



CONGRESO MEXICANO DE QUÍMICA
35° CONGRESO NACIONAL DE EDUCACIÓN
QUÍMICA

SOCIEDAD QUÍMICA DE MÉXICO, A.C.
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE HIDALGO
“LA QUÍMICA NOS UNE”

SIMPOSIOS

2018
Pachuca, Hidalgo

51º Congreso Mexicano de Química
35º Congreso Nacional de Educación Química

CONTENIDO

Simposio 1.....	4
"La Enseñanza Experimental en la Química Analítica Contemporánea: ¿Qué Enseñar y Cómo Hacerlo?" 4	
"Química Analítica a microescala total."	4
"Aplicación de conceptos de equilibrio químico en la separación de fármacos por medio de membranas líquidas emulsionadas."	7
"Integración de las Tecnologías de la Información y la Comunicación (TIC) en la enseñanza experimental de la Química Analítica."	9
"De la teoría de la química analítica al laboratorio."	11
Simposio 2.....	13
Mecanismos de reacción en fotoquímica, fotocatalisis y catalisis de compuestos orgánicos."	13
"Fotoquímica y Fotocatalisis. Aspectos básicos y mecanismos de reacción."	13
"La fotoquímica como energía de activación alterna."	14
"Ampliando el Entendimiento de los Procesos Fotocatalíticos Mediante el uso de Técnicas Electroquímicas Convencionales."	15
"Metanación de CO ₂ Catalizada por Complejos y Nanopartículas de Metales de Transición Soportados en Óxidos Metálicos: Evidencia Espectroscópica de Intermediarios de Reacción."	15
Simposio 3.....	17
"Protección solar una visión Químico- Cosmética."	17
"¿Protección solar, como se encuentra el mercado?"	18
"Conceptos y principios de acción de los protectores solares."	18
"Efectos químicos en la piel por exposición a radiaciones."	19
"La nanotecnología en la protección solar."	19
Simposio 4.....	22
"Fuerzas Intermoleculares en la Educación Química."	22
"Fuerzas Intermoleculares: Una Revisión de su Enseñanza y Aprendizaje."	22
"La importancia de involucrar a los estudiantes en la construcción de modelos."	23
"La importancia del modelo de óxido reducción en la Educación Química."	23
"El ciclo del azufre en educación química y su importancia en la biotecnología ambiental."	24
Simposio 5.....	25
"Síntesis de Materiales para la Producción y Almacenamiento de Energía."	25
"El Proyecto de Energía Limpia: de la predicción a la síntesis."	25
"Preparación y caracterización del Li ₄ Ti ₅ O ₁₂ por síntesis sonoquímica, solvotermal y por electrohilado con uso en baterías recargables ion-litio"	26
"Materiales Cerámicos Polifuncionales con Aplicaciones en Medioambiente y Energía."	26
"Síntesis de Nuevos Materiales Energéticos."	27

2016

Pachuca, Hidalgo

Simposio 6	28
"Desarrollo de Fármacos: Estrategias químico-farmacéuticas en la búsqueda de sustancias bioactivas." .28	
"La Química Computacional como Auxiliar en el Diseño Fármacos: Experiencias con Compuestos Tricíclicos y Compuestos de Origen Natural."	28
"Síntesis, actividad tricomonocida y candidida de derivados de 2-fenil-2 <i>H</i> -indazol y 2,3-difenil-2 <i>H</i> -indazol."	29
"Descubrimiento de Ligandos Multitarget para el Tratamiento de Diabetes Mellitus II."	30
"Descubrimiento, diseño y síntesis de ligandos selectivos del receptor σ_1 en el tratamiento experimental del dolor. Análisis in combo de sus efectos antinociceptivos."	30
Simposio 7.....	32
"Química Orgánica. Síntesis Total.".....	32
"Síntesis Total de Productos Naturales Carbo- y Heterocíclicos."	33
"<Serpientes y Escaleras> en la Síntesis Total de Flustraminas de <i>Flustra foliacea</i>	33
"Secuencias radicalarias-iónicas: Herramientas útiles en síntesis orgánica."	34
"Una nueva aproximación poco tóxica y muy accesible para la síntesis total de alcaloides.".....	35
Simposio 8.....	36
"Sensores 2016."	36
"Sensores químicos y biosensores para la cuantificación electroquímica de analitos en medio acuoso."	37
"Desarrollo de sensores colorimétricos de iones metálicos."	37
"Sensores basados en nanomateriales autoensamblados para el desarrollo de herramientas de diagnóstico inmediato de enfermedades."	38
"Quimiosensores para análisis biológicos basados en receptores luminiscentes."	38
Simposio 9.....	40
Química Teórica del Estado Sólido	40
"Estudio sobre la reactividad de las superficies de hidróxidos dobles laminares usando la teoría de los funcionales de la densidad."	40
"Computational Methods in Solid State Chemistry and their Applications to Producing and Storing Clean Energy."	41
"Modelado de superficies catalíticas."	42
"Enlaces y transformaciones químicas en materiales. Estudios ab initio sobre modelos periódicos." ...	43



SIMPOSIO 1

"La Enseñanza Experimental en la Química Analítica Contemporánea: ¿Qué Enseñar y Cómo Hacerlo?"

Coordina: Dr. Alberto Rojas Hernández, UAM-Iztapalapa

"Química Analítica a microescala total.", Dr. Alejandro Baeza, Facultad de Química-UNAM

"Aplicación de conceptos de equilibrio químico en la separación de fármacos por medio de membranas líquidas emulsionadas." Dr. Mario Ávila Rodríguez, Universidad de Guanajuato

"Integración de las Tecnologías de la Información y la Comunicación (TIC) en la enseñanza experimental de la Química Analítica." Dr. Carlos Andrés Galán Vidal, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo (UAEH)

"De la teoría de la química analítica al laboratorio." Dr. Alberto Rojas Hernández, UAM-I

"LA ENSEÑANZA EXPERIMENTAL EN LA QUÍMICA ANALÍTICA CONTEMPORÁNEA: ¿QUÉ ENSEÑAR Y CÓMO HACERLO?"

Coordina: Dr. Alberto Rojas Hernández, UAM-Iztapalapa

"QUÍMICA ANALÍTICA A MICROESCALA TOTAL."

Dr. Alejandro Baeza, Facultad de Química-UNAM

SEMBLANZA

Fue formado en la Facultad de Química de la UNAM, en los niveles de licenciatura (Química), maestría (Química Analítica) y doctorado, siendo el primer alumno que recibió el título de Doctor en Química Analítica en esa institución. Desde 1986 ha generado un número importante de tesis de licenciatura y posgrado, proyectos de investigación básica y aplicada, trabajos en congresos publicaciones nacionales e internacionales así como material didáctico para la enseñanza teórica y práctica de la Química Analítica en todos sus cursos de licenciatura y en electroquímica analítica avanzada así como cursos nacionales e internacionales.

Actualmente es Profesor Titular de la Facultad de Química de la UNAM y está a cargo de los laboratorios anexos 3E y 3F de Química y Electroquímica Analítica, los cuales están dedicados a la investigación, la docencia y la difusión de la Química Analítica en general y a la electroquímica analítica en particular.

Recibió el Premio "Andrés Manuel del Río" por su labor en Docencia en el año de 2015.

RESUMEN

La investigación básica, la enseñanza experimental básica y la práctica profesional.

Al principio.

En efecto, a finales del siglo XIX y a principios del siglo XX los descubrimientos de la experimentación básica en física y química se incorporaban de manera natural a la docencia. Los sistemas químicos estudiados eran relativamente sencillos y conectados con problemáticas industriales, de salud o comerciales.

El desarrollo de la química experimental y por ende su enseñanza está relacionada directamente con el desarrollo de la instrumentación requerida en síntesis y en análisis químicos. A principios del siglo



XX la instrumentación, material de vidrio, balanzas, estufas, etc., se encontraba aún en una etapa clásica que obligaba a experimentar con cantidades grandes de materiales (gramos, litros). Los métodos de análisis y de síntesis pronto se consolidaron para satisfacer las demandas de síntesis de productos de consumo y su consiguiente control analítico para satisfacer las necesidades de una sociedad caracterizada por un vigorosa industrialización y producción masiva de insumo

La primera mitad del siglo.

Cerca del final de la primera mitad del siglo XX y alrededor del Proyecto Manhattan la utilización de equipo electrónico de medición y cálculo potencializa el desarrollo de la instrumentación química para la resolución de problemas químicos cada vez más complejos. A modo de ejemplo se menciona que en 1936 sale al mercado el primer pH-metro comercial y en 1952 el primer fotocolorímetro en el rango visible. Estos avances logran impactar en la enseñanza experimental. La simplicidad relativa de la instrumentación hace accesible su adquisición comercial de aparatos e instrumentos de medición para la enseñanza en pregrado. Sin embargo son equipos de construcción robusta grandes, a base de “bulbos”, que requieren manejo de muestras a nivel de macroescala.

La segunda mitad del siglo XX: comienza la separación.

El desarrollo del transistor en los años 50's generó un crecimiento exponencial de la captura y procesamiento de datos con las computadoras u ordenadores lo cual impactó en el rediseño y aplicaciones de la instrumentación analítica con la consiguiente elevación de costos y disminución en los tiempos de operación.

En esta época se suceden muchos cambios revolucionarios en los ámbitos sociales, políticos y económicos en el mundo. En el ámbito de la química hay una tendencia a superar las rígidas áreas de especialización gremial del trabajo químico creadas bajo los paradigmas de la revolución industrial de finales del siglo XIX: la química orgánica, inorgánica, biológica, etc. La revolución en las comunicaciones facilita el intercambio de ideas y hay una tendencia a una interacción intensa entre las diferentes especialidades de la química. En la extinta Unión Soviética y en los Estados Unidos llegó a hablarse de la “Tercera Química” refiriéndose a la investigación en la Química de Coordinación, moléculas de naturaleza orgánica-inorgánica con funcionalidad bioquímica.

En efecto, es en el campo de la investigación básica y aplicada que se aprovechan los avances tanto electrónicos como de interacción interdisciplinaria. La instrumentación analítica se vuelve más sofisticada, más sensible, selectiva y eficiente. Tales herramientas permiten profundizar en el estudio de la estructura de la materia y en el estudio de la reactividad química. La ciencias químicas, gracias a estos avances técnicos, permiten poner de manifiesto el impacto de la actividad humana en el medio ambiente y en los recursos naturales y humanos. Se pone de relieve la importancia de la Química Ambiental, de los nuevos materiales con la Química en Estado Sólido, las fuentes renovables de energía, etc. En todas estas áreas se pone de manifiesto la necesidad del *microescalamiento* y la *miniaturización* en el desarrollo de metodologías analíticas y sintéticas con nuevos materiales, lo cual ha llevado a la creación de campos multidisciplinarios de investigación hasta niveles inclusive *nanoatómicos*. No en balde la Química en Estado Sólido y la nanoquímica constituyen la Química del Siglo XXI.

Es en esta época en que se pone de manifiesto no solo en el ámbito académico sino para la población mundial la importancia de la química en el monitoreo ambiental, en el diagnóstico y monitoreo de la salud, la importancia de la síntesis de nuevos compuestos en nanofármacos, micropilas, microsensores en la detección y tratamiento microlocalizada de enfermedades, microtubos de carbón como aditivos, etc. En la práctica profesional actual de la química ya es común contar con espectrofotómetros miniaturizados que realizan un análisis espectral con 1 microlitro de muestra en decimas de segundo, la electroforesis capilar permitió acelerar el proceso de la secuenciación del genoma humano, existen sistemas analizadores



electroquímicos del tamaño de una cajetilla de cigarrillos que se comunican inalámbricamente en línea a distancia, cromatografos de líquidos mas pequeños que una caja de zapatos para análisis de trazas de contaminantes de aguas, etc. Análisis de proteómica y genómica con mezclas de reacción de 1 a 2 microlitros en serie. La reactividad química para la síntesis de nuevas especies se puede realizar a nivel atómico con “tijeras de luz” y seguirlas “visualmente” con microscopios de efecto túnel en tiempo real: La investigación y sus aplicaciones tecnológicas en la práctica profesional química van de la mano a niveles de micro y nanoescala en los países de economía central, también llamados del primer mundo.

