

CONVENIO PARA LA ASIGNACIÓN DE RECURSOS QUE CELEBRAN, POR UNA PARTE, LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA, REPRESENTADA POR SU SECRETARIO GENERAL Y APODERADO LEGAL EL M.A.V. RAÚL SÁNCHEZ TRILLO, A LA QUE EN LO SUCESIVO SE LE DENOMINARÁ "LA UNIVERSIDAD", Y POR LA OTRA EL DR. JAVIER CAMARILLO CISNEROS, AL QUE EN LO SUCESIVO SE LE DENOMINARÁ "EL INVESTIGADOR", PARA APOYAR EN EL ESTUDIO DE INVESTIGACIÓN DENOMINADO "BANCO DE MODELOS MOLECULARES DE SITIOS ACTIVOS ANTIBIÓTICO-BACTERIA: PROPIEDADES FÍSICOQUÍMICAS POR CÁLCULOS ATOMÍSTICOS Y APRENDIZAJE DE MÁQUINA". AL CUAL SE LE DENOMINARÁ "EL PROYECTO", EL CUAL SUJETAN AL TENOR DE LOS ANTECEDENTES, DECLARACIONES Y CLÁUSULAS SIGUIENTES:

ANTECEDENTES

I.- En fecha 20 de octubre de 2020 "LA UNIVERSIDAD" celebró un Convenio de Asignación de Recursos con el Intercam Banco, S.A., I.B.M., Intercam Grupo Financiero, en su carácter de fiduciaria del fideicomiso denominado "Fondo Institucional para el Desarrollo Científico, Tecnológico y de Innovación" identificado con el número F/3578 (FORDECYT-PRONACES) con el objeto de desarrollar el proyecto denominado "BANCO DE MODELOS MOLECULARES DE SITIOS ACTIVOS ANTIBIÓTICO-BACTERIA: PROPIEDADES FÍSICOQUÍMICAS POR CÁLCULOS ATOMÍSTICOS Y APRENDIZAJE DE MÁQUINA".

II.- En la cláusula Octava del convenio de origen, se señala que: "LA UNIVERSIDAD" designa al DR. JAVIER CAMARILLO CISNEROS, como Responsable Técnico del "PROYECTO".

DECLARACIONES:

I.- DECLARA "LA UNIVERSIDAD":

I.1 Que es un organismo público descentralizado del Estado, dotado de personalidad propia y plena capacidad jurídica, de conformidad con el Artículo 1º de la Ley Orgánica de la Universidad Autónoma de Chihuahua, aprobada por la Sexagésima Primera Honorable Legislatura Constitucional del Estado Libre y Soberano de Chihuahua, en su Decreto No.953/07 II P.O., publicado el 27 de junio de 2007 en el Periódico Oficial del Estado.

I.2 Que tiene por objeto, entre otros: impartir educación superior para formar profesionistas, investigadores y técnicos que contribuyan al desarrollo social, económico y cultural del Estado y de la Nación; proporcionando a sus miembros una sólida formación integral orientada por los valores más elevados del hombre; la justicia y la solidaridad social, el respeto a la pluralidad de las ideas, el sentido de servicio, el conocimiento científico y filosófico y la superación permanente; fomentando y realizando labores de investigación científica y humanística; promoviendo el desarrollo y la transformación social mediante servicios prestados a la colectividad; coadyuvando con organismos públicos, sociales y privados en actividades dirigidas a la satisfacción de necesidades sociales, especialmente las de carácter educativo.

I.3 Que comparece en este acto a través de su Secretario General y Apoderado Legal, el **M.A.V. RAÚL SÁNCHEZ TRILLO**, quien cuenta con amplias facultades para suscribir el presente instrumento, acreditando su personalidad con Poder General para Pleitos y Cobranzas, General para Actos de Administración y Pleitos y Cobranzas en Materia Laboral, y General para Actos de Administración, el cual consta en Acta No. 3,995 de fecha 22 de octubre del año 2018, registrada en el Libro 5 de Actos Fuera de Protocolo, pasada ante la fe del Adscrito a la Notaría Pública No. 10, el Lic. Luis Calderón De Anda, en ejercicio para el Distrito Judicial Morelos, y que las facultades que le fueron conferidas no le han sido revocadas, modificadas ni limitadas en forma alguna.

