pdf         | Bryan Elith Arango Hoyos, Luciana M. Tamone, A. Lorena Picone, Rosana M. Romano   | ES ESTUDIO TEÓRICO DEL CLORURO DE 2,2,3,3-TETRACLOROPROPILO, $\text{CHCl}_2\text{CCl}_2\text{C}(\text{O})\text{Cl}$  |
| i-ArciniegasD.pdf      | Diana M. Arciniegas Jaimes, Martín I. Broens, Eduardo Saavedra, Noelia Bajales Luna   | ESTABILIDAD DEL MODO DE REVERSIÓN WAVE EN NANOTUBOS FERROMAGNÉTICOS DE PERMALLOY EN FUNCIÓN DE LA RELACIÓN DE SUS DIAMETROS  |
| i-AriasJM.pdf          | Juan Marcelo Aras, Georgina María Luz Zerpa, José María Bermúdez, Adela Isabel Guadalupe Mercado                                | ADSORCIÓN DE CIPROFLOXACINA EN NANOARCILLA DE MONTMORILLONITA: UN ESTUDIO ESTRUCTURAL Y TERMODINÁMICO DE DINAMICA MOLECULAR  |
| i-BennardiDO.pdf       | Daniel Oscar Bennardi, José Aranda, Pablo Duchowicz   | ESTUDIO QSAR DE LA TOXICIDAD AGUDA EN LA LOMBRIZ EISENIA FOETIDA   |
| i-BertoniAI.pdf        | Andrés Ignacio Bertoni, Cristián Gabriel Sánchez, Andrew Horsfield  | OPTIMIZACIÓN QM/MM CON ACOPLAMIENTO CUÁNTICO   |
| i-BlancoPM.pdf         | Pablo M. Blanco, Micaela M. Achetoni, María F. Baieli, Claudio F. Narambuena  | ADSORCIÓN DEL MACROPÉPTIDO DE LA CASEÍNA SOBRE UN SUSTRATO CARGADO: EL IMPACTO DE LA REGULACIÓN DE LA CARGA  |
| i-BoroskyG.pdf         | Gabriela L. Borosky   | ESTUDIO TEÓRICO DE LA FUNCIÓN CATALÍTICA DE RESIDUOS ALTAMENTE CONSERVADOS EN EL SITIO ACTIVO DE LAS ENZIMAS FOSFATASAS ALCALINAS  |
| i-CabanaN.pdf          | Nancy Cabana, Paola Quaino  | ESTUDIOS DFT DE RECEPTORES SELECTIVOS DE IONES METÁLICOS USANDO DERIVADOS DE CALIX[4]ARENO   |
| i-CammarataMdM.pdf     | María del Mar Cammarata, Guido Palazzo, Ricardo Kindsvater, Vanesa Torres, Mario D. Contin, R. Martín Negri, Matías Factorovich | ESTUDIO DE LA DIFUSIÓN DE ADITIVOS ORGÁNICOS EN MATRICES DE POLIETILENO MEDIANTE DINÁMICAS MOLECULARES   |

|                    |   |  |
|--------------------|---|--|
| i-CaparottaM.pdf   | Marcelo Caparotta, Claudia N Tomes, Luis S. Mayorga, Diego Masone   | EL DOMINIO C2B DE LA SINAPTOTAGMINA-1 ES UN REGULADOR CLAVE DE LA ESTABILIZACIÓN DE LOS POROS DE FUSIÓN  |
| i-CappellariP2.pdf | Paula Cappellari, Germán J. Soldano, Marcelo M. Mariscal  | DISOCIACIÓN DE O <sub>2</sub> EN ALEACIONES AuIr: NUEVO ENFOQUE CATALÍTICO CÁLCULOS DE LOS PRIMEROS PRINCIPIOS PARA LA OXIDACIÓN DE CO   |
| i-CastilloM.pdf    | Marcelo Omar Castillo, Graciela Pinto Vitorino  | ESTUDIO TEORICO PRELIMINAR DE ESPECTROS UV DE SULFADIACINA EN MEZCLAS BINARIAS AGUA: METANOL   |