Sin embargo en el ámbito docente y en particular en la práctica de la enseñanza experimental a nivel preuniversitario y de pregrado en los países periféricos como el nuestro la realidad es otra.

En efecto a partir de la década de los 70's las actividades humanas entran a una dinámica global de mercado que incluye a la investigación científica y a la práctica profesional de la química. Bajo este esquema las instituciones públicas de educación superior en los países periféricos como el nuestro quedan al margen.

Consecuentemente se consolida, por no decir se prolonga, la enseñanza experimental ortodoxa a nivel de macroescala en las aéreas formativas: química analítica, química orgánica, química inorgánica, fisicoquímica y química general con metodología e instrumentación típica de los años 60 's y anteriores, toda vez que el equipamiento de los laboratorios con materiales y equipos miniaturizados modernos se encuentran disponibles en el mercado a un costo inaccesible para los presupuestos universitarios destinados a la docencia a niveles preuniversitarios y de licenciatura. La docencia a nivel de posgrado queda supeditada a la investigación básica dentro de una dinámica de consumo globalizado y por tanto se aleja de la enseñanza experimental a niveles básicos.

Es en esta época en que desde Estados Unidos y Europa se permea la enseñanza a microescala a niveles básicos en la enseñanza de la Química General sin permear hacia las rígidas áreas formativas mencionadas arriba.

Solo muy recientemente se han empezado a formar grupos de investigación básica en la línea actual de la nanoquímica, la miniaturización y microescalamiento en Química Analítica, Sintética y Biotecnología. De la consolidación de estos grupos a su posible impacto en la enseñanza experimental en pregrado puede pasar mucho tiempo si es que las condiciones institucionales y económicas así como el desarrollo de un ambiente intelectual progresista lo permiten.

Química Analítica Microescala Total.

En 2000 se inicia una nueva línea de investigación original en el laboratorio de Química Analítica de Investigación y Enseñanza Experimental a cargo del profesor Alejandro Baeza con gran impacto en docencia e investigación aplicada: *Química Analítica a Microescala Total*. La originalidad y beneficios de esta nueva metodología ha sido adoptada por muchos colegas a su actividad docente individual o institucionalmente por medio de cursos nacionales y extranjeros al principio a través del Centro Mexicano de Química en Microescala y en programas de intercambio entre instituciones de educación superior. Se han generado diversas publicaciones docentes en revistas de educación y en la página electrónica de la Facultad de Química.

La *Química Analítica a Microescala Total* está basada en la utilización de aparatos e instrumentos de medición diseñados y construidos con materiales de fácil adquisición local: plástico, acrílico, pegamento, frascos pequeños, jeringas desechables, puntas de plástico desechables, minas de carbón, alambres cortos y delgados de cobre, acero inoxidable, plata, tungsteno para soldadura, algodón, resina epóxica, ventiladores de computadora, conexiones y circuitos usados en electricidad y electrónica, multímetros de bajo costo para medir voltaje, corriente y resistencia eléctrica, etc.



"APLICACIÓN DE CONCEPTOS DE EQUILIBRIO QUÍMICO EN LA SEPARACIÓN DE FÁRMACOS POR MEDIO DE MEMBRANAS LÍQUIDAS EMULSIONADAS."

Dr. Mario Ávila Rodríguez, Universidad de Guanajuato

SEMBLANZA

Recibió el título de Químico en la Universidad de Guanajuato, en tanto que recibió el Diploma de Estudio A Profundidad y el Doctorado en Química Analítica en la unidad de Paris VI de la Universidad “Pierre et Marie Curie”, en Francia.

Ha formado alumnos en los niveles de licenciatura, maestría y doctorado. Ha publicado artículos especializados en revistas nacionales e internacionales con estricto arbitraje.

Actualmente es Profesor Titular del Departamento de Química de la Universidad de Guanajuato y Responsable Técnico del Laboratorio Nacional de Caracterización de Propiedades Fisicoquímicas y Estructura Molecular, que está patrocinado por la Universidad de Guanajuato, la Universidad Autónoma de Aguascalientes y el CONACyT. Actualmente es miembro del Sistema Nacional de Investigadores, con el nombramiento de Investigador Nacional Nivel II.

RESUMEN

La aplicación de los conceptos de equilibrio químico, en particular en el uso de diagramas de zonas de predominio y de distribución de especies, permiten comprender la distribución de fármacos en sistemas emulsionados utilizados para su recuperación. En esta plática se aborda primeramente como construir de manera sencilla un diagrama lineal de zonas de predominio. Posteriormente se hablará de los conceptos básicos para la obtención de membranas líquidas emulsionadas y se mostrará un ejemplo de aplicación (en el caso de la recuperación de fármacos) tomando en cuenta los conceptos de equilibrio desarrollados previamente.

INTRODUCCIÓN

La Química Analítica es una disciplina que tiene un gran campo de aplicación que va desde el análisis químico, hasta el poder prever el comportamiento de un sistema químico y que puede ser utilizado en procesos de separación. En este trabajo se abordará la parte correspondiente a la aplicación de conceptos de equilibrio químico para poder determinar o entender aquello que sucede en la separación de una especie química. El equilibrio químico está basado en la Ley de Acción de Masas y de la cual se genera lo que se conoce como constante de equilibrio, la cual es una medida macroscópica del comportamiento a nivel atómico (afinidades) de las diferentes especies químicas presentes en un sistema dado. El conocimiento de la constante de equilibrio es fundamental en la metodología que se usa para prever si una reacción química puede llevarse a cabo y tiene una aplicación importante en el desarrollo de procesos de separación. Esta metodología implica la construcción de diagramas de lineales de zonas de predominio (y diagramas de reactividad) los cuales son fáciles de hacer, entender y explotar. En este trabajo se aplicarán diagramas lineales de zonas de predominio en el caso de la recuperación de ibuprofeno por medio de membranas líquidas emulsionadas, considerando la posibilidad de extracción de la especie de interés.

CONCEPTOS BÁSICOS

Construcción de los diagramas de zonas de predominio

Considerando la reacción:



En donde:

HIBP representa a la especie protonada (forma ácida) del ibuprofeno, e IBP⁻ es la especie desprotonada (forma básica) del ibuprofeno. La constante aparente de equilibrio de la reacción se puede representar de la siguiente manera:

$$K = \frac{[H^+][IBP^-]}{[HIBP]} = 10^{-4.9} \text{ mol/L}$$

Considerando que la partícula intercambiada es el ion H⁺. El diagrama lineal de zonas de predominio de las especies HIBP e IBP⁻, será:



A partir del diagrama se puede ver que la especie neutra HIBP se encuentra en mayor concentración cuando el pH es inferior a 4.9. Si en el proceso de separación la especie neutra es la que se recupera, entonces el pH más conveniente para tener una separación adecuada será por debajo de 4.9. En caso de que la extracción se realice por medio de un intercambio iónico, las condiciones de pH más adecuadas pueden ser arriba de 4.9.

Membranas Líquidas Emulsionadas

Las membranas líquidas emulsionadas están compuestas por una fase orgánica (fase de extracción) en las cuales gotas de una fase acuosa (fase de desextracción) se encuentran dispersas para formar una emulsión agua en aceite. La emulsión formada se pone en contacto con una solución acuosa en donde se encuentran la especie que se quiere extraer. Las características de la fase orgánica de extracción y de la fase acuosa de desextracción, permiten la extracción en la fase orgánica y la subsecuente desextracción en la fase acuosa interna contenida en la emulsión. Para formar la emulsión, además de las fases antes mencionadas, se requiere de un tensoactivo (lo que permite la formación y estabilidad de la emulsión) y en algunas ocasiones un acarreador. De manera general, el mecanismo de transferencia de masa implica la formación de una especie neutra (molecular o par de iones) para que pueda ser transferida a la fase orgánica, en tanto que para lograr la desextracción se requiere que la especie tenga una forma tal que su afinidad hacia la fase acuosa interna sea mayor que a la fase orgánica, lo cual se puede lograr en algunas ocasiones con un cambio de pH.

RESULTADOS

La primera parte del trabajo consistió en realizar un estudio de extracción líquido-líquido para determinar las condiciones más adecuadas para lograr la extracción del ibuprofeno. Los resultados muestran que el Parleam 4 y el NaOH son adecuados para ser utilizados como fase orgánica (extracción) y fase de desextracción. Posteriormente se determinaron las condiciones para la preparación de las membranas líquidas emulsionadas, evaluando parámetros como la velocidad de agitación, el tiempo de preparación, así como su composición y estabilidad, y la eficiencia en la recuperación del ibuprofeno. La composición de las membranas fue: como fase orgánica el Parleam 4, como tensoactivo el Abil EM 90, como acarreador la trioctilamina (TOA) y como fase acuosa interna el NaOH. Una rápida recuperación (menos de 5 minutos) del ibuprofeno (de una solución acuosa de pH 2) del orden del 99%, se logra cuando se utiliza Parleam 4 + TOA 0.1 % + Abil EM 90 al 5 % como fase orgánica, y NaOH 0.05 mol/L como fase acuosa interna.

CONCLUSIONES



El conocimiento de los conceptos de equilibrio químico permitió el trazado del diagrama de zonas de predominio lineal del ibuprofeno. A partir de dicho diagrama se determinaron las condiciones para realizar la extracción de la forma neutra del ibuprofeno a la fase orgánica, y posteriormente se determinaron las condiciones más adecuadas para lograr la recuperación del ibuprofeno por membranas líquidas emulsionadas, la cual fue del 99%.

"INTEGRACIÓN DE LAS TECNOLOGÍAS DE LA INFORMACIÓN Y LA COMUNICACIÓN (TIC) EN LA ENSEÑANZA EXPERIMENTAL DE LA QUÍMICA ANALÍTICA."

Dr. Carlos Andrés Galán Vidal, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo (UAEH)

SEMBLANZA

Es Químico Farmacéutico Biólogo y Maestro en Físicoquímica por la Facultad de Estudios Superiores-Cuautitlán de la UNAM, obteniendo sus títulos en 1990 y 1993 respectivamente. Por parte del Departamento de Química de la Universidad Autónoma de Barcelona obtuvo el grado de Doctor en Química (Química Analítica) en 1996. Después de laborar como profesor por horas en la Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán UNAM (1986-1997), actualmente se desempeña como Profesor Investigador Titular C de Tiempo Completo en el Área Académica de Química de la Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, plaza que ocupa desde 1997. Sus líneas de investigación son el desarrollo de sensores químicos y biosensores electroquímicos, fisicoquímica de soluciones y desarrollo de metodologías de análisis y métodos de separación. Ha graduado a 6 alumnos de doctorado, 5 de maestría y 11 de licenciatura. Ha sido responsable de Proyectos de Investigación financiados por el CONACyT, Comunidad Económica Europea y PROMEP. Ha publicado aproximadamente 60 artículos de investigación y docencia en revistas de circulación nacional e internacional indizadas y con arbitraje en los temas de su interés contando con más de 600 citas. Es árbitro de las revistas diversas internacionales y naciones, así como evaluador de proyectos CONACYT, PROMEP, etc.. Actualmente es miembro del Sistema Nacional de Investigadores con el nombramiento de Investigador Nacional Nivel I.