I.4 Que el **M.A.V. RAÚL SÁNCHEZ TRILLO** acredita su personalidad como Secretario General con nombramiento expedido a su favor por el **M.E. LUIS ALBERTO FIERRO RAMÍREZ**, Rector de la Universidad Autónoma de Chihuahua, en ejercicio de la facultad que le confiere el Artículo 23, fracción IV de la Ley Orgánica de la Universidad Autónoma de Chihuahua, en fecha 16 de septiembre de 2018.

I.5 Que "**LA UNIVERSIDAD**" dispone de la suficiencia presupuestal para asignar a "**EL INVESTIGADOR**" los recursos objeto de este convenio, mismos que derivan del convenio señalado en el Antecedente I del presente instrumento.

I.6 Que para efectos del presente convenio, señala como domicilio legal el ubicado en la calle Escorza No. 900 Col. Centro, C.P. 31000, en la ciudad de Chihuahua, Chihuahua.

II.- DECLARA "EL INVESTIGADOR":

II.1. Que es una persona física con capacidad legal para suscribir el presente instrumento, y que se identifica con credencial de elector con Clave: CMCSJV84011708H700.

II.2. Que es catedrático e investigador en la Unidad Académica Facultad de Medicina y Ciencias Biomédicas "**LA UNIVERSIDAD**"; que es Profesor de Tiempo Completo con categoría Académico Titular C, con número de empleado 16528.

II.3. Que para efectos del presente Convenio señala como domicilio legal, el ubicado en la calle Olivar de Alora número 17718, Fracc. Los Olivos, C.P. 31180, de la Ciudad de Chihuahua, Chih.

III. DECLARAN AMBAS PARTES:

ÚNICO.- Que se reconocen la personalidad con que comparecen en el presente convenio y que están de acuerdo en obligarse al tenor de las siguientes:

CLAÚSULAS

PRIMERA.- "**LA UNIVERSIDAD**", de conformidad con los términos previstos en este convenio y de acuerdo a las reglas y lineamientos del Manual para la Administración de Proyectos de Investigación del "**CONACYT**", se compromete a otorgar a "**EL INVESTIGADOR**" la cantidad de **\$681,100.00 (seiscientos ochenta y un mil cien pesos 00/100 M.N.)**, misma que será empleada por "**EL INVESTIGADOR**" exclusivamente para la realización de "**EL PROYECTO**".

SEGUNDA.- La cantidad referida anteriormente será entregada por **"LA UNIVERSIDAD"** mediante cheques a nombre de **"EL INVESTIGADOR"**, o bien, será ejercida por **"LA UNIVERSIDAD"** de acuerdo a las solicitudes que para tal efecto le realice **"EL INVESTIGADOR"** con estricto apego a las prácticas administrativas de **"LA UNIVERSIDAD"**, conforme al calendario de ministraciones establecido en el desglose financiero, el cual debidamente suscrito por las partes formará parte integrante de este convenio identificado como **ANEXO 1**.

TERCERA.- **"EL INVESTIGADOR"** se obliga a desarrollar **"EL PROYECTO"** de acuerdo a la metodología, metas, objetivos, plazos y al cronograma de actividades contenidas en el **ANEXO 2** de este instrumento, el cual debidamente firmado por las partes intervinientes forma parte integrante de este convenio.

CUARTA.- **"EL INVESTIGADOR"** se obliga a invertir la totalidad de los recursos señalados en la Cláusula Primera de este convenio en los conceptos del desglose financiero que se detallan en el **ANEXO 1**, estando en posibilidad **"EL INVESTIGADOR"** de aportar recursos propios en efectivo o en especie para la consecución de **"EL PROYECTO"**.

QUINTA.- **"EL INVESTIGADOR"** acepta expresamente que la segunda o subsecuentes ministraciones de recursos, para poder ser realizadas, estarán sujetas al dictamen favorable que se haga de los avances técnicos y financieros a que se refiere la Cláusula Sexta de este convenio, los cuales deberán estar debidamente documentados y correlacionados respecto al calendario del **ANEXO 2**, y con base en los ajustes que, en su caso, autorice la Dirección de Investigación y Posgrado de **"LA UNIVERSIDAD"**.