| i-CastilloMV1.pdf  | María Victoria Elizabeth Castillo Scheuermann, Maximiliano Iramain, Karina Andrea Guzzetti, Silvia Antonia B.           | ESTUDIO ESTRUCTURAL DEL PESTICIDA LINDANO ( $\gamma$ -EXACLOROCICLOHEXANO)   |
| i-CastilloMV2.pdf  | María Victoria Elizabeth Castillo Scheuermann, Maximiliano Iramain, María E. Manzur, Karina Guzzetti, Silvia A. Brandán | ESTUDIO ESTRUCTURAL Y VIBRACIONAL DEL OPIOIDE SINTETICO: METADONA  |
| i-CavaleriJP.pdf   | Juan Pablo Cavaleri, Luis M. Baraldo, German E. Pieslinger  | EL TAMAÑO IMPORTA? INFLUENCIA DE FUNCIONALES Y BASES EN PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE POLIPIRIDINAS DE RUTENIO CALCULADAS POR TEORIA DEL FUNCIONAL DE LA DENSIDAD                                |
| i-ChacónC.pdf      | Claudia Chacón, María Paula Badenes, Larisa L. B. Bracco  | EVALUACIÓN TERMOQUÍMICA DE ESPECIES DE INTERÉS ATMOSFÉRICO QUE CONTIENEN AZUFRE  |
| i-ColomboE.pdf     | Estefania Colombo, Gustavo Belletti, Paola Quaino   | EFFECTO CATALÍTICO DE IONES CLORURO EN LA DEPOSICIÓN DE IONES Cu <sup>2+</sup>   |
| i-ContoG1.pdf      | Guido Rafael Conto Echeverria, Beatriz Toselli, Gustavo Palancar  | EVALUACIÓN DEL MODELO WRF-CHEM PARA EL CÁLCULO DE ESPECIES QUÍMICAS GASEOSAS (NO <sub>2</sub> , CO, SO <sub>2</sub> Y O <sub>3</sub> ) Y MATERIAL PARTICULADO (PM <sub>10</sub> ) EN ARGENTINA |
| i-ContoG2.pdf      | Guido Rafael Conto Echeverria, Beatriz Toselli, Gustavo Palancar  | IMPACTO DEL MATERIAL PARTICULADO DISCRIMINADO EN FRACCIONES EN CÓRDOBA DURANTE UN EPISODIO DE INCENDIOS  |
| i-CorregidorPF.pdf | Pablo Fernando Corregidor, Emilce E. Ottavianelli   | ESTUDIO ESTRUCTURAL Y VIBRACIONAL DEL FLONICAMID   |
| i-DebaisG.pdf      |   | SEPARACIÓN EN MICRO-FASES DE CEPILLOS DE POLIELECTROLITOS CON CARGA OPUESTA GENERADA POR PARES IÓNICOS   |
| i-DeVirgiliisA.pdf | Andrés De Virgiliis, Edgar A. Bea   | ESTRUCTURA DE UNA MICROEMULSIÓN CERCA DEL PUNTO CRÍTICO: LÍNEA DE DESORDEN, UNIVERSALIDAD Y LÍNEA DE LIFSHITZ  |
| i-DiazM1.pdf       | Mario Díaz, Esteban Vega-Hissi, Matías Andrada, Juan Garro  | ANÁLISIS DE LOS MECANISMOS DE REACCIÓN DEL RADICAL HIDROXILO CON DOS COMPUESTOS AZUFRADOS DEL AJO  |
| i-DomancichN.pdf   | Nicolás Domancich, Lorena Meier, F. Ana Rossi, Silvia Fuente, Norberto Castellani                                       | ADSORCIÓN DE DIFERENTES ESPECIES DE DOPAMINA SOBRE ÓXIDO DE GRAFENO  |

|                          |  |   |
|--------------------------|--|---|