Pachuca, Hidalgo

RESUMEN

El acelerado desarrollo de nuevas metodologías de análisis, hoy más que nunca, constituye un reto extraordinario en la enseñanza experimental de la Química Analítica. Dicho desafío implica la incorporación permanente de nuevos conceptos y técnicas que hacen necesaria la renovación y actualización de la infraestructura física y humana de las instituciones de educación superior. Por si esto fuera poco, los cambios en la sociedad y en la educación hacen que el estudiante de química actual posea características diferentes a las que se presentaban en el pasado y en consecuencia la enseñanza en general, pero muy especialmente la experimental debe adaptarse con rapidez a fin de dotar a los futuros profesionistas de los conocimientos y destrezas que les permitan competir con éxito en un mundo globalizado.

La importancia y magnitud del desafío es extraordinaria por lo que se hace necesario reflexionar sobre las estrategias que debemos adoptar para afrontarlo, pero sobre todo se hace imprescindible incorporar herramientas pertinentes con nuestro contexto actual; entre ellas las TIC.

Las Tecnologías de la Información y la Comunicación (TIC) son todos aquellos recursos, herramientas y programas que se utilizan para compartir, administrar y procesar información mediante medios electrónicos como computadoras, teléfonos inteligentes, etc.

Existe una gran variedad de estrategias didácticas basadas en las TIC que se pueden implementar en la enseñanza experimental de la Química Analítica; entre ellas se pueden mencionar la simulación mediante hojas de cálculo o software especializado, foros de discusión y edición colaborativa de reportes (Google



Drive, Dropbox, etc.). Sin embargo, la batería de herramientas es más amplia y de gran utilidad en diversas etapas de la enseñanza experimental; así, es posible hacer investigaciones documentales previas a la práctica mediante los buscadores de internet, bibliotecas digitales, repositorios, marcadores sociales o wikis; asimismo, es posible acceder a videos tutoriales que ilustren algún experimento en forma previa a la sesión de laboratorio (Youtube, por ejemplo).

En el caso particular de la enseñanza experimental para favorecer un aprendizaje significativo, es importante que se establezca un vínculo claro para el alumno entre lo que se trata en el laboratorio y el contexto social en el que se desenvuelve. En este marco, el uso de las TIC resulta atractivo y benéfico para el estudiante; al mismo tiempo que es un instrumento de gran utilidad para dar un seguimiento ágil y eficiente del proceso de enseñanza aprendizaje.

La incorporación de las TIC para contribuir a mejorar la enseñanza experimental, requiere necesariamente de una planeación cuidadosa en la que de manera precisa y documental se planteen los objetivos y competencias que se pretenden alcanzar; así como la secuencia didáctica que se deberá llevar a cabo. Consecuentemente, es necesario realizar una reestructuración de los manuales tradicionales de laboratorio.

Entre otros elementos, los nuevos manuales de prácticas de laboratorio deberán incorporar diversos elementos como:

Preguntas guía: Elementos que sirven de motivación y dirigen la búsqueda de información, previa a la experimentación.

Instrucciones y procedimiento experimental a realizar: Estableciendo con claridad las actividades que se realizarán de manera individual o por equipo y cuales de ellas corresponden a la sesión de laboratorio y cuales son previas o posteriores a ésta.

Recursos necesarios: Instrumentación, materiales y reactivos; así como aquellos relacionados con la gestión de la información que se compartirá con los compañeros de equipo, grupo y con el profesor.

Evaluación: Incorporando las rúbricas, listas de cotejo o guías de observación en las que se declaren las ponderaciones y elementos que se evaluarán; así como el tipo de evaluación (auto, hetero o coevaluación)

Contar con más y mejores alternativas al impartir un curso experimental, es sin duda enriquecedor para el docente y sobre todo para el alumno. El estudiante actual cuenta con la familiaridad del uso de las TIC y por tanto su uso representa una manera atractiva y poderosa para favorecer el aprendizaje. En correspondencia con lo anteriormente expuesto, la UNESCO ha establecido como una de sus áreas de interés, el uso de las TIC en la adquisición de habilidades laborales y competencias prácticas. En esta participación en el seminario, se discutirán los retos de la incorporación de las TIC en la enseñanza experimental de la Química Analítica.



"DE LA TEORÍA DE LA QUÍMICA ANALÍTICA AL LABORATORIO."

Dr. Alberto Rojas Hernández, UAM-I

SEMBLANZA

Obtuvo el título de Químico en la FES-Cuautitlán, de la UNAM; el de Maestro en Ciencias (Química Analítica) en la Facultad de Química, de la UNAM; y el de Doctor en Ciencias en la División de CBI de la UAM-Iztapalapa. Su principal área de especialidad es la determinación de constantes de equilibrio en sistemas multicomponentes y multirreaccionantes por diferentes métodos, así como sus representaciones gráficas. Relacionados con ella ha dirigido proyectos de tesis de licenciatura y posgrado y publicado en diferentes revistas internacionales con estricto arbitraje.

Recibió el Premio "Andrés Manuel del Río" por su labor en Docencia en el año de 2011. Actualmente es miembro del Sistema Nacional de Investigadores, con el nombramiento de Investigador Nacional Nivel III.

RESUMEN

El Análisis Químico

Los problemas de análisis químico, cualitativo y cuantitativo, son múltiples y complejos. Y el reconocimiento de esto se dio muy pronto a partir del momento que se establece formalmente la Química, como una disciplina que pretende generar conocimiento científico. Sin embargo, en los siglos XVIII y XIX y al menos en la primera mitad del siglo XX, el conocimiento del análisis químico se mantuvo muy empírico, rescatándose en compendios que establecían las condiciones y compuestos requeridos para realizar los análisis químicos con una finalidad particular, pero en donde (al menos en apariencia) no parecía haber relaciones y principios generales predecir e interpretar el comportamiento de los mismos.

Kolthoff y Charlot, el desarrollo de la teoría de la Química Analítica

Hacia la segunda mitad del Siglo XX los trabajos de varios investigadores en Química Analítica fructificaron, incorporando teorías fisicoquímicas para dar fundamento a los análisis químicos cualitativo, cuantitativo y estructural, con lo que esta rama de la Química logró ponerse al nivel de otras, cuyos fundamentos fueron establecidos mucho tiempo antes, como la Química Orgánica, la Química Inorgánica, la Fisicoquímica y la Bioquímica.

De estos esfuerzos destacan notablemente el del Prof. Mauritz I. Kolthoff, en los Estados Unidos de América, y del Prof. Gaston Charlot, en Francia.

Ahora, la teoría de la Química Analítica abarca aspectos termodinámicos y cinéticos de la formación de diferentes especies o de la operación de diversos procesos químicos que se presentan en sistemas que se requiere caracterizar desde el punto de vista de su composición cualitativa o cuantitativa, o de su estructura y organización.

La sofisticación de las técnicas instrumentales y de los algoritmos matemáticos que "de modelado suave" con computadora

En los últimos treinta años del siglo XX, con el desarrollo acelerado de las computadoras y la tecnología, gran cantidad de métodos que utilizan técnicas instrumentales de alta tecnología y computadoras muy sofisticadas comenzó a dominar el "state of art" de la Química Analítica.

Esto ha llevado a cuestionar la utilidad de la enseñanza de la teoría de los métodos clásicos de la Química Analítica, sobre todo porque las necesidades de estandarización y validación del mundo moderno requiere cada vez más de los métodos con técnicas sofisticadas, además hay quien asegura que el "modelado suave" prácticamente no requiere conocimientos de química (y ni siquiera de otras ciencias como la física, la biología o las matemáticas) para desarrollar y optimizar métodos de análisis.



La enseñanza experimental en Química Analítica

Es cierto que la Química Analítica requiere desarrollar en los educandos las habilidades para elaborar experimentos, desde las operaciones básicas del laboratorio de Química Analítica (manejo de balanzas y material volumétrico, manejo de sustancias líquidas y sólidas, preparación de disoluciones acuosas y no acuosas, métodos gravimétricos y titulaciones volumétricas), pasando por el uso de algunos instrumentos sofisticados (como espectrofotómetro de barrido automático, espectrofotómetro de absorción y emisión atómicas, cromatógrafos de líquidos y de gases), para luego también desarrollar habilidades para el tratamiento de los datos, tanto desde los métodos estadísticos clásicos hasta los quimiométricos.

Sin embargo, si se desea trascender del nivel meramente técnico al profesional es indispensable tener una sólida formación en la teoría de la química analítica. Saber las justificaciones fisicoquímicas de las condiciones de operación de una técnica o método analítico en particular, así como los procesos que ocurren durante la elaboración de un método analítico. La teoría de la Química Analítica es la que permite diseñar experimentos que todavía no se han realizado, establecer condiciones de su operación, seleccionar los procesos y las técnicas que se presentarán en el método y hasta predecir, con sentido fisicoquímico, lo que ocurrirá al realizar el experimento, dando lugar a hipótesis bien justificadas. Cuando se tengan, por fin, los resultados experimentales del experimento así diseñado y predicho, se tendrán más herramientas para interpretar dichos resultados y, en su caso, hacer propuestas para la modificación de los métodos.

De la teoría de la Química Analítica al laboratorio.

Es por eso que nuestra propuesta siempre ha sido, comenzar con el planteamiento del problema desde la teoría para llegar al laboratorio a trabajar con espíritu crítico, haciendo uso pleno del método científico. Pero es indispensable que los cursos de Química Analítica sean teórico-prácticos, ya que este binomio permite que el laboratorio ilustre la teoría que se aprende, que la teoría permita plantear los problemas y elaborar hipótesis bien justificadas, para diseñar los experimentos que permitirán resolver los problemas, que la interacción de teoría y experiencia experimental permitan optimizar los experimentos para dar mejores respuestas a los problemas, y que los resultados experimentales puedan ser mejor interpretados a la luz de la teoría.

La separación de la teoría y el laboratorio en los cursos de Química Analítica sólo destruye la complicidad y simbiosis entre ambos recursos didácticos, que se benefician mutuamente en el proceso de enseñanza y aprendizaje: el laboratorio permite comprender mejor las abstracciones de la teoría, en tanto que la teoría permite que el laboratorio deje de ser meramente mecánico y memorístico.

SIMPOSIO 2

"Mecanismos de reacción en fotoquímica, fotocatalisis y catálisis de compuestos orgánicos."

Coordina: Dra. Elisa Leyva, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí

"Fotoquímica y Fotocatalisis. Aspectos básicos y mecanismos de reacción." Dra. Elisa Leyva, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí

"La fotoquímica como energía de activación alterna." Dra. Denisse Atenea De Loera Carrera, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí

"Ampliando el Entendimiento de los Procesos Fotocatalíticos Mediante el uso de Técnicas Electroquímicas Convencionales." Dr. Próspero Acevedo Peña, Facultad de Química, UNAM

"Metanación de CO₂ Catalizada por Complejos y Nanopartículas de Metales de Transición Soportados en Óxidos Metálicos: Evidencia Espectroscópica de Intermediarios de Reacción." Dr. Juan Carlos Fierro González, Departamento de Ingeniería Química, IT de Celaya

Simposio 2

MECANISMOS DE REACCIÓN EN FOTOQUÍMICA, FOTOCATÁLISIS Y CATÁLISIS DE COMPUESTOS ORGÁNICOS."