SEXTA.- **"EL INVESTIGADOR"** se obliga a presentar ante el Responsable Administrativo de **"LA UNIVERSIDAD"** y conforme a lo que se establece en el Manual para la Administración de Proyectos de Investigación del **"CONACYT"**, tanto los avances, la aplicación de los recursos que se le canalizan conforme a los conceptos del desglose financiero y su soporte documental, así como el informe final de **"EL PROYECTO"**.

SÉPTIMA.- **"LA UNIVERSIDAD"** nombra como Responsable Administrativo de **"EL PROYECTO"** al M.P.E.A. **ALFREDO RAMÓN URBINA VALENZUELA**, en su carácter de Director de Investigación y Posgrado, quien será el enlace institucional y el responsable del manejo de los recursos canalizados a **"EL INVESTIGADOR"**.

OCTAVA.- **"LA UNIVERSIDAD"** se reserva el derecho de supervisar, evaluar el avance, realizar auditorías en cualquier tiempo y solicitar todo tipo de informes técnicos y financieros de **"EL PROYECTO"**, quedando obligado **"EL INVESTIGADOR"** a presentarle toda la información que se le requiera, incluyendo la necesaria para evaluar el impacto de los resultados dentro del tiempo calendarizado.

NOVENA.- Al término de **"EL PROYECTO"**, **"EL INVESTIGADOR"** deberá presentar el informe final, señalando los productos resultado de su desarrollo y, en su caso, apoyar a **"LA UNIVERSIDAD"** en el proceso de transferencia de tecnología, adopción, adaptación y asimilación de los productos obtenidos en base a **"EL PROYECTO"**.

DÉCIMA.- “LA UNIVERSIDAD” podrá rescindir el presente convenio en forma inmediata, y sin necesidad de declaración judicial, cuando “EL INVESTIGADOR” incurra en alguno de estos supuestos:

- a) Destine los recursos canalizados a su favor, a fines distintos a los conceptos del desglose financiero señalados en el **ANEXO 1**.
- b) No compruebe la aplicación de los recursos canalizados a su favor, en los conceptos del desglose financiero señalados en el **ANEXO 1**.
- c) No desarrolle “**EL PROYECTO**” de conformidad con la metodología, metas, objetivos y plazos contenidos en el **ANEXO 2**.
- d) Incurra en alguna falta que amerite la cancelación del presente convenio.
- e) Por incumplimiento de cualquiera de las obligaciones estipuladas en este convenio a cargo de “**EL INVESTIGADOR**”.

Para que la rescisión aludida opere bastará simple aviso por escrito a “**EL INVESTIGADOR**” en el que se expongan sucintamente las causas que la motivaron, y en el cual se hará el requerimiento de pago a que se refiere la Cláusula siguiente.

Quedará a discreción de “**LA UNIVERSIDAD**” concederle a la contraparte un plazo prudente para subsanar el incumplimiento de alguna de sus obligaciones, para que, de esta forma, no sobrevenga en definitiva la rescisión de este convenio.

DÉCIMA PRIMERA.- En caso de que el presente convenio se rescinda en los términos de la Cláusula que antecede, “**EL INVESTIGADOR**”, se obliga a pagar a “**LA UNIVERSIDAD**” el monto total que le fue otorgado por concepto de asignación de recursos para el desarrollo de “**EL PROYECTO**”, monto que quedará determinado por las ministraciones que efectivamente se hubieren realizado de conformidad con la Cláusula Segunda del presente instrumento, así como por los intereses del tipo legal que se generen desde el momento en que la ministración relativa se efectuó hasta el día del pago total del adeudo.

El pago referido en el párrafo anterior, lo realizará “**EL INVESTIGADOR**” en Caja Única de “**LA UNIVERSIDAD**” en una sola exhibición en efectivo o mediante cheque certificado librado a nombre de la **UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA**, en un plazo que no deberá exceder de 30 días naturales contados a partir del aviso de rescisión a que se alude en el párrafo segundo de la Cláusula Décima de este convenio.

En caso de que “**EL INVESTIGADOR**” no pueda efectuar el pago en los términos estipulados en el párrafo anterior, autoriza expresamente a “**LA UNIVERSIDAD**” a realizar descuentos a su salario por todo el tiempo que resulte necesario para cubrir el adeudo respectivo, en la inteligencia de que el monto de los citados descuentos será fijados discrecionalmente por “**LA UNIVERSIDAD**”. Los aludidos descuentos se aplicarán a partir del primer salario que “**EL INVESTIGADOR**” perciba después de haber transcurrido los 30 días naturales a que se refiere el párrafo que antecede.