| i-DuchowiczP.pdf         | Pablo Román Duchowicz, Mariano Mandelbaum, Alicia Pomilio  | ESTUDIO QSPR DE ACEITES DE ORIGEN VEGETAL   |
| i-ElAinM.pdf             | María Alexia El Ain, Laureano Marín Oliva, María Eugenia Budén, Ricardo Ariel Fernández, Marcelo Puiatti         | MODELADO MOLECULAR PARA EL DISEÑO DE MATERIALES EMISORES BASADOS EN HEPTAZINA Y BICARBAZOL  |
| i-EspinosaW.pdf          | Wilfred Espinosa Manrique, María Eugenia Tucceri, María Paula Badenes  | ESTUDIO TEÓRICO DE LAS PROPIEDADES MOLECULARES Y TERMOQUÍMICAS DEL ÁCIDO 2-(TRIFLUOROMETIL)BENZOICO   |
| i-EstevesP.pdf           | Paola Natalia Esteves, Funes Camila, Fernández Laura   | COEFICIENTE DE PARTICIÓN DEL TRAZADOR FORMIATO DE ETILO PARA SER UTILIZADO EN LA INDUSTRIA PETROLERA  |
| i-FariasHermosillaME.pdf | Estefanía Farías Hermosilla, Alberto Gustavo Albesa  | SIMULACIÓN MONTE CARLO DE ADSORCIÓN DE CH <sub>3</sub> X (X = F, Cl, Br) SOBRE BIOCHARS   |
| i-FariglianoL1.pdf       | Lucas Farigliano, Eduardo M. Patrito, Patricia A. Paredes-Olivera  | REACTIVIDAD DE O <sub>2</sub> CON VACANCIAS DE S EN MoS <sub>2</sub> BIDIMENSIONAL. ESTUDIO DE DINÁMICA MOLECULAR AB-INITIO   |
| i-FariglianoL2.pdf       | Lucas Farigliano, Patricia A. Paredes-Olivera, Eduardo M. Patrito  | ESTUDIOS DE LA INTERACCIÓN DE ÁTOMOS DE F CON MoS <sub>2</sub> BIDIMENSIONAL.   |
| i-FernandezJF.pdf        | Julián Fernández, Martín Lavecchia   | PREDICCIÓN DE BLANCOS MOLECULARES COMBINANDO DOCKING E INTELIGENCIA ARTIFICIAL  |
| i-FonrougeS.pdf          | Sergio Fonrouge, José Luis Borioni, Mario G. Del Pópulo  | DINÁMICA MOLECULAR DE UN LÍQUIDO POROSO DE HUÉSPEDES NORIA DISUELTOS EN UN ÉTER DE CORONA   |
| i-Fuente S.pdf           | Silvia A. Fuente, Ana Belén Schwval, J. Carlos Duran Álvarez, Gabriela Cabeza, Cecilia I. Morgade                | ESTUDIO TEÓRICO DE FOTOCATALIZADORES BASADOS EN BIOX  |
| i-FunesC.pdf             | Paola Natalia Esteves, Camila Funes, Laura Fernández   | ESTUDIO PREDICTIVO-EXPERIMENTAL DEL COEFICIENTE DE PARTICIÓN DE TRAZADORES QUÍMICOS   |
| i-GalvanJ.pdf            | Jorge Galván, E. Contreras Aguilar, S. E. Ulic, Ben Altabef, M. E. Tuttolomondo                                  | ESTUDIO ESTRUCTURAL Y VIBRACIONAL DE METANSULFONATO DE TRIFLUOROETIL (METILSULFONILO), TFMSMS: CH <sub>3</sub> SO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> SO <sub>2</sub> -O-CH <sub>2</sub> CF <sub>3</sub> |