Coordina: Dra. Elisa Leyva, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí

Aunque la fotoquímica, la fotocatalisis y la catálisis son ampliamente usadas en muchos procesos de química, bioquímica y medicina, algunos procesos como síntesis por fotoquímica no han sido ampliamente estudiados. En contraste con los procesos térmicos tradicionales, en estos procesos sólo se requiere de luz y/o un catalizador y algunos se pueden realizar a bajas temperaturas o en estado sólido. Las mayoría de las reacciones fotoquímicas, fotocatalíticas y catalíticas generalmente proceden muy rápido ya que involucran la generación de intermediarios altamente reactivos. El estudio básico de los mecanismos de estas reacciones es un prerequisite básico para una futura aplicación de estas áreas en la síntesis de nuevos materiales y para el desarrollo de tecnologías modernas para bioquímica, medicina e Ingeniería Química. En este simposio se presenta una descripción de los aspectos básicos y la metodología utilizada en el estudio de los mecanismos de reacción.

"FOTOQUÍMICA Y FOTOCATÁLISIS. ASPECTOS BÁSICOS Y MECANISMOS DE REACCIÓN."

Dra. Elisa Leyva, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí

SEMBLANZA

- Profesor Investigador, Facultad de Ciencias Químicas de UASLP
 - 60 publicaciones en revistas internacionales
 - 1300 citas en revistas indexadas
- Nivel II del Sistema Nacional de Investigadores
- Líder del CA de Química de FCQ de UASLP
- Premio Nacional de Química por SQM en Docencia en 2012
- Premio Investigador Consolidado por UASLP en 2008
- Doctorado, Depto de Química, OSU (Matthew S. Platz)
- Postdoctorado, Depto de Química, OSU, 1996-2001



- Estancias de Investigación en : Depto de Química, UCLA, U de Tejas en Austin, UWO en Canadá.
- 9 tesis de Doctorado, 19 de maestría, 13 de licenciatura

RESUMEN

La fotoquímica es el área de la química que estudia las reacciones que proceden por medio de absorción de luz. Existen muchas reacciones en procesos naturales y de laboratorio que utilizan como fuente de energía la luz. En procesos industriales, se utiliza la fotocatalisis para degradar compuestos orgánicos presentes en aguas residuales, por medio de luz y un catalizador. En el laboratorio, se pueden generar intermediarios, o especies altamente reactivas, por medio de irradiación de diferentes compuestos orgánicos, como azidas aromáticas, que pueden ser utilizadas para marcar biomoléculas. Uno de los experimentos bioquímicos más utilizados en biología es el reconocimiento específico de un ligando y un receptor. El marcado por fotoafinidad es una técnica capaz de proporcionar el etiquetado directo de una enzima o proteína por medio de un enlace covalente entre un ligando y un receptor específico.

En esta conferencia se presentarán las metodologías para estudiar mecanismos en fotoquímica y fotocatalisis.

"LA FOTOQUÍMICA COMO ENERGÍA DE ACTIVACIÓN ALTERNA."

Dra. Denisse Atenea De Loera Carrera, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí

SEMBLANZA

- Profesor Investigador, Facultad de Ciencias Químicas de UASLP
 - 8 publicaciones en revistas internacionales
- >Nivel I del Sistema Nacional de Investigadores
- Reconocimiento Perfil deseable PRODEP (2015-2018)
- Miembro del CA de Química de FCQ de UASLP
- Doctorado, FCQ de Química de UASLP (Dra. Elisa Leyva Ramos)
- Estancia de Investigación en Depto de Química, UWO, Canadá en 2006
- Postdoctorado, Depto de Química de UCLA (Dr. Miguel A. García-Garibay)
- Postdoctorado, FCQ de Química de UASLP (Dra. Elisa Leyva Ramos)
- 2 tesis de maestría y 1 tesis de licenciatura

RESUMEN

En los últimos años se le está dando mucho interés al cuidado del medio ambiente, y el campo de la química orgánica no se queda atrás. En los 90s surgió la Química Verde con la colaboración de gobierno, industria y academia de los Estados Unidos. El propósito de esta química es prevenir en lugar de remediar la contaminación en la generación de procesos químicos.

Para lograr la aplicación de la Química Verde en la síntesis orgánica se ha recurrido al uso de técnicas de microescala, reacciones de multicomponentes, se está haciendo uso de medios alternos de reacción, así como energías alternativas de activación como microondas, infrarrojo, ultrasonido y triboquímica.

El uso de la luz ultravioleta (fotoquímica) como energía de activación no ha sido considerada debido a que al ser de mayor energía en comparación con las técnicas utilizadas actualmente se tiene el temor de que genere mezcla de productos, ya que los mecanismos de reacción involucrados en una reacción fotoquímica son principalmente radicalarios, lo que hace pensar en reacciones en cadena y mezcla de productos. En esta



ponencia les voy a presentar algunos ejemplos del uso de la fotoquímica como una energía de activación alterna en síntesis orgánica.

"AMPLIANDO EL ENTENDIMIENTO DE LOS PROCESOS FOTOCATALÍTICOS MEDIANTE EL USO DE TÉCNICAS ELECTROQUÍMICAS CONVENCIONALES."

Dr. Próspero Acevedo Peña, Facultad de Química, UNAM

SEMBLANZA

- Postdoctorado, Facultad de Química, UNAM
 - 21 publicaciones en revistas internacionales
- Nivel I de Sistema Nacional de Investigadores
- Doctorado en Ciencias Químicas, UAM
- Postdoctorado, UNAM (2013-2015)
- Arbitro en revistas: *Electrochimica Acta*, *Journal of Physical Chemistry*, and *Journal of Electrochemistry Society*.
- 1 tesis de maestría y 3 tesis de licenciatura

RESUMEN

La fotocatalisis es una alternativa ambientalmente amigable para descontaminar agua y aire, producir moléculas que permitan el almacenamiento de energía tales como: H₂ a partir de agua o, hidrocarburos a partir de la reducción de CO₂; incluso, como una alternativa para sintetizar diferentes compuestos. Debido a que la fotocatalisis es un proceso químico que involucra la transferencia de portadores de carga, generados por la absorción de fotones, entre un material sólido (semiconductor) y una especie en disolución; el empleo de técnicas electroquímicas para la caracterización de los semiconductores, así como la evaluación del impacto de diferentes especies redox involucradas en el proceso fotocatalítico, resulta en una estrategia cada vez más popular para la obtención de una mayor entendimiento de los procesos fotocatalíticos, así como del impacto de la modificaciones hechas al fotocatalizador.

En la presente ponencia se expondrán dos casos en los que, mediante técnicas electroquímicas convencionales, se ha obtenido mayor información acerca de: *i*) El impacto que tiene la modificación de materiales compuestos ZrO₂-TiO₂ con CuO, en la reducción fotocatalítica de agua para la producción de H₂, y *ii*) el impacto de las especies presentes en la disolución, sobre el proceso de reducción fotocatalítica de 4-Nitrofenol empleando compuestos ZrO₂-TiO₂.

"METANACIÓN DE CO₂ CATALIZADA POR COMPLEJOS Y NANOPARTÍCULAS DE METALES DE TRANSICIÓN SOPORTADOS EN ÓXIDOS METÁLICOS: EVIDENCIA ESPECTROSCÓPICA DE INTERMEDIARIOS DE REACCIÓN."

Dr. Juan Carlos Fierro González, Departamento de Ingeniería Química, IT de Celaya

SEMBLANZA

- Profesor Investigador Departamento de Ingeniería Química, IT de Celaya
- >30 publicaciones en revistas internacionales
- >1200 citas en revistas indexadas
- Nivel II del Sistema Nacional de Investigadores
- Líder del cuerpo académico de Química de Nanomateriales de IT de Celaya
- Presidente de Asociación Mexicana de usuarios de Sincrotrón AMEDUS
- 14 tesis de maestría y 2 tesis de doctorado

- Zuhair Munir Award for Best Postdoctoral dissertation 2006 in UC Davis
- Representante mexicano para el Premio de Joven Investigador de la Federación Iberoamericana de Sociedades de Catálisis 2014 y 2016.

RESUMEN

Existe una gran motivación por encontrar estrategias que eviten el aumento en la concentración de CO₂ en la atmósfera. En general, se ha realizado investigación en tres direcciones: (a) mejoramiento de procesos de combustión, (b) captura de CO₂ y (c) uso de CO₂ como reactivo para producir otros compuestos químicos. La dificultad de utilizar el CO₂ como reactivo químico radica en su alta estabilidad, por lo que numerosos catalizadores han sido probados con la intención de activar los enlaces del CO₂ y transformarlo. Entre las distintas reacciones que se han estudiado, la metanación de CO₂ (i.e., CO₂ + H₂ → CH₄ + H₂O) tiene la ventaja de involucrar moléculas estructuralmente simples, lo que podría implicar que sus intermediarios serían también simples y podrían ser caracterizados espectroscópicamente. La comprensión del mecanismo de metanación de CO₂ ayudaría a entender la naturaleza de los sitios activos en catalizadores sólidos que participan en reacciones de hidrogenación de CO₂.

En la literatura hay un debate sobre el modo en que ocurre la metanación de CO₂ catalizada por metales soportados. Específicamente, aún no se ha establecido si la reacción procede por un mecanismo que implica la formación de carbonilos de los metales soportados o si el CO₂ se activa en el soporte en forma de carbonatos y bicarbonatos que son luego hidrogenados. Parte del debate tiene su origen en la complejidad estructural de los catalizadores que comúnmente se estudian, pues estos consisten de partículas del metal (e.g., Ni, Ru, Rh, Pt) de varios tamaños y formas distribuidas de manera prácticamente aleatoria sobre superficies policristalinas de óxidos metálicos. Con la intención de simplificar la estructura de los catalizadores y estudiar a detalle su funcionamiento, en nuestro grupo hemos preparado catalizadores de complejos organometálicos de Ru y Pt soportados en óxidos metálicos y hemos investigado el modo en que cambian sus estructuras al tiempo que funcionan como catalizadores mediante el uso de técnicas espectroscópicas. Nuestros resultados enfatizan la importancia de la simplicidad y uniformidad de los catalizadores sólidos en la interpretación de datos espectroscópicos sobre su estructura.

SIMPOSIO 3

3. "Protección solar una visión Químico- Cosmética.", Coordina: Dr. David Quintanar, Presidente de la Sociedad de Químicos Cosmetólogos de México A.C.- SQCM

"¿Protección solar, como se encuentra el mercado?" Q.F.B. Ana María Xóchitl Calderón Duarte. Asesor, consultor independiente en cosmética avanzada.

"Conceptos y principios de acción de los protectores solares." Dr. Néstor Mendoza Muñoz. Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad de Colima.

"Efectos químicos en la piel por exposición a radiaciones." Dr. Gerardo Leyva Gómez. Investigador en Ciencias Médicas "C" del Laboratorio de Tejido Conjuntivo en el Instituto Nacional de Rehabilitación, Secretaría de Salud.

"La nanotecnología en la protección solar." Dr. David Quintanar Guerrero. Presidente de la Sociedad de Químicos Cosmetólogos de México, AC.

Simposio 3

"PROTECCIÓN SOLAR UNA VISIÓN QUÍMICO- COSMÉTICA."