DÉCIMA SEGUNDA.- “**EL INVESTIGADOR**” acepta que, en caso de que su relación laboral con “**LA UNIVERSIDAD**” termine por cualquier motivo, si no ha pagado la totalidad de las cantidades que “**LA UNIVERSIDAD**” hubiere erogado con motivo de los recursos que se le otorgaron para la realización de “**EL PROYECTO**”, el saldo le será descontado de su liquidación.

Si habiéndose hecho el descuento a que se refiere el párrafo anterior quedara algún remanente por pagar, "EL INVESTIGADOR", no obstante haber concluido su relación laboral con "LA UNIVERSIDAD", deberá cubrir el citado remanente, para lo cual deberá otorgar garantía suficiente a favor de "LA UNIVERSIDAD" mientras se cubre la totalidad de la cantidad respectiva.

DÉCIMA TERCERA.- El presente convenio tendrá una vigencia a partir de la fecha de su firma y hasta la total conclusión de las obligaciones que del mismo se desprenden.

La vigencia del presente instrumento puede concluir antes de lo estipulado en el párrafo anterior si "EL INVESTIGADOR" incurre en los supuestos previstos en la Cláusula Décima del presente instrumento.

DÉCIMA CUARTA.- Las partes acuerdan que la información o productos parciales que sean resultado de las actividades pactadas en relación con el presente instrumento, incluyendo el producto final de los trabajos realizados por "EL INVESTIGADOR", no podrán divulgarse, ni transferirse a terceros, sino única y exclusivamente al personal competente de la Dirección de Investigación y Posgrado de "LA UNIVERSIDAD".

DÉCIMA QUINTA.- Las partes acuerdan que cualquier modificación al presente convenio, para que tenga validez, deberá otorgarse por escrito, debiendo igualmente constar la firma de las partes intervinientes.

DÉCIMA SEXTA.- "LA UNIVERSIDAD" no será responsable de los daños y perjuicios que se pudiesen ocasionar a "EL INVESTIGADOR" por casos fortuitos o de fuerza mayor, así como por paro de labores académicas o administrativas o cualquier causa ajena a la voluntad de las partes.

Si por caso fortuito o causas de fuerza mayor "EL INVESTIGADOR" interrumpe las actividades de "EL PROYECTO" objeto del presente instrumento, deberá dar aviso por escrito a "LA UNIVERSIDAD" obligándose a reanudarlas en un término que no será mayor a 24 horas contadas a partir de que desaparezca la causa de interrupción de dichas actividades.

DÉCIMA SÉPTIMA.- Las partes convienen y "EL INVESTIGADOR" manifiesta su conformidad de que no podrá en ningún momento ceder, enajenar, transmitir o comprometer, en todo o en parte, los derechos que le concede el presente instrumento, sin la previa autorización o conformidad que por escrito emita "LA UNIVERSIDAD", siendo causa de rescisión la contravención a lo aquí pactado.

DÉCIMA OCTAVA.- Las partes convienen en que todos los avisos, notificaciones y requerimientos que deban realizarse bajo el presente instrumento, deberán hacerse por escrito a los domicilios señalados en el respectivo capítulo de Declaraciones.

En caso de que cualquiera de las partes señale un nuevo domicilio, éste se tendrá como válido para los efectos de este contrato a partir de la notificación relativa que la parte interesada realice a su contraparte.



DÉCIMA NOVENA.- Las partes manifiestan y reconocen que el presente instrumento constituye el acuerdo de voluntades y que no existe error, dolo, mala fe o cualquier otro vicio del consentimiento, que pudiera afectarlo o invalidarlo.

VIGÉSIMA.- Las partes manifiestan que en caso de suscitarse duda o controversia sobre la interpretación o cumplimiento del presente convenio, la resolverán de común acuerdo, y en caso de no llegar a ningún acuerdo, se someterán a la jurisdicción de los Tribunales Competentes en la Ciudad de Chihuahua, Chih., renunciando desde ahora a cualquier fuero que pudiera corresponderles en razón de su domicilio presente o futuro.