| i-GavilanM.pdf           | Maximiliano Gavilán Arriazu, Daniel Barraco, Ezequiel Leiva  | SIMULACIONES NUMERICAS DE VOLTAMETRIA CICLICA: INTERCALACION DE ION LITIO EN ELECTRODOS DE OXIDO DE MANGANESO   |
| i-GilRebazaA1.pdf        | Gastón C. Brusasco, Azucena M. Mudarra Navarro, Errico Leonardo A. Peltzer, Eitel L. Blancá, Arles V. Gil Rebaza | DETERMINACIÓN TEÓRICA DEL CORRIMIENTO ISOMÉRICO DEL 57Fe PARA COMPUESTOS BASADOS EN Fe: MÉTODOS AB-INITIO Y ESPECTROSCOPÍA MÖSSBAUER  |

|                        |  |   |
|------------------------|--|---|
| i-GomesGJ.pdf          | Glaucio José Gomes, Pedro Augusto Arroyo, María Fernanda Zalazar   | ESTUDIO TEÓRICO DE LA ADSORCIÓN DE ÁCIDOS CARBOXÍLICOS VOLUMINOSOS EN H-MOR: RELACIÓN DEL AMBIENTE CONFINADO CON LA ACTIVIDAD CATALÍTICA.                       |
| i-GonzálezFáA.pdf      | Alejandro González Fá, Valeria Orazi, Jorge Marchetti, Ignacio López Corral  | ESTUDIO DE ENLACE Y PROPIEDADES ELECTRÓNICAS EN LA ADSORCIÓN DE SULFURO DE CARBONILO SOBRE NANOTUBOS DE CARBONO DOPADOS CON PLATINO                             |
| i-GorodNS.pdf          | Noelia S. Gorod  | ESTUDIANDO LA INTERACCIÓN DE FTALOCIANINAS DE ZINC CON BICAPAS DE DMPC A TRAVÉS DEL MODELADO MOLECULAR  |
| i-HeffnerH.pdf         | Herman Heffner, Alejandro González Fá, Ricardo Faccio, Ignacio López Corral  | EVALUACIÓN DE PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE TiO <sub>2</sub> (B) DOPADO CON CARBONO MEDIANTE DFT+U  |
| i-JellussichM.pdf      | María de los Angeles Jellussich, Juan José Martínez Medina, Nora Beatriz Okulik  | AMPLIACIÓN DEL ESPACIO CONFORMACIONAL DE LA SILIBININA A EN FASE GASEOSA Y ESTUDIOS EN SOLUCIÓN ACUOSA  |
| i-JiménezJ.pdf         | Juan Jiménez García, Jimena Olmos-Asar, Esteban Franceschini, Marcelo Mariscal   | EFFECTOS DEL CONTENIDO DE NAFION, NIVEL DE HIDRATACIÓN Y TEMPERATURA SOBRE EL ÁREA ELECTROQUÍMICAMENTE EXPUESTA DE CATALIZADORES DE Pt EN LA ZONA DE TRES FASES |
| i-LavecchiaM.pdf       | Martín Lavecchia, María Rosa Rodríguez, Beatriz Parajón Costa, Ana C. González Baró, María R. González Baró, Elizabeth R. Cattáneo   | MODELADO DE LA CAPACIDAD INTERCALANTE DE ADN DE TRES COMPLEJOS METÁLICOS CON ACTIVIDAD CITOTÓXICA   |
| i-LobayánR1.pdf        | Rosana Lobayan, Natalia Costilla, Erika Natalia Bentz, María Celia Perez Schmit  | ANÁLISIS DE ORBITALES NATURALES DE ENLACE EN EL ESTUDIO VIBRACIONAL DE SEROTONINA   |
| i-LobayánR2.pdf        | Rosana María Lobayan, Sebastián Arce   | AROMATICIDAD EN B <sub>3</sub> <sup>+</sup>   |