Coordina: Dr. David Quintanar, Presidente de la Sociedad de Químicos Cosmetólogos de México A.C.- SQCM

RESUMEN GENERAL

En la actualidad son bien conocidos los daños patológicos que puede producir la radiación solar (e. g. cáncer de piel, quemaduras, arrugas y envejecimiento prematuro) en particular las ondas electromagnéticas UVB y UVA. Si bien los protectores solares no evitan completamente los daños, la utilización de los mismos logra reducirla considerablemente. Dependiendo de las sustancias que contengan estos productos pueden ser clasificados como filtros o bloqueadores, los primeros son compuestos orgánicos que absorben la radiación ultravioleta por su estructura química generalmente basada en entidades químicas con dobles ligaduras conjugadas y/o grupos cromóforos capaces de captar la energía incidente y emitirla como radiación térmica, inocua para la piel. Sustancias orgánicas que protegen contra radiación UVB incluyen salicilatos, cinamatos y ácido para-aminobenzóico (PABA) y sus esterés. Filtros con protección UVA incluyen avobenzonas y benzofenonas. Los segundos son materiales inorgánicos que funcionan como "espejos reflectores" o pantallas que reflejan, dispersan y/o bloquean la radiación UV impidiendo que la radiación llegue a la piel. En general son óxidos metálicos tales como TiO_2 y ZnO con talla micro y nanométrica. Las últimas tres décadas han estado marcadas por una extensa investigación químico-cosmética para el desarrollo de nuevas moléculas con nuevas y mejores propiedades como filtros o bloqueadores, el análisis y caracterización de sustancias de origen vegetal con propiedades antisolares, el desarrollo de novedosas formulaciones para mejorar su estancia en piel y prolongar sus efectos, la implementación de nuevas tecnologías para eficientar efectos, manejo y aplicación de productos antisolares, la armonización de aspectos regulatorios, etc. En el presente simposium se analizan y discuten cuatro aspectos fundamentales para el desarrollo químico-cosmético de sistemas antisolares:

- a) Efectos químicos en la piel por exposiciones a radiaciones. Se revisan los tipos de radiaciones y su relación con la piel destacándose los aspectos químicos y bioquímicos relacionados y sus implicaciones con el daño fisiológico y cosmético.
- b) Conceptos y principios de los protectores solares. Se analiza la funcionalidad de las diferentes familias de filtros y pantallas solares basados en su análisis químico estructural. Se relaciona dicha



funcionalidad a su factor de protección solar (FPS) y propiedades fisicoquímicas estableciéndose las bases para su formulación y tipo de producto ideal.

- c) La nanotecnología en la protección solar. Se discuten las implicaciones que la nanotecnología, como campo emergente, está teniendo sobre la formulación, funcionalidad y desarrollo de productos antisolares destacándose las ventajas y desventajas de estos materiales.

Regulación de filtros solares. Se analizan las normatividades que rigen a las moléculas y productos antisolares en diferentes países y en particular el estado del arte nacional

"¿PROTECCIÓN SOLAR, COMO SE ENCUENTRA EL MERCADO?"

Q.F.B. Ana María Xóchitl Calderón Duarte. Asesor, consultor independiente en cosmética avanzada.

SEMBLANZA

Q.F.B. por la UNAM Facultad de estudios Superiores Cuautitlán. Diplomado en Farmacología Clínica, Facultad de Medicina. 11 años de experiencia en la industria farmacéutica y cosmética en áreas desde aseguramiento de Calidad, Control de Calidad, Desarrollo e Investigación y Asuntos regulatorios. Ha presentado diversos seminarios, congresos, cursos de capacitación; en temas como: paneles entrenados, eficacia cosmética, estudios a nivel laboratorio, calidad, etc. ; con sitio en México, Argentina, Colombia, Francia, Inglaterra, Suiza. Actualmente se desempeña como asesor, consultor independiente en cosmética avanzada, miembro activo de mesa directiva en la SQCM y comité ISO en CANIPEC.

RESUMEN

Regulación de filtros solares. Una visión general del panorama actual en materia de regulación en filtros solares, en la actualidad la regulación se encuentra de manera estructurada en el viejo mundo países europeos van a la vanguardia en el establecimiento de normatividad aplicable en productos de protección solar, esta "tendencia en regulación" migra por el sur del continente hacia América siendo países sudamericanos los primeros en tomar la cabeza en esta materia, países como: Brasil, Argentina, Colombia, entre otros ... y México? . Estados Unidos en nuestra otra frontera con sus propias leyes también nos lleva algunos años en este tema la pregunta es de nuevo y México?

"CONCEPTOS Y PRINCIPIOS DE ACCIÓN DE LOS PROTECTORES SOLARES."

Dr. Néstor Mendoza Muñoz. Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad de Colima.

SEMBLANZA

Es Profesor e investigador de Tiempo Completo en la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad de Colima. Estudió la carrera de Químico Farmacéutico Biólogo en la Universidad Nacional Autónoma de México misma institución donde cursó sus estudios de Maestría y Doctorado en Ciencias Químicas. Desde Febrero de 2013 se desempeña como Coordinador Científico de la Sociedad de Químicos Cosmetólogos de México, A.C., donde diseña y coordina actividades técnico-científicas para el gremio cosmético. Sus líneas de investigación principales son: Preparación y evaluación de sistemas coloidales con aplicación en el área farmacéutica, cosmética e imaginológica; y Diseño de sistemas de liberación controlada de moléculas de interés farmacéutico y cosmeceútico.

RESUMEN



En esta conferencia se abordará la conceptualización de lo que son y cómo actúan los protectores solares. Se hablará de manera general de la química de los filtros solares químicos, de su mecanismo de acción y de las tendencias en la búsqueda de nuevas moléculas más eficaces y seguras. De igual manera, se echará un vistazo a los principios fisicoquímicos que rigen el accionar de las pantallas solares físicas, uno de los aspectos a señalar es la importancia del tamaño de partícula en la acción de este tipo de protectores solares.

"EFECTOS QUÍMICOS EN LA PIEL POR EXPOSICIÓN A RADIACIONES."

Dr. Gerardo Leyva Gómez. Investigador en Ciencias Médicas "C" del Laboratorio de Tejido Conjuntivo en el Instituto Nacional de Rehabilitación, Secretaría de Salud.

SEMBLANZA

Miembro del Sistema Nacional de Investigadores Nivel I e Investigador en Ciencias Médicas "C" del Laboratorio de Tejido Conjuntivo en el Instituto Nacional de Rehabilitación, Secretaría de Salud. Llevó a cabo sus estudios de Licenciatura de Químico Farmacéutico Biólogo en la UNAM. Posteriormente cursó la Maestría y Doctorado en el Programa de Ciencias Químicas de la UNAM. Realizó una estancia de investigación en el laboratorio de Tecnología Farmacéutica en la Universidad de Ginebra, Suiza. Su trabajo de investigación está enfocado en el análisis biomecánico de la piel y sus secuelas, desarrollo de nuevos medicamentos dérmicos, modelos de permeación de fármacos *in vitro*, síntesis y caracterización de biopolímeros con actividad moduladora de procesos inflamatorios en pacientes con quemaduras y nuevos medicamentos nanoparticulados para padecimientos emergentes.

RESUMEN

Es de amplio conocimiento que la radiación solar produce diversos cambios en la piel, y la mayor parte del trabajo de investigación en el desarrollo de nuevos productos para su cuidado ha sido enfocado en aliviar o disminuir los efectos de la radiación UV. Sin embargo, es importante tomar en cuenta los efectos químicos y biológicos producidos por la exposición a otro tipo de radiación que comprende el espectro electromagnético, incluso, tratándose de radiaciones no ionizantes. Las radiaciones ionizantes pueden tener efectos directos a corto y largo plazo de acuerdo a la dosis de incidencia. Adicionalmente, los mecanismos de afectación por radiación UV suelen comprender una incidencia directa sobre la piel y una secuencia de reacciones que se desencadenan a nivel químico y biológico, es de notar que hay un incremento de zonas urbanas con altos índices de contaminantes que representa una alta exposición a sustancias xenobióticas, y que generalmente potenciarán sus efectos dañinos en combinación con la radiación UV sobre la piel. Por tal motivo en la presentación de este tema de interés general se abordarán los efectos químicos que tienen diversos tipos de radiación sobre la piel y su combinación con agentes xenobióticos con el objetivo de ampliar el panorama sobre las afectaciones por radiación en la piel.

"LA NANOTECNOLOGÍA EN LA PROTECCIÓN SOLAR."

Dr. David Quintanar Guerrero. Presidente de la Sociedad de Químicos Cosmetólogos de México, AC.

SEMBLANZA

QFB y doctorado con honores por UNIGE, Suiza y Lyon, Francia (repatriado en 1998). Profesor Titular C (PRIDE D y SNI III). Investigador invitado por Novartis (2005). Galardonado con los premios: Estatal de Ciencia y Tecnología (COMECYT) 2008, CANIFARMA veterinario 2011 y humano 2013 y 2015, ALEJANDRIA 2012, PROFOPI, entre otros. Tiene 310 congresos, 117 artículos en revistas indizadas de alto impacto (>1700 referencias, h-index = 22), 4 capítulos de libros y 16 patentes. Ha dirigido 75 tesis licenciatura, 14 maestría y 10 doctorado. Desde el 2016 es el presidente de la Sociedad de Químicos Cosmetólogos de México, AC.



RESUMEN

El mercado de protección solar está en constante cambio gracias al avance de diversas áreas tecnológicas. Una de las tecnologías emergentes con mayor impacto para diferentes disciplinas es la nanotecnología. La cual se define como el área del conocimiento que trata acerca del control de la materia en dimensiones cercanas al intervalo de 1 a 100 nanómetros en tamaño. La nanotecnología comprende la representación gráfica, la medición, el modelado y la manipulación de la materia en una escala nanométrica. En la presente plática se revisan desde los conceptos fundamentales de la nanotecnología hasta los diversos materiales y sistemas que están teniendo impacto sobre el desarrollo de productos cosméticos destinados a la protección solar, sus ventajas y desventajas e implicaciones futuras.

Existen varias nanoestructuras con diferentes implicaciones tecnológicas para diferentes industrias tales como nanoemulsiones, nanopartículas, liposomas, micelas, nanotubos de carbono, dendrímeros, *quantum dots*, nanocristales, etc. Sin duda las nanoemulsiones y las nanopartículas de diferentes naturalezas químicas (e. g. lípidos, polímeros y metales) son las dispersiones que mayor impacto están teniendo en la industria cosmética y en particular en el desarrollo de productos para protección solar. Las nanoemulsiones son dispersiones líquido-líquido en general aceite/agua donde los glóbulos son disminuidos a tamaño submicrónico por métodos físicos de dispersión a alta energía. Las nanopartículas son sistemas coloidales sólidos, generalmente formados de materiales macromoleculares (biodegradables o no), lípidos o materiales inorgánicos, en la que una sustancia activa (e. g. filtro solar) puede ser incorporada por absorción o unida químicamente o bien el mismo material solo puede manifestar funcionalidad diferente por su talla submicrónica. Dependiendo de su arquitectura las nanopartículas pueden ser clasificadas en nanocápsulas donde un diminuto glóbulo oleoso es envuelto por una fina membrana y las nanoesferas que son estructuras matriciales sólidas completas siendo la talla de estos sistemas entre 50 y 600 nm.

Recientemente, nuestro grupo comparó el nivel de penetración dérmica por la técnica de remoción de estrato corneo (*tape stripping*) de octilmetoxicinamato, uno de los 17 filtros solares aceptados para formulaciones cosméticas, con tres formulaciones, una emulsión convencional de talla de glóbulo de 3 μm , una en nanoemulsión elaborada por dispersión rotor estator con talla de glóbulo menor a 500 nm, y nanocápsulas de talla menor a 500 nm producidas por el método de emulsificación por difusión, los resultados mostraron una penetración y estancia en piel del filtro solar mayor con las formulaciones nanométricas que la convencional. La mejor penetrabilidad la tuvo la nanoemulsión seguida de las nanocápsulas y por último la emulsión, estos resultados han sido consistentes con otras investigaciones similares y confirman una penetración dependiente de la talla de partícula y por ende del valor de la talla submicrónica.