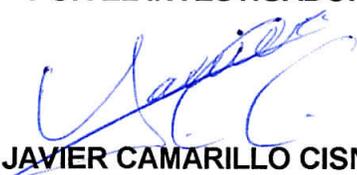
LEÍDO el presente convenio constante de 6 hojas escritas solo al anverso, y enteradas las partes del contenido y alcance de cada una de sus cláusulas, lo firman por triplicado en la ciudad de Chihuahua, Chihuahua, el día 24 de marzo de 2021

**POR LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE
CHIHUAHUA**



M.A.V. RAÚL SÁNCHEZ TRILLO
SECRETARIO GENERAL Y APODERADO LEGAL

POR EL INVESTIGADOR



DR. JAVIER CAMARILLO CISNEROS

TESTIGOS



**M.P.E.A. ALFREDO RAMÓN URBINA
VALENZUELA**
DIRECTOR DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO



DR. LUIS CARLOS HINOJOS GALLARDO
DIRECTOR FACULTAD DE MEDICINA Y CIENCIAS
BIOMÉDICAS

LAS PRESENTES FIRMAS CORRESPONDEN AL CONVENIO DE ASIGNACIÓN DE RECURSOS CELEBRADO ENTRE LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA Y EL DR. JAVIER CAMARILLO CISNEROS, EN FECHA 24 DE MARZO DE 2021. **CONSTE**

Anexo Uno Desglose financiero

"La información contenida en los Anexos deberá apegarse a lo establecido en los Términos de Referencia de la Convocatoria, en las recomendaciones de la Comisión y de la Secretaría Técnica, así como en los Acuerdos del CTA. Los recursos correspondientes a rubros y montos no autorizados se tendrán por no reconocidos y se aplicará lo previsto en la normativa para garantizar su reembolso."

Institución	Etapa 1		Etapa 2		Etapa 3		Totales	
	Gasto inversión	Gasto corriente	Gasto inversión	Gasto corriente	Gasto inversión	Gasto corriente	Gasto inversión	Gasto corriente
UNIVERSIDAD AUTONOMA DE CHIHUAHUA	\$0.00	\$0.00	\$0.00	\$0.00	\$0.00	\$15,100.00	\$0.00	\$15,100.00
Facultad de Medicina y Ciencias Biomédicas	\$135,000.00	\$0.00	\$0.00	\$264,000.00	\$0.00	\$132,000.00	\$135,000.00	\$396,000.00
FACULTAD DE INGENIERÍA	\$135,000.00	\$0.00	\$0.00	\$0.00	\$0.00	\$0.00	\$135,000.00	\$0.00
TOTALES	\$270,000.00	\$0.00	\$0.00	\$264,000.00	\$0.00	\$147,100.00	\$270,000.00	\$411,100.00

Etapa 1 (Año 1)

RENIECyT: 1702667-10

Institución: Facultad de Medicina y Ciencias Biomédicas

Gasto de inversión

Rubro	Justificación	Monto
Equipo de cómputo especializado	Compra de 1 PC de cálculo con tarjeta de video dedicada, con 5120 procesadores CUDA (no se comprarán monitores, ratón, teclado, altavoces, sólo PC). Rubro sin modificación al envío original. El equipo especializado de cómputo es el principal equipo para llevar a cabo la investigación.	\$130,000.00
Herramientas y accesorios	Compra de 1 equipo UPS No-Break, accesorio de protección eléctrica para 1 PC. La unidad UPS se mantiene como un accesorio eléctrico importante para la protección del equipo de computo	\$5,000.00
Total de gasto de inversión: \$135,000.00		

Gasto corriente

Rubro	Justificación	Monto
Formación de Recursos Humanos	El estudiante se mantendrá y la formación de recursos humanos que conlleva enseñarle a realizar las tarea de crear moléculas. Sin embargo, se eliminara el gasto de esta beca, ya que debido a la manera en que se trabajara de manera online no es requerida. Se mantiene el la formación del recurso humano, solo se elimina el gasto.	\$0.00
Total de gasto corriente: \$0.00		