| i-LunaR.pdf            | Carla Romina Luna, Walter G. Reimers, Marcelo J. Avena, Alfredo Juan   | SUSTITUCIONES ISOMORFICAS (MG <sup>2+</sup> , FE <sup>2+</sup> , FE <sup>3+</sup> ) EN PIROFILITA DELAMINADA  |
| i-MartinezHerediaL.pdf | Leandrp Martínez Heredia, Vladimir Coussirat, Leandro P. Bof, Julián F. Fernández, Patricia A. Quispe, Diego A. Pascua, Julián Del Plá, Martín J. Lavecchia, Reinaldo Pis Diez | FLEXO: DESARROLLO COLABORATIVO DE PROGRAMA PARA LA EXPLORACIÓN CONFORMACIONAL DE MOLÉCULAS ORGÁNICAS  |
| i-MartínezMedinaJJ.pdf | Juan José Martínez Medina, Nora Beatriz Okulik, Evelina Gloria Ferrer, Patricia Ana María Williams   | ESTUDIO ESTRUCTURAL DEL COMPLEJO DE OXIDOVANADIO(IV) CON EL FLAVONOIDE CRISINA  |
| i-MeierL1.pdf          | Lorena Meier, Ana Rossi Fernández, Norberto Castellani   | ESTUDIO TEÓRICO DE LA ADSORCIÓN DE DOPAMINA, ÁCIDO ASCORBICO Y ACIDO URICO SOBRE GRAFENO  |
| i-MeierL2.pdf          | Lorena Meier, Cecilia Morgade  | EFFECTO DE LA PRESENCIA DE AGUA EN LA ADSORCIÓN DE NAF SOBRE TIO <sub>2</sub> (101) ANATASA   |

|                   |  |   |
|-------------------|--|---|
| i-MendezM.pdf     | Miguel Angel Méndez, Sebastián Ayala-Ruano, Samara Oña, Antonio Leon-Reyes, Alain Goo  | BASE MOLECULAR DEL ACOPLAMIENTO JAZ-MYC, UNA INTERACCIÓN CLAVE EN LA RESPUESTA VEGETAL A ESTRÉS.  |
| i-MirandaM1.pdf   | Matías O. Miranda, Darío J. R. Duarte  | CINÉTICA DE LAS REACCIONES $HX/HOX + CHO \rightarrow H/HO + XCHO$ (X=Cl, Br)  |
| i-MissoniLL.pdf   | Leandro Missoni, Mario Tagliazucchi  | ESTUDIO TEÓRICO SOBRE LA DISTORSIÓN TETRAGONAL EN SUPERCRISTALES DE NANOPARTÍCULAS RECUBIERTAS DE LIGANDOS  |
| i-MonascalY.pdf   | Yeljair Monascal, María Paula Badenes  | MODELADO QUÍMICO-CUÁNTICO DE HALOMETILCICLOPROPANOS DE INTERÉS AMBIENTAL Y SUS PRODUCTOS DE ISOMERIZACIÓN TÉRMICA                                       |
| i-MoralesAH.pdf   | Andrés Hernán Morales, Johan Sebastian Hero, Gonzalo Andrés Lazcano, Alejandra Martínez, María Inés Gómez, Cintia Mariana Romero, Ana Estela Ledesma | INMOVILIZACIÓN DE UNA LIPASA DE CANDIDA RUGOSA SOBRE ÓXIDOS MIXTOS COMO PLATAFORMA BIOCATALÍTICA: ANÁLISIS IN SILICO DE LA INTERACCIÓN PROTEÍNA-SOPORTE |
| i-NarváezE1.pdf   | Ena Narváez, Christian Alcívar, Pablo Bonilla, Kevin Pabón, Sonia Ulic, Jorge Jios, Jorge Heredia-Moya, Oscar Piro, Gustavo Echeverría               | AZIDOMETIL CROMONAS 1: ESTUDIOS EN SOLUCIÓN, GAS Y FASE SÓLIDA  |