La nanotecnología es un tópico primario para ingredientes inorgánicos utilizados como pantallas solares en particular para el óxido de zinc y dióxido de titanio los cuales tienen propiedades químicas, mecánicas y ópticas substancialmente diferentes a sus polvos micrométricos los cuales presentan pobre textura y desfavorable apariencia cosmética. Gracias a los avances en las operaciones de molienda por micronización es posible obtener estos óxidos en talla nanométrica (≤ 100 nm). Tanto el ZnO como el TiO₂ nanoparticulados conservan sus propiedades reflectoras, difractoras, dispersoras y bloqueadoras pero no producen el desagradable blanqueamiento o efecto cosmético de piel de “payaso” ya que al ser aplicados sobre la piel forman fácilmente una delgada capa transparente con mejores propiedades fotoprotectoras. A pesar de las ventajas nanotecnológicas de estos compuestos inorgánicos un constante debate sobre ellos es su potencial efecto adverso. En este sentido diversas investigaciones han mostrado que estos materiales en talla nanométrica no son capaces de penetrar piel porcina y humana intacta y aunque pueden ser retenidas, en particular tallas menores a 200 nm, en folículo piloso son rápidamente eliminadas por el flujo de sebo y eliminadas en ciclos normales de descamación o lavado. Es importante señalar que no hay evidencia concreta de geno- o citotoxicidad o efectos inmunogénicos en queratinocitos viables y aunque estudios en piel afectada por radiación son necesarios, todo parece indicar que su uso será inocuo considerando que ya han sido utilizados en esta talla al haber sido micronizados. La única excepción para el uso de ZnO o TiO₂

nanoparticulados es en productos en aerosol ya que en este caso si hay evidencia de severos efectos en pulmones por inhalación.

Las nanopartículas lipídicas sólidas se diferencian de las nanoemulsiones por estar formadas con lípidos de baja toxicidad que son sólidos a temperatura ambiente. Estas dispersiones han demostrado ser excelentes acarreadores para filtros solares en la piel. Diversas investigaciones han demostrado que nanopartículas lipídicas sólidas cargadas con diversos filtros solares incrementan su efecto protector a la radiación UV al ser comparadas con emulsiones o/w. Se ha demostrado que las nanopartículas lipídicas sólidas son capaces de formar una película semioclusiva con liberación controlada de los filtros solares lo que optimiza su tiempo de exposición a piel y disminuye su lavado. Un atractivo adicional con estas nanopartículas es la posibilidad de producirlas a nivel industrial por procesos de homogenización a alta presión y en general, los ingredientes involucrados en su preparación son compatibles con la mayoría de las formulaciones y son materiales generalmente reconocidos como seguros (GRAS).

Bibliografía.

1. Andreassi, M. Sunscreens and photoprotection. *Expert Rev. Dermatol.* 6 (2011) 433-435.
2. Nasir, A., Wang, S., Friedman, A. The emerging role of nanotechnology in sunscreens: an update. *Expert Rev. Dermatol.* 6 (2011) 437-439.
3. Quintanar-Guerrero D., Allémann E., Fessi H., Doelker E., Preparation techniques and mechanisms of formation of biodegradable nanoparticles from preformed polymers, *Drug Dev. Ind. Pharm.* **24** (1998) 1113-1128.
4. Quintanar-Guerrero D., Allémann E., Doelker E., Fessi H., Preparation and characterization of nanocapsules from preformed polymers by a new process based on emulsification-diffusion technique, *Pharm. Res.* **15** (1998) 1056-1062.
5. Olvera-Martínez B.I., Cázares-Delgadillo J., Calderilla-Fajardo S.B., Villalobos-García R., Ganem-Quintanar A., Quintanar-Guerrero D., Preparation of polymeric nanocapsules containing octyl methoxycinnamate by the emulsification-diffusion technique: Penetration across the stratum corneum, *Int. J. Pharm.* **94** (2005) 1552-1559.
6. Quintanar-Guerrero D., Tamayo-Esquivel D., Ganem-Quintanar A., Allémann E., Doelker E., Adaptation and optimization of the emulsification-diffusion technique to prepare lipidic nanospheres, *Eur. J. Pharm. Sci.* **26** (2005) 211-218.
7. Zaida Urbán-Morlán, Susana E. Mendoza-Elvira, Ricardo S. Hernández-Cerón, Sergio Alcalá-Alcalá, Humberto Ramírez-Mendoza, Abel Ciprián Carrasco, Elizabeth Piñón-Segundo, David Quintanar-Guerrero. Preparation of ethyl cellulose nanoparticles by solvent-displacement using the conventional method and a recirculation system. *Journal of the Mexican Chemical Society*, **59** (2015) 173-180.



SIMPOSIO 4

4. "Fuerzas Intermoleculares en la Educación Química.", Coordina: Dr. Adolfo Obaya, FES-Cuautitlán, UNAM

"Fuerzas Intermoleculares: Una Revisión de su Enseñanza y Aprendizaje." Dra. Lydia Raquel Galagovsky, Centro de Formación e Investigación en Enseñanza de las Ciencias, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales Universidad de Buenos Aires, Argentina

"La importancia de involucrar a los estudiantes en la construcción de modelos." Dr. Vicente Talanquer, Department of Chemistry and Biochemistry, University of Arizona. Tucson, AZ

"La importancia del modelo de óxido reducción en la Educación Química." Dra. Yolanda Marina Vargas Rodríguez y Q.F.B. Jacqueline Suarez Piña. FES-Cuautitlán, UNAM

"El ciclo del azufre en educación química y su importancia en la biotecnología ambiental." Dra. Claudia Guerrero Barajas. Unidad Profesional Interdisciplinaria de Biotecnología (UPIBI) Instituto Politécnico Nacional.

Simposio 4

"FUERZAS INTERMOLECULARES EN LA EDUCACIÓN QUÍMICA.",

Coordina: Dr. Adolfo Obaya, FES-Cuautitlán, UNAM

RESUMEN GENERAL

Las reformas educativas resaltan la importancia de generar ambientes educativos en donde los estudiantes tengan la oportunidad para involucrarse en diversas prácticas científicas. En el desarrollo de este simposio se discutirá el impacto de las fuerzas intermoleculares en la comprensión y motivación de los estudiantes. Las fuerzas intermoleculares son la causa de la mayoría de las propiedades físicas y químicas de la materia. Un conocimiento de dichas fuerzas se puede obtener de algunas observaciones generales. Un primer acercamiento en la Educación Química son los dibujos químicos para representar las fuerzas intermoleculares. Esto nos lleva a una reflexión didáctica a partir de datos de investigación educativa sobre el concepto de "modelo". Se espera que los estudiantes se involucren de manera activa en la elaboración, evaluación, y revisión de modelos con el fin de construir sus conocimientos sobre las fuerzas intermoleculares de la materia. Se discutirán estrategias para incorporar la práctica científica de modelación como eje central en el trabajo en el aula. En la corrosión de metales, oxidación de vegetales, combustión de papel o de alcohol etílico, se presentan cambios perceptibles a nivel macroscópico. A partir de estas observaciones los alumnos establecen una representación simbólica que involucra símbolos químicos, dibujos, y expresiones matemáticas utilizadas para representar situaciones químicas. Para conectar el nivel macroscópico con el nivel simbólico, se utiliza el nivel nanoscópico o submicroscópico, a partir de modelos donde el estudiante concentra su atención en los elementos químicos, en el peso, el número de oxidación y la estequiometría. El azufre es el décimo elemento más abundante en la corteza terrestre. Es un elemento esencial en los organismos vivos que comprende aproximadamente el 1% en base seca de la composición de la célula. En el modelo del ciclo del azufre las fuerzas intermoleculares tienen gran relevancia e impacto en el medio ambiente ya que incluyen la formación de la lluvia ácida, los lixiviados ácidos de minas y la corrosión de metales y concreto.

"FUERZAS INTERMOLECULARES: UNA REVISIÓN DE SU ENSEÑANZA Y APRENDIZAJE."



Dra. Lydia Raquel Galagovsky, Centro de Formación e Investigación en Enseñanza de las Ciencias, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales Universidad de Buenos Aires, Argentina

KEY WORDS

Educación Química; Lenguajes Expertos; Nivel Submicroscópico; Fuerzas Intermoleculares

RESUMEN

El primer objetivo es presentar datos que revelan la multiplicidad de códigos que se utilizan en dibujos químicos para representar las Fuerzas Intermoleculares.

El segundo objetivo es presentar una reflexión didáctica acerca del uso del término “modelo”, proveniente de datos de investigación educativa con docentes de química.

"LA IMPORTANCIA DE INVOLUCRAR A LOS ESTUDIANTES EN LA CONSTRUCCIÓN DE MODELOS."

Dr. Vicente Talanquer, Department of Chemistry and Biochemistry, University of Arizona. Tucson, AZ

RESUMEN

Las reformas educativas en la enseñanza de las ciencias en años recientes recalcan la importancia de crear ambientes educativos en las que los estudiantes tienen múltiples oportunidades para involucrarse en diversas prácticas científicas. Entre estas prácticas se destaca la construcción de modelos mecanísticos que ayuda a describir, explicar y predecir las propiedades y el comportamiento de sistemas de interés. Se espera que los estudiantes reconozcan y comprendan que la modelación de sistemas es una tarea central en distintas ciencias e ingenierías, y que se involucren de manera activa en la elaboración, evaluación y revisión de modelos con el fin de construir sus conocimientos. En esta contribución se discutirán las estrategias que estamos siguiendo en nuestros cursos introductorios de química a nivel universitario para incorporar la práctica científica de modelación como eje central en el trabajo en el aula. Adicionalmente discutiremos el impacto de este trabajo en la comprensión y motivación de los estudiantes.

"LA IMPORTANCIA DEL MODELO DE ÓXIDO REDUCCIÓN EN LA EDUCACIÓN QUÍMICA."

Dra. Yolanda Marina Vargas Rodríguez y Q.F.B. Jacqueline Suarez Piña. FES-Cuautitlán, UNAM

RESUMEN

Por definición una reacción química es un proceso en el cual partiendo de unas sustancias llamadas reactivos, se obtienen nuevas sustancias llamadas productos. En la enseñanza y aprendizaje de una reacción química, es importante que el alumno comprenda que las nuevas sustancias formadas son diferentes a las de origen, tanto en sus propiedades físicas como en las químicas. En particular, en las reacciones de óxido reducción (redox), por ejemplo la corrosión de metales, oxidación de vegetales (plátano, papa, manzana y aguacate) y combustión de papel o de alcohol etílico, se presentan cambios perceptibles a nivel macroscópico (de color, de fase, etcétera). A partir de estas observaciones regularmente se “enseña” a los alumnos las reacciones redox a nivel simbólico. La representación simbólica involucra símbolos químicos, dibujos y expresiones matemáticas utilizadas para representar situaciones químicas. Los estudiantes en general, memorizan, repiten las ecuaciones químicas, y resuelven “problemas” de una manera algorítmica. Como resultado, se reporta en la literatura que los estudiantes en muchas ocasiones adquieren conceptos



erróneos acerca de las definiciones redox, de las características de las ecuaciones químicas, y de la aplicación de los números de oxidación. Entonces con el objetivo de que el alumno comprenda conceptualmente o conecte el nivel macroscópico con el nivel simbólico, se utiliza el nivel nanoscópico o submicroscópico, a partir de modelos particulados, en donde alumno concentra su atención en los elementos químicos, en el peso, el número de oxidación y la estequiometría.

"EL CICLO DEL AZUFRE EN EDUCACIÓN QUÍMICA Y SU IMPORTANCIA EN LA BIOTECNOLOGÍA AMBIENTAL."

