

**Pasantías:**

<b>Resultado</b>	<b>Estudiante</b>
Pasantía de investigación	Brayan Sneider Siabato
Pasantía de investigación	Jennifer Cuellar Castrillón
Pasantía de investigación	Kevin Nicolás Chacón

**Trabajos de grado:**

<b>Trabajo de grado</b>	<b>Estudiantes</b>
Análisis de interacciones moleculares en heterooctámeros (etanol) <sub>7</sub> -agua, (metanol) <sub>7</sub> -agua y octámeros (etanol) <sub>8</sub> y (metanol) <sub>8</sub>	Jenny Carolina Vargas Cerquera, Lesma Ivonne Casas Tapia – Ingeniería Química
Geometric, Energetic, and Topological Analysis Of (Ethanol) <sub>8</sub> - Water Heterononamers. A Computational Approach	Karen Lorena Zuleta Hernández, Marly Dayanna Olarte Verdugo
Estudio computacional de la interacción de taninos condensados frente a mercurio Hg <sup>2+</sup>	Brayan Sneyder Siabato Corredor
Estudio computacional del sistema (Etanol) <sub>6</sub> -Agua y comparación con los sistemas homólogos: (Metanol) <sub>6</sub> -Agua, (Etanol) <sub>7</sub> y (Metanol)	Kevin Nicolás Chacón Osorio
Sistema catalítico de oro-platino (Au 6 pt neutro y cargado (+1, +2 y +3) con posible aplicación en la adsorción y oxidación de CO	Valery Pamela Orjuela Llanos
Estudio computacional de la actividad antiadherente de metabolitos secundarios presentes en frutos rojos	Kelly Johanna Hernández Leguizamón, Daniel Eduardo Chiquiza Baracaldo

**Participación en eventos científicos:**

<b>Evento</b>	<b>Trabajo</b>
VII Encuentro Nacional de Químicos Teóricos y Computacionales (ENQTC)	Poster
II Congreso de Química del Caribe, Evento Internacional	Poster

12th International Conference and Exhibition on Materials Science and Chemistry	E-Poster
Simposio Interdisciplinario de Física y Química Physics and Chemistry Meeting at the interface, Humboldt Kolleg	Expositor en muestra de carteles
22th International Conference on Computational Chemistry and Modelling	Presentación Oral
Curso de corta duración: "Métodos híbridos y estocásticos para explorar la superficie de energía potencial de clusters y moléculas"	Participantes: Kevin Chacón, Angie Parada, Jennifer Cuellar

Entre otros

Análisis de índices de reactividad de nanoagregados dimetálicos de Oro<sub>7</sub>-Platino<sub>1</sub> con posible aplicación en catálisis industrial- **Estudiante Sergio Joya Rodríguez**

Análisis de índices de reactividad de nanoagregados dimetálicos de Oro<sub>7</sub>-Paladio<sub>1</sub> con posible aplicación en catálisis industrial. **Estudiante Andrés Felipe Forero Garzón.**

Análisis de acoplamiento molecular para la identificación de potenciales compuestos inhibidores de cisteína sintasa de *Trypanosoma cruzi*. **Estudiante Jhon Jairo Molina Estrada.**

Predicción de parámetros de afinidad molecular entre modificadores de polímeros anfífilos y la anfotericina B como compuesto con actividad antifúngica. **Estudiante Diana Sofía Martínez Peña.**

Evaluación del efecto de la temperatura y del medio acuoso sobre la adsorción de óxido nítrico (NO) por el fullereno de nitrógeno de boro (B<sub>26</sub>N<sub>2</sub>). **Estudiante Cristian Camilo Medina Rodríguez.**

Estudiantes de la línea de Nanociencia Computacional y del grupo de investigación en Fitoquímica GIFUJ de la Pontificia Universidad Javeriana:

**Daniel Mojica Diaz** Ingeniería Química

**Maria Camila Padilla Sosa** Ingeniería Química