| i-NarvaezE2.pdf   | Ena Narváez, Christian Alcívar, Pablo Bonilla, Sonia Ulic, Jorge Jios, Jorge HerediaMoya, Oscar Piro, Gustavo Echeverría, Luis Ramos                 | AZIDOMETIL CROMONAS 2: ESTRUCTURA E INTERACCIONES EN 3-AZIDOMETIL-2-DIFLUOROMETIL CROMONA   |
| i-NuñezJ.pdf      | José Núñez, Gustavo Belletti, Frederik Tielens, Paola Quaino   | ANÁLISIS ESTRUCTURAL Y ENERGÉTICO DE NANOTUBOS DE CARBONO MODIFICADOS CON PLATINO   |
| i-OlivaresF.pdf   | Fernando Gabriel Olivares, Marcelo Omar Castillo, María Gloria Barúa, Juan Pablo Escalada, Graciela Pinto Vitorino                                   | ESTUDIO TEÓRICO DEL SOLVATOCROMISMO DE MICONAZOL  |
| i-OviedoMB.pdf    | María Belén Oviedo, Valentina A. Rovasio, Rodrigo A. Iglesias, Ana M Baruzzi   | ORIGEN DE LA RENORMALIZACIÓN DEL GAP ÓPTICO EN SEMICONDUCTORES DE TIPO N  |
| i-PascuaD.pdf     | Diego Pascua, Luciana G. Naso, Martín J. Lavecchia   | DESARROLLO DE ALGORITMO PARA LA PREDICCIÓN ESTRUCTURAL Y ESTABILIDAD ENERGÉTICA DE COMPUESTOS DE COORDINACIÓN DE ZN(II)                                 |
| i-PaterliniP.pdf  | Paula Paterlini, Ana Ledesma, Analía Alvarez, Cintia Romero  | ESTUDIO DE PROTEÍNAS CORONA EN NANOPARTÍCULAS DE PLATA DE SÍNTESIS BIOLÓGICA  |
| i-PerezA.pdf      | Néstor Ariel Pérez Chávez, Alberto Albesa, Gabriel Longo   | MICROGELES MULTI-ESTIMULOS: TEORIA TERMODINÁMICA  |
| i-PetelskiAN1.pdf | Andre N. Petelski, Josefina Marquez, Silvana C. Pamies, Gladis L. Sosa, Nélide M. Peruchena  | MODULACIÓN DE LA AFINIDAD POR ANIONES CLORURO DEL ÁCIDO BARBITÚRICO   |
| i-PetelskiAN2.pdf | Andre N. Petelski, Leopoldo Martín, José Aguayo, Juan F. Bessone, Gonzalo Ortiz, Iván Nuñez, Silvana Pamies, Gladis Laura Sosa                       | DISEÑO CONTROLADO DE PATRONES DE UNION DE MELAMINA  |

|                    |   |  |
|--------------------|---|--|
| i-PieslingerG.pdf  | Germán Pieslinger, Romina Carballo  | ESTUDIO POR DFT DE FILMS DE PORFIRINAS HETEROBIMETÁLICAS PUENTEADAS POR IÓN AZIDA: DILUCIDANDO SU RESPUESTA ELECTROQUÍMICA   |
| i-PucholJ.pdf      | Joaquín Ignacio Puchol, M. A. Via, V. V. Galassi, N. Wilke, M. G. Del Pópulo  | UN ENFOQUE COMPUTACIONAL SOBRE EL EFECTO DE LA NONAARGININA EN LAS PROPIEDADES VISCOELÁSTICAS DE MEMBRANAS LIPÍDICAS   |
| i-QuispeP.pdf      | Patricia Quispe, Ignacio León, Martín Lavecchia   | QUINASA DE ADHESIÓN FOCAL (FAK) COMO BLANCO MOLECULAR: ANÁLISIS COMPUTACIONAL DE LA ACCESIBILIDAD FARMACOLÓGICA DEL DOMINIO FERM   |