Dra. Claudia Guerrero Barajas. Unidad Profesional Interdisciplinaria de Biotecnología (UPIBI) Instituto Politécnico Nacional.

Explicar los ciclos biogeoquímicos permite a los científicos la comprensión de la interacción de las comunidades microbianas entre sí y su actividad en el medio ambiente. Existen muchas actividades en biotecnología ambiental desarrolladas por Químicos, Bioquímicos e Ingenieros Químicos que toman ventaja de los ciclos biogeoquímicos ya sea para mejorar la calidad del suelo o el agua contaminados, por ejemplo, para recuperar metales como cobre o uranio de diversas fuentes minerales. El azufre es el décimo elemento más abundante en la corteza terrestre. Es un elemento esencial en los organismos vivos que comprende aproximadamente el 1% en base seca de la composición de la célula. El azufre dentro de su ciclo biológico cambia de un estado de oxidación de +6 en el ión sulfato (SO_4^{2-}), a -2 en el ión sulfuro (S^{2-}). Las células requieren azufre para la síntesis de los aminoácidos cisteína y metionina y también es requerido para la síntesis de algunas vitaminas, hormonas y proteínas. Aunque el ciclo del azufre no es tan complejo como por ejemplo, el ciclo del nitrógeno, el impacto que tiene en el medio ambiente es extremadamente importante ya que incluye la formación de la lluvia ácida, los lixiviados ácidos de minas y la corrosión de metales y concreto. Debido a que el metabolismo de algunas bacterias fototróficas que son activas dentro del ciclo del azufre aún no se ha entendido completamente, su aplicación en el desarrollo de bioprocesos es escasa. Por el contrario, las bacterias reductoras de azufre (BSR) y sulfato juegan un papel muy importante en tecnologías de tratamiento de agua y biorremediación. En este trabajo se plantean las principales reacciones del ciclo biogeoquímico del azufre, se incluyen ejemplos de algunos de los microorganismos más importantes dentro del ciclo, así como los principales compuestos orgánicos involucrados. Finalmente, se explica la aplicación de algunas de las reacciones del ciclo en procesos para tratamiento de aguas residuales y biodegradación de contaminantes orgánicos que incluyen procesos técnicamente asistidos como biorreactores y procesos naturales, como la atenuación natural. Se pretende resaltar la importancia que tiene para todos los estudiantes de Química y áreas afines estudiar el ciclo del azufre en general, particularmente en aquellas reacciones involucradas dentro del ciclo biogeoquímico del azufre cuya aplicación ha sido relevante dentro de la biotecnología ambiental.

SIMPOSIO 5

5. "Síntesis de Materiales para la Producción y Almacenamiento de Energía.", Coordina: Dr. Miguel Ángel Romero Martínez del Sobral, Investigador Independiente, Puebla, México

"El Proyecto de Energía Limpia: de la predicción a la síntesis." Dr. Carlos Amador Bedolla, Facultad de Química-UNAM

"Preparación y caracterización del $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ por síntesis sonoquímica, solvotermal y por electrohilado con uso en baterías recargables ion-litio" Dr. Eduardo Maximiano Sánchez Cervantes, Facultad de Química-UANL

"Materiales Cerámicos Polifuncionales con Aplicaciones en Medioambiente y Energía." Dra. Issis Claudette Romero Ibarra, Instituto Politécnico Nacional

"Síntesis de Nuevos Materiales Energéticos." Dr. Miguel Ángel Romero Martínez del Sobral, Investigador Independiente, Puebla, México

Simposio 5

"SÍNTESIS DE MATERIALES PARA LA PRODUCCIÓN Y ALMACENAMIENTO DE ENERGÍA.",

Coordina: Dr. Miguel Ángel Romero Martínez del Sobral, Investigador Independiente, Puebla, México

"EL PROYECTO DE ENERGÍA LIMPIA: DE LA PREDICCIÓN A LA SÍNTESIS."

Dr. Carlos Amador Bedolla, Facultad de Química-UNAM

SEMBLANZA

Carlos Amador Bedolla es profesor titular de Química Teórica en la Facultad de Química, UNAM. Estudió licenciatura, maestría y doctorado en Fisicoquímica en esa misma institución. Ha realizado estancias posdoctorales y sabáticas en Case Western Reserve University, Berkeley, Santiago de Cuba y Harvard, en química, física y ciencia de materiales. Fue Secretario Académico de la Facultad de Química. Ha publicado decenas de artículos de investigación, decenas de artículos de difusión, un programa de televisión, y dos libros. Dirige el equipo multidisciplinario de predicción, síntesis y elaboración de celdas orgánicas fotovoltaicas financiado por CONACyT/SENER.

RESUMEN

El Proyecto de Energía Limpia de Harvard (HCEP) es un estudio computacional distribuido de 2.3 millones de moléculas concebidas como candidatos promisorios para crear polímeros donadores que sean usados en celdas solares de heterojuntas (fotovoltaicas orgánicas u OPVs). Calculamos las propiedades electrónicas del estado basal de estas moléculas —a través de la realización de 150 millones de cálculos teóricos de funcionales de la densidad— y empleamos el modelo de Scharber aplicado a un aceptor de PCBM para jerarquizar las moléculas en términos de su Eficiencia de Conversión de Potencia (PCE), con lo que encontramos 0.04% de moléculas que exceden 11% de eficiencia. Analizamos los bloques unitarios empleados en la síntesis virtual de las moléculas postuladas como de alta eficiencia.

En la actualidad se desarrolla e implementa un programa experimental de síntesis de algunas de estas moléculas y su empleo en la construcción de OPVs para probar la eficacia de la predicción teórica. El empleo de métodos de jerarquización que consideren, por ejemplo, otros tipos de moléculas aceptoras y/o

2016
Pachuca, Hidalgo



efectos topológicos en la eficiencia de conversión constituye otra línea de investigación en el presente. Discutimos también la adaptación de estos resultados en los objetivos sintéticos del programa experimental.

Palabras clave: Fotovoltaicas Orgánicas, Química Cuántica de Alto Rendimiento, Síntesis Orgánica

“PREPARACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DEL $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ POR SÍNTESIS SONOQUÍMICA, SOLVOTERMAL Y POR ELECTROHILADO CON USO EN BATERÍAS RECARGABLES ION-LITIO”

Dr. Eduardo Maximiano Sánchez Cervantes, Facultad de Química-UANL

SEMBLANZA

Es egresado de la Licenciatura en Ciencias Químicas del ITESM y de Doctorado en Química del Estado Sólido de la Universidad Estatal de Arizona. Actualmente es Profesor Titular B de la UANL y adscrito a la Facultad de Ciencias Químicas. Es miembro del Sistema Nacional de Investigadores Nivel 2 y Líder del Cuerpo Académico de Almacenamiento y Conversión de Energía. A la fecha ha dirigido seis tesis doctorales, seis de maestría y seis de licenciatura. Ha publicado 50 artículos en revistas indizadas en el área de química de los materiales con énfasis en materiales energéticos. Entre las revistas relevantes se debe mencionar a Nature, Chemical Society Reviews, Solar Energy Materials & Solar Cells, Electrochimica Acta y el Journal of Physical Chemistry B. Asimismo ha obtenido el Premio de Investigación en Ingeniería y Tecnología (2007 y 2014), en Ciencias Exactas (2007, 2008 y 2011) y el Premio a la Invención, modalidad patente (2015) otorgados por la UANL.

RESUMEN

En los últimos años el titanato de litio, $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ o LTO se ha perfilado como material anódico alternativo al tradicional electrodo de carbono. El presente trabajo plantea la preparación sonoquímica, solvotermal y por electrohilado del LTO con la finalidad de establecer su efecto en las características electroquímicas en las baterías ion-litio para lo cual se llevó a cabo su síntesis, caracterización morfológica, estructural y electroquímica construyendo prototipos (baterías) de ion-litio de tipo botón.

"MATERIALES CERÁMICOS POLIFUNCIONALES CON APLICACIONES EN MEDIOAMBIENTE Y ENERGÍA."

Dra. Issis Claudette Romero Ibarra, Instituto Politécnico Nacional, Ingeniería y Tecnologías Avanzadas

SEMBLANZA

Profesora-investigadora en la Unidad Profesional Interdisciplinaria en Ingeniería y Tecnologías Avanzadas (UPIITA), IPN. En el 2014 fue catedrática-CONACYT comisionada a la UAM-Iztapalapa. Del 2012 al 2014 realizó una estancia posdoctoral en el IIM, UNAM. Doctora en Ciencias Químicas por la UNAM y egresada de la Fac. de Química. Cuenta con más de veinte publicaciones en revistas indizadas con más de 200 citas y dos solicitudes de registro de patente. Premio al Fomento al Patentamiento y la Innovación-2010. Reconocimiento: Mujeres en la Ciencia L'Oreal-UNESCO-AMC de Ciencias-2013. Miembro del SNI nivel I.

RESUMEN

Una de las grandes problemáticas que enfrentamos en la actualidad es el aumento de las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) en la atmósfera. El 6 de abril de 2016 se publicó en la Gaceta Oficial de la Cd. de México (no. 44) el Programa para Contingencias Ambientales Atmosféricas, debido a las cifras



alarmantes de contaminación. Este aumento en la contaminación proviene principalmente del desbalance generado por motores de combustión interna y diversos procesos industriales (quema de combustibles fósiles como: carbón, petróleo y gas; el autotransporte, las plantas industriales, deforestación y actividades agrícolas, etc.), lo cual afecta el medio ambiente y la salud humana. Para mitigar estos problemas es necesario el desarrollo y uso de nuevos materiales aplicables a tecnologías enfocadas en energías limpias y sostenibles. Esta plática versará sobre el diseño, síntesis y evaluación de nuevos materiales que por medio de un proceso de quimisorción puedan capturar CO_2 (un gas de efecto invernadero), que funcionen como catalizadores heterogéneos en la generación de energéticos limpios (biodiesel y gas de síntesis, $\text{CO} + \text{H}_2$) y que puedan ser usados como cátodos en dispositivos de almacenamiento de energía como baterías de ion litio. Se presentan los resultados de la síntesis de varios materiales por las técnicas de estado sólido, hidrotermal y solvotermal asistido a microondas. Los materiales se caracterizaron estructural y microestructuralmente por medio de DRX, MEB y Adsorción volumétrica de N_2 . Además, se presentan resultados de la evaluación de cada uno de estos materiales en diversas aplicaciones ambientales y energéticas.

"SÍNTESIS DE NUEVOS MATERIALES ENERGÉTICOS."

Dr. Miguel Ángel Romero Martínez del Sobral, Investigador Independiente, Puebla, México

SEMBLANZA

Cursó sus estudios de licenciatura y maestría en Química en la UNAM recibiendo, respectivamente, la Medalla Gabino Barreda (1984; 1986)). Completó estudios de doctorado en la Universidad de British Columbia (UBC), Canadá (con beca-reconocimiento predoctoral Isaac Walton Killam Memorial (1986-1988) y la UBC University Graduate Fellowship (1989-1990)). En 1992 trabajó durante un año como Investigador Asociado en el Instituto de Química de la UNAM; en 1994 trabajó como post-doctorado en la Universidad de Ottawa; y en 1996 fungió como investigador asociado en la Universidad de UBC. Actualmente es asesor en la empresa NUTEK, S.A. de C.V., en donde creó el departamento de Síntesis Orgánica. Trabaja también como investigador independiente en la creación de nuevos materiales energéticos. Es miembro activo de la Sociedad Pirotécnica Internacional y miembro del Comité Ejecutivo Nacional de la Sociedad Química de México, fungiendo actualmente como Vocal Industrial. Sus publicaciones versan sobre síntesis de productos naturales, compuestos de interés teórico, materiales energéticos; así como el desarrollo de nuevas metodologías sintéticas.