RENIECyT: 1702667-5

Institución: FACULTAD DE INGENIERÍA

Gasto de inversión

Rubro	Justificación	Monto
Herramientas y accesorios	Compra de 1 equipo UPS No-Break, accesorio de protección eléctrica para 1 PC. La unidad UPS se mantiene como un accesorio eléctrico importante para la protección del equipo de computo	\$5,000.00
Equipo de cómputo especializado	Compra de 1 PC de cálculo con tarjeta de video dedicada, con 5120 procesadores CUDA (no se comprarán monitores, ratón, teclado, altavoces, sólo PC). Rubro sin modificación al envío original. El equipo especializado de cómputo es el principal equipo para llevar a cabo la investigación.	\$130,000.00
Total de gasto de inversión: \$135,000.00		

Gasto corriente

Rubro	Justificación	Monto
Formación de Recursos Humanos	El estudiante se mantendrá y la formación de recursos humanos que conlleva enseñarle a realizar las tarea de crear moléculas. Sin embargo, se eliminara el gasto de esta beca, ya que debido a la manera en que se trabajara de manera online no es requerida. Se mantiene el la formación del recurso humano, solo se elimina el gasto.	\$0.00
Total de gasto corriente: \$0.00		

Etapa 2 (Año 2)

RENIECyT: 1702667-10

Institución: Facultad de Medicina y Ciencias Biomédicas

Gasto de inversión

Rubro	Justificación	Monto
Total de gasto de inversión: \$0.00		

Gasto corriente

Rubro	Justificación	Monto
Investigadores Posdoctorales	Pago de investigador postdoctoral para cubrir 22.000 pesos mensuales. El investigador postdoctoral trabajará al principio del primer año.	\$264,000.00
Formación de Recursos Humanos	El estudiante se mantendrá y la formación de recursos humanos que conlleva enseñarle a realizar las tarea de crear moléculas. Sin embargo, se eliminara el gasto de esta beca, ya que debido a la manera en que se trabajara de manera online no es requerida. Se mantiene el la formación del recurso humano, solo se elimina el gasto.	\$0.00
Total de gasto corriente: \$264,000.00		

RENIECyT: 1702667

Institución: UNIVERSIDAD AUTONOMA DE CHIHUAHUA

Gasto de inversión

Rubro	Justificación	Monto
Total de gasto de inversión: \$0.00		

Gasto corriente

Rubro	Justificación	Monto
Viáticos	El problema actual de covid a lo largo del mundo crea graves problemas de logística referentes a traslados entre países ya sea por medio de tierra o aire. La sugerencia de eliminar este gasto es aceptada por el equipo de trabajo.	\$0.00
Estancias técnico-académicas para participantes y visitantes	El problema actual de covid a lo largo del mundo crea graves problemas de logística referentes a traslados entre países ya sea por medio de tierra o aire. La sugerencia de eliminar este gasto es aceptada por el equipo de trabajo.	\$0.00
Pasajes	El problema actual de covid a lo largo del mundo crea graves problemas de logística referentes a traslados entre países ya sea por medio de tierra o aire. La sugerencia de eliminar este gasto es aceptada por el equipo de trabajo.	\$0.00
Total de gasto corriente: \$0.00		

RENIECyT: 1702667-5

Institución: FACULTAD DE INGENIERÍA

Gasto de inversión

Rubro	Justificación	Monto
-------	---------------	-------

Total de gasto de inversión: \$0.00

Gasto corriente

Rubro	Justificación	Monto
Formación de Recursos Humanos	El estudiante se mantendrá y la formación de recursos humanos que conlleva enseñarle a realizar las tarea de crear moléculas. Sin embargo, se eliminara el gasto de esta beca, ya que debido a la manera en que se trabajara de manera online no es requerida. Se mantiene el la formación del recurso humano, solo se elimina el gasto.	\$0.00
Total de gasto corriente: \$0.00		

Etapa 3 (Año 3)

RENIECyT: 1702667-10

Institución: Facultad de Medicina y Ciencias Biomédicas

Gasto de inversión

Rubro	Justificación	Monto
Total de gasto de inversión: \$0.00		

Gasto corriente

Rubro	Justificación	Monto
Investigadores Posdoctorales	Pago de investigador postdoctoral (PR) para cubrir 22 000 pesos mensuales. Si el rendimiento del Investigado Posdoctoral es excelente, se solicitará una prórroga de 6 meses, de lo contrario se buscará otro Investigador. El ajuste de 2 000 pesos fue solamente para corregir un error en el sueldo del investigador posdoctoral de 22 000 pesos por 6 meses.	\$132,000.00
Formación de Recursos Humanos	El estudiante se mantendrá y la formación de recursos humanos que conlleva enseñarle a realizar las tarea de crear moléculas. Sin embargo, se eliminara el gasto de esta beca, ya que debido a la manera en que se trabajara de manera online no es requerida. Se mantiene el la formación del recurso humano, solo se elimina el gasto.	\$0.00
Total de gasto corriente: \$132,000.00		

RENIECyT: 1702667

Institución: UNIVERSIDAD AUTONOMA DE CHIHUAHUA

Gasto de inversión

Rubro	Justificación	Monto
Total de gasto de inversión: \$0.00		

Gasto corriente

Rubro	Justificación	Monto
Auditoría	se ajustó el gasto de auditoría al 1% del total del proyecto.	\$6,811.00
Pasajes	El problema actual de covid a lo largo del mundo crea graves problemas de logística referentes a traslados entre países ya sea por medio de tierra o aire. La sugerencia de eliminar este gasto es aceptada por el equipo de trabajo.	\$0.00
Viáticos	El problema actual de covid a lo largo del mundo crea graves problemas de logística referentes a traslados entre países ya sea por medio de tierra o aire. La sugerencia de eliminar este gasto es aceptada por el equipo de trabajo.	\$0.00
Cuotas de inscripción	El dinero asignado a este rubro nos permitirá inscribirnos en congresos internacionales que trabajen en la modalidad virtual. Preferentemente serán inscritos algunos de los alumnos que son parte del equipo de trabajo.	\$8,289.00
Total de gasto corriente: \$15,100.00		

RENIECyT: 1702667-5

Institución: FACULTAD DE INGENIERÍA

Gasto de inversión

Rubro	Justificación	Monto
Total de gasto de inversión: \$0.00		

Gasto corriente

Rubro	Justificación	Monto
Formación de Recursos Humanos	El estudiante se mantendrá y la formación de recursos humanos que conlleva enseñarle a realizar las tarea de crear moléculas. Sin embargo, se eliminara el gasto de esta beca, ya que debido a la manera en que se trabajara de manera online no es requerida. Se mantiene el la formación del recurso humano, solo se elimina el gasto.	\$0.00
Total de gasto corriente: \$0.00		

[Handwritten signatures and initials in blue ink]

Anexo Dos Cronograma de actividades por etapa

En la siguiente tabla se contabiliza la etapa en la que finalizarán los productos.

Producto	Etapa 1	Etapa 2	Etapa 3	Totales
Postdoctorante	0	1	1	2
Artículo científico en revista internacional indexada	0	2	1	3
Tesis licenciatura	3	2	2	7
Desarrollo de software	0	3	0	3
Tesis maestría	0	0	1	1
Ponencia	0	0	1	1
Base de datos	4	3	2	9
Totales:	7	11	8	26

En la siguiente tabla se mostrarán los participantes en el proyecto.

Nombre	Institución	Rol
Dr. JAVIER CAMARILLO CISNEROS	UNIVERSIDAD AUTONOMA DE CHIHUAHUA	Responsable técnico
Dra. GRACIELA MARIA DE JESUS RAMIREZ ALONSO	FACULTAD DE INGENIERÍA	Corresponsable técnico
Dr. CARLOS ARZATE QUINTANA	Facultad de Medicina y Ciencias Biomédicas	Corresponsable técnico
Dra. MARIA ALEJANDRA FAVILA PEREZ	Universidad Autonoma de Chihuahua	Participante
Mtro. RODRIGO DOMINGUEZ GARCIA		Participante
Mtro. LUIS CARLOS HINOJOS GALLARDO	Universidad Autonoma de Chihuahua	Participante
Mtro. LUIS BERNARDO ENRIQUEZ SANCHEZ	Universidad Autonoma de Chihuahua	Participante
Dra. ALVA ROCIO CASTILLO GONZALEZ	Universidad Autonoma de Chihuahua	Participante
Dr. ALEJANDRO ARZOLA RUBIO		Participante

Etapa 1

Descripción de la etapa

El primer año de trabajo abarca los objetivos 1 a 4 y se centra en la creación de los sistemas de sitios con actividad antibiótica-bacteriana (ATB-BCTas) y en la realización de los cálculos iniciales de Campo de Fuerza y Teoría de Funcionales de la Densidad. Junto con el trabajo relativo a la búsqueda de estructuras estables, al mismo tiempo la requisición, comparación y adquisición de los 2 únicos equipos informáticos y la configuración de las tarjetas de vídeo dedicadas de Titán V o similares. A mediados de este año de trabajo se espera realizar las entrevistas y la contratación del investigador postdoctoral.