| i-ReimersW.pdf     | Walter Reimers, C. Romina Luna, Pablo Bechthold, Alfredo Juan   | ESTUDIO DE LA ADSORCIÓN DE ESPECIES NOX EN CEO2  |
| i-ReyL.pdf         | Luciana Rey, José Nuñez, Gustavo Belletti   | EFECTO DE LA INSERCIÓN DE CO EN NANOTUBOS DE CARBONO DE PARED SIMPLE CON DEFECTOS PUNTUALES  |
| i-RojasC.pdf       | Cristian Rojas Villa, Paola Castro, José F. Aranda, Pablo R. Duchowicz  | PREDICCIÓN COMPUTACIONAL DEL TIEMPO DE RETENCIÓN DE CONTAMINANTES IDENTIFICADOS EN ALIMENTOS   |
| i-RojasM1.pdf      | Mariana Isabel Rojas, Fernando, Ezequiel  | SIMULACIÓN COMPUTACIONALES DE LA TRANSICIÓN DE FASE DE ESTRUCTURAS DE MELEM SOBRE Au(111)  |
| i-RojasM2.pdf      | Silvia Alexander M., Mariana Isabel Rojas   | CARACTERIZACIÓN DE LAS PROPIEDADES DE PELÍCULAS DE MOLÉCULAS AUTO-ENSAMBLADAS DE MELAMINA Y MELEM  |
| i-RomanoE.pdf      | Elida Romano, María Victoria Castillo, Ana Estela Ledesma, Silvia Antonia Brandán   | ANÁLISIS ESTRUCTURAL, TOPOLÓGICO Y VIBRACIONAL DE HIDROXICLOROQUINA EN GAS Y EN SOLUCIÓN ACUOSA  |
| i-RomeroOjedaG.pdf | Gonzalo David Romero Ojeda, Glaucio Gomes, Nélide M. Peruchena, María F. Zalazar  | DIVERSIDAD CATALÍTICA EN ZEOLITAS: INFLUENCIA DEL EFECTO DE CONFINAMIENTO EN LA ADSORCIÓN DE ÁCIDO ACÉTICO Y SU RELACIÓN CON LAS CARACTERÍSTICAS TOPOLÓGICAS DEL CATALIZADOR |
| i-RossiA1.pdf      | Ana Cecilia Rossi Fernández, Luis G Aquino Linarez, Lorena A Meier, Carolina E Zubieta, Silvia A. Fuente, Patricia G. Belelli, Ricardo M. Ferullo | ESTUDIO TEÓRICO DE CATALIZADORES BIMETÁLICOS MODELO DE HIERRO-NÍQUEL PARA LA ACTIVACIÓN DE CO2   |
| i-RossiA2.pdf      | Ana Cecilia Rossi Fernández, Ana Belén Schvval, María Julia Jiménez, Gabriela Cabeza, Cecilia I. N. Morgade                                       | ESTUDIO TEÓRICO COMPARATIVO DEL EFECTO DEL COEFICIENTE U DE HUBBARD EN LOS SEMICONDUCTORES TiO2 Y ZnO  |
| i-RousseR.pdf      | Roberto Rousse, Daniel Mártire, Reinaldo Pis-Diez   | USO DE FUNCIONALES META GGA PARA MEJORAR DE ESTIMACIÓN DE LA ESTRUCTURA Y BRECHA DE BANDAS ELECTRÓNICAS EN FÓSFORO NEGRO Y FOSFORENOS DE POCAS CAPAS                         |

|                     |   |   |
|---------------------|---|---|
| i-RuizHidalgoJ1.pdf | José Ruiz Hidalgo, Adriana Neskeb, Maximiliano A. Iramaina , Patricio Leyton Bongiorno , Silvia A. Brandána                 | ESTUDIO EXPERIMENTAL Y TEÓRICO DE LA ACETOGENINA MODIFICADA SQUAMOCIN TRI-ACETILADO   |
| i-RuizHidalgoJ2.pdf | José Ruiz Hidalgo, Maximiliano A. Iramaina , Silvia A. Brandána   | PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y ELECTRONICAS DEL ANTIVIRAL RIMANTADINA  |