RESUMEN

Se describe la preparación de nuevos materiales energéticos con potencial uso como explosivos y propelentes. Entre los criterios tomados en cuenta para el diseño y la síntesis de estos materiales está la disponibilidad y precio de los materiales de partida, la sensibilidad térmica y mecánica, velocidad de detonación moderada o alta, y el requerimiento de un número reducido de pasos sintéticos. Entre los materiales preparados destacan compuestos con funcionalidad simple, funcionalidad múltiple, líquidos iónicos, análogos más seguros de altos explosivos sensibles como el PETN y la nitroglicerina, así como derivados de productos farmacéuticos comunes. Se discuten algunas de las propiedades experimentales y teóricas de los compuestos preparados, así como su posible uso como materiales energéticos. Por otra parte se propone el uso del concepto de "unidades explosofóricas". Finalmente se describe el descubrimiento de una nueva reacción dominó para la síntesis de azidas alílicas.



SIMPOSIO 6

6. "Desarrollo de Fármacos: Estrategias químico-farmacéuticas en la búsqueda de sustancias bioactivas." Coordina: Dr. Gabriel Navarrete Vázquez, Universidad Autónoma del Estado de Morelos.

"La Química Computacional como Auxiliar en el Diseño Fármacos: Experiencias con Compuestos Tricíclicos y Compuestos de Origen Natural." Dr. Marco Antonio Loza Mejía. Universidad La Salle de la Ciudad de México.

" Síntesis, actividad tricomonocida y candidada de derivados de 2-fenil-2*H*-indazol y 2,3-difenil-2*H*-indazol." Jaime Pérez Villanueva. Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Xochimilco.

"Descubrimiento de Ligandos Multitarget para el Tratamiento de Diabetes Mellitus II." Dr. Sergio Hidalgo Figueroa. Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Xochimilco.

"Descubrimiento, diseño y síntesis de ligandos selectivos del receptor $\sigma 1$ en el tratamiento experimental del dolor. Análisis *in combo* de sus efectos antinociceptivos." Dr. Gabriel Navarrete Vázquez. Universidad Autónoma del Estado de Morelos.

Simposio 6

"DESARROLLO DE FÁRMACOS: ESTRATEGIAS QUÍMICO-FARMACÉUTICAS EN LA BÚSQUEDA DE SUSTANCIAS BIOACTIVAS."

Coordina: Dr. Gabriel Navarrete Vázquez, Universidad Autónoma del Estado de Morelos.

RESUMEN GENERAL

En este simposio se abordarán las estrategias para el diseño, la síntesis y la bioevaluación de moléculas que presentan actividad frente a enfermedades crónico-degenerativas como diabetes, cáncer, enfermedades parasitarias, inflamación y dolor. Este tipo de investigación es multidisciplinaria, convergiendo en una frontera entre la química y la farmacia. Cuatro especialistas del área químico-farmacéutica de distintas instituciones de educación superior (Universidad La Salle, UAM-Xochimilco, UAM-Iztapalapa y Facultad de Farmacia, UAEM) analizarán sus experiencias en la búsqueda de moléculas bioactivas, desde el punto de vista del diseño, la síntesis química, la elección de los modelos de actividad biológica (*in vitro*, *in vivo*, *ex vivo* e *in silico*), así como la interpretación de los resultados del bioensayo. Todo esto con el fin de obtener una molécula que presente características farmacológicas adecuadas, con moderada toxicidad y que sea candidato a evaluaciones posteriores en modelos más complejos.

"LA QUÍMICA COMPUTACIONAL COMO AUXILIAR EN EL DISEÑO FÁRMACOS: EXPERIENCIAS CON COMPUESTOS TRICÍCLICOS Y COMPUESTOS DE ORIGEN NATURAL."

Dr. Marco Antonio Loza Mejía. Universidad La Salle de la Ciudad de México.

SEMBLANZA

Realizó sus estudios de posgrado en la Universidad Nacional Autónoma de México en el Departamento de Farmacia de la Facultad de Química donde desarrolló proyectos relacionados con el diseño de compuestos antitumorales. Realizó una estancia de investigación en la Facultad de Farmacia de la Universidad de Alcalá de Henares. Ha impartido varios cursos relacionados con la Química Orgánica y el Desarrollo de Fármacos



y Medicamentos a nivel licenciatura y posgrado. Actualmente es Maestro de Tiempo Completo-Investigador en la Universidad La Salle de la Ciudad de México, donde ha tenido la responsabilidad de iniciar una línea de investigación orientada al diseño y síntesis de moléculas bioactivas. Ha dirigido 8 tesis de licenciatura, 2 de maestría y es autor de 8 artículos en revistas JCR, un libro de docencia y un capítulo de libro próximo a ser publicado

RESUMEN

La química computacional es sin duda una de las herramientas más empleadas por los químicos farmacéuticos hoy en día. Y si bien, los resultados que arrojan los estudios realizados con esta técnica siempre deben ser validados experimentalmente, es cierto que constituyen una forma de orientar a los investigadores en la búsqueda de compuestos con mejor perfil farmacológico. Particularmente, en la búsqueda de compuestos intercalantes antitumorales, la modificación estructural mediante isosterismo ha sido poco empleada. Algunos derivados isostéricos de las 9-anilinoacridina han mostrado actividad citotóxica de moderada a alta, esto se ha asociado con algunos descriptores fisicoquímicos, calculados mediante métodos *ab initio* y DFT, que están relacionados con la permeabilidad y especialmente con la afinidad y el acomodo del sistema intercalante entre los pares de bases. Por otra parte, el uso del método computacional conocido como acoplamiento molecular o *docking* ha sido empleado para el diseño de nuevas moléculas activas. Una de las estrategias es partir de una estructura base con actividad conocida y realizar modificaciones a la misma con el fin de obtener moléculas con mayor afinidad hacia un cierto receptor. En nuestro grupo de investigación, hemos usado esta aproximación para el diseño de inhibidores de la percepción de quórum, compuestos antiinflamatorios entre otras actividades biológicas.

"SÍNTESIS, ACTIVIDAD TRICOMONICIDA Y CANDÍCIDA DE DERIVADOS DE 2-FENIL-2H-INDAZOL Y 2,3-DIFENIL-2H-INDAZOL."

Jaime Pérez Villanueva. Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Xochimilco.

SEMBLANZA

Estudió la licenciatura en Químico Farmacéutico Biólogo en la Universidad de Guanajuato en el periodo 2000-2004. Posteriormente, ingresó al Posgrado en Ciencias Químicas de la Universidad Nacional Autónoma de México, donde obtuvo los grados de Maestro y Doctor en Ciencias en 2007 y 2013, respectivamente. En el año 2011, el Dr. Pérez se incorporó como profesor de tiempo completo a la Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Xochimilco. Su línea de investigación se centra en el diseño y síntesis de compuestos con actividad antiinflamatoria y antimicrobiana. Hasta la fecha, el Dr. Pérez es autor de 15 publicaciones en revistas indizadas y ha presentado 29 trabajos en congresos nacionales e internacionales. Asimismo, el Dr. Pérez fue distinguido como Investigador Nacional nivel 1 ante el SNI durante el periodo (2016-2018).

RESUMEN

Trichomonas vaginalis, *Candida albicans* y *Candida glabrata* se encuentran entre los principales agentes etiológicos de la vaginitis. De acuerdo con la organización mundial de la salud (WHO), se estiman más de 170 millones de casos de tricomonosis anualmente. La infección por *T. vaginalis* puede causar inflamación severa del tracto genital femenino, lo cual se ha asociado con labor de parto pretérmino, bajo peso en neonatos, esterilidad, cáncer cervical y predisposición a adquirir VIH. Por otro lado, se sabe que 75% de las mujeres sufren de una infección vaginal por levaduras al menos una vez en su vida. La infección por *Candida* también es causa de irritación, inflamación y malestar. Como parte de nuestros esfuerzos por encontrar nuevos agentes tricomonocidas y candidocidas, en el presente trabajo se llevó a cabo la síntesis de 29 compuestos, que incluyen derivados de 2-fenil-2H-indazol y 2,3-difenil-2H-indazol. El diseño de los compuestos se basó en la fusión del núcleo de indazol que se sabe tiene actividad antiprotozoaria y del



núcleo de 1,5-difenilpirazol presente en compuestos con actividad antiinflamatoria. Los compuestos derivados de 2-fenil-2*H*-indazol se sintetizaron empleando la reacción de Cadogan, mientras que los 2,3-difenil-2*H*-indazoles se obtuvieron empleando una arilación catalizada por paladio de los respectivos 2-fenil-2*H*-indazoles. Las evaluaciones *in vitro* contra el protozooario *T. vaginalis*, revelaron que algunos 2-fenil-2*H*-indazoles y 2,3-difenil-2*H*-indazoles tienen actividad en el rango nanomolar. Además, los ensayos preliminares muestran que algunos compuestos derivados de 2,3-difenil-2*H*-indazol tienen actividad contra *C. albicans* y *C. glabrata*. Adicionalmente, estudios *in silico* de acoplamiento molecular sugieren que los 2,3-difenil-2*H*-indazoles sintetizados tienen afinidad por la enzima ciclooxigenasa 2, por lo que podrían también tener actividad antiinflamatoria.

"DESCUBRIMIENTO DE LIGANDOS MULTITARGET PARA EL TRATAMIENTO DE DIABETES MELLITUS II."

Dr. Sergio Hidalgo Figueroa. Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Xochimilco.

SEMBLANZA

Cursó sus estudios de licenciatura en Farmacia así como la Maestría y Doctorado en la Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Realizó una estancia posdoctoral en la Universidad Autónoma Metropolitana. Su producción científica consta de 14 artículos publicados en revistas de prestigio internacional con arbitraje. Ha sido asesor técnico de cinco tesis y director de una tesis de licenciatura. Es árbitro de 3 revistas de prestigio internacional en el área de química y farmacia. Miembro del Sistema Nacional de Investigadores Nivel 1. Ha sido profesor de química y farmacología en diferentes universidades como UPEMOR, UAEM y UNIVAC y UAM-Iztapalapa. Actualmente, su línea de investigación está dedicada a la Química Farmacéutica con experiencia en síntesis de compuestos con actividad biológica de interés farmacéutico, bioevaluación y métodos computacionales en el descubrimiento de fármacos con enfoque a enfermedades crónico degenerativas.

RESUMEN

El diseño de los compuestos 1 y 2 se basó en la similitud de grupos farmacofóricos de agonistas de PPAR y GPR40. Con el fin de encontrar nuevos compuestos con actividad biológica mejorada, este trabajo describe un nuevo agonista dual PPAR-GPR40. Se sintetizaron dos compuestos, que se prepararon siguiendo una ruta de síntesis multipasos y los niveles relativos de expresión de ARNm de PPAR, GLUT4 y GPR40 se estimaron en cultivos de células, así como la secreción de insulina y los niveles de $[Ca^{2+}]$. El compuesto 1 mostró un aumento de 7 veces la expresión de ARNm de PPAR γ , que a su vez mejora los niveles de expresión de GLUT4 con respecto de control y pioglitazona. También mostró un aumento de 2 veces en el nivel de $[Ca^{2+}]$ intracelular permitiendo una mejora en la liberación de insulina, siendo tan activo como control positivo (glibenclamida), efectuando también un aumento de 2 veces en la expresión de ARNm de GPR40. Sin embargo, el compuesto 2 mostró una actividad más baja