Actividades

Determinar los entornos químicos de cada átomo de las ATB-BCTas, cargar esta hibridación e interacción atómica en los archivos de inicio. Los cálculos de Campos de Fuerza utilizarán la mayor precisión posible para los sistemas que estarán disponibles.

Realizar simulaciones computacionales en ambos softwares Fhi-aims y Quantum espresso, incluyendo interacciones dispersivas por medio del esquema vdW para determinar la estructura más estable.

Creación de los diversos puntos de interacción de las bacterias, reportados por las publicaciones científicas y ensamblados dentro del software de visualización.

Realizar simulaciones computacionales en ambos FHI-aims y en el software Quantum espresso para determinar la estructura más estable incluyendo los efectos cuánticos.

Productos

Tesis licenciatura

Base de datos

Etapa 2

Descripción de la etapa

Durante el segundo año de trabajo, se incluyen los objetivos 5 a 12. En este año las actividades se centran en terminar los cálculos de la física cuántica y la química, enviar dos artículos a revistas indexadas e iniciar la programación de los algoritmos del código propio de Machine Learning. A mediados de este año, los 12 meses de trabajo del Investigador Postdoctoral terminarán, por lo que se evaluará si ampliar su contrato a 6 meses más o buscar un Investigador Postdoctoral diferente.

Actividades

Crear cada una de las 250 moléculas que serán calculadas por los niveles de la teoría FF, DFT y RPA. Las 250 moléculas calculadas se almacenarán en un formato que es útil para el propio software de Machine Learning.

Se crearán diferentes opciones de análisis para nuestro propio código de aprendizaje automático con un sistema de análisis centrado en el cálculo de las propiedades físicas.

El grupo de trabajo contribuirá a la creación de un artículo científico con datos del sistema y simulación a través del Campo de Fuerza.

Crear cada una de las 100 moléculas que serán calculadas por los niveles de la teoría FF, DFT y RPA. Las 100 moléculas calculadas se almacenarán en un formato que es útil para el propio software de Machine Learning.

Para entrenar cada una de las configuraciones contra la Base de Datos 1. Se espera que lo haga de forma automatizada, ya que la base de datos se creará con archivos para su comparación directa.

Para calcular las configuraciones de cada molécula contenida en la Base de Datos 2 y cuantificar la precisión, buscando obtener una exactitud del 80-85%. Se espera que lo haga de forma automatizada, ya que esta base de datos se creará con archivos para su comparación directa.

Realizar la simulación informática tanto en los programas de FHI como en los de Quantum espresso en aquellos grupos funcionales que se ha determinado que son responsables de las interacciones por medio del esquema RPA.

El grupo de trabajo contribuirá a la creación de un artículo científico con datos del sistema y simulación a través de DFT y DFT+vdW.

Productos

Postdoctorante

Artículo científico en revista internacional indexada

Tesis licenciatura

Desarrollo de software

Base de datos

Etapa 3

Descripción de la etapa

En el último año de trabajo se llevarán a cabo las tareas incluidas en los objetivos 13 a 15 referentes a la aplicación de la versión final del código de aprendizaje automático a sistemas importantes y a la difusión de la base de datos en

[Handwritten signature]
/277

plataformas web.

Actividades

Crear la página de alojamiento de moléculas, crear la metodología de registro de usuarios y cargar la información química relevante adjunta a cada modelo de ATB-BCTas.

Calcular las estructuras de energía mínima de las configuraciones totales de ATB-BCTas. Los resultados de las geometrías, energías y fuerzas finales se compararán con FF, DFT-LDA, DFT-PBE, DFT+vdW y RPA con la intención de tener la primera comparación directa con los métodos de la física y la química computacional.

El grupo de trabajo contribuirá a la creación de un artículo científico con datos del sistema y simulación a través del código propio de Machine Learning.

Productos

Postdoctorante

Tesis licenciatura

Artículo científico en revista internacional indexada

Tesis maestría

Ponencia

Base de datos