| i-SaavedraL.pdf     | Laura M. Saavedra, Pablo R. Duchowicz   | PREDICCIÓN DE LA TOXICIDAD DEL DESARROLLO EN EMBRIONES DEL PEZ CEBRA (Danio rerio) MEDIANTE UN MODELO QSAR NO CONFORMACIONAL              |
| i-SalvadorL.pdf     | Lorena E. Salvador Vallejo, Elizabeth Contreras Aguilar, Jorge L. Jios, Sonia E. Ulic                                       | ESTUDIO ESPECTROSCÓPICO DE 1-(2-HIDROXIFENIL)-3-FENIL-1,3-PROPANODIONA  |
| i-SimonettiS1.pdf   | Emilia Nosedá Grau, Gabriela Doderó, Sandra Simonetti   | ESTUDIO DE LA SILICA PRÍSTINA Y AMINO-FUNCIONALIZADA PARA EL TRANSPORTE DE LA DROGA AMPICILINA  |
| i-SimonettiS2.pdf   | Gabriel Román, Andrés Díaz Compañy, Sandra Simonetti  | DEPENDENCIA DE LA ADSORCIÓN DE LA DACARBAZINA CON EL PH: ESTUDIO DEL FÁRMACO TRANSPORTADO EN SUPERFICIES DE CARBONO                       |
| i-SzewczukNA1.pdf   | Nicolás A. Szewczuk, Pablo R. Duchowicz, Alicia B. Pomilio  | ANÁLISIS QSAR SOBRE LA INHIBICIÓN DE LA ACTIVIDAD MUTAGÉNICA POR DERIVADOS DE ANTOCIANINAS  |
| i-SzewczukNA2.pdf   | Nicolás Alejandro Szewczuk, Pablo R. Duchowicz, Alicia B. Pomilio, Rosana M. Lobayan  | ANÁLISIS TOPOLÓGICO-CONFORMACIONAL DE TRES ANTOCIANIDINAS: PELARGONIDINA, CIANIDINA Y DELFINIDINA   |
| i-TapiaMattarV1.pdf | Valeria Tapia Mattar, E. Maximiliano Gavilán Arriazu, Sergio A. Rodríguez   | ESTUDIO DEL COMPORTAMIENTO ELECTROQUÍMICO DE BHA Y BHT  |
| i-TorresP.pdf       | Paola Beatriz Torres, Sofía Baldor, Evelina Quiroga, Antonio José Ramírez-Pastor, Valeria Boeris, Claudio Fabian Narambuena | INTERACCIÓN DE ALFA-LACTOALBÚMINA CON CADENAS DE POLIELECTROLITOS DE DIVERSA NATURALEZA: UN ESTUDIO MEDIANTE SIMULACIONES COMPUTACIONALES |
| i-VilaJ.pdf         | Jesús Alberto Vila, Fabio E. Malanca  | Estudios conformacionales de las familias $C_xF_{2x+1}C(O)OONO_2$ y $C_xH_{2x+1}C(O)OONO_2$   |
| i-ZapataJ.pdf       | José E. Zapata Martínez   | ESTUDIO TEÓRICO DE LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES, ELECTRÓNICAS Y REACTIVIDADES DE LA DhL  |
| i-ZigoloM.A..pdf    | María Antonela Zígolo, Matías Rivero Goytia   | ANÁLISIS DE DOCKING PARA EVALUAR ACTIVIDAD ANTIVIRAL DE ALCALOIDES BENZILISOQUINOLINAS CONTRA PROTEÍNAS CLAVES DEL VIRUS DEL SARS-CoV-2.  |
| i-ZucchiniP.pdf     | Paolo Giovanni Zucchini Cuevas, María E. Tuccheri, Norma Caballero  | ESTUDIO COMPARATIVO DE LA TERMOQUÍMICA DE PROPENOS DIHALOGENADOS DE INTERÉS MEDIOAMBIENTAL  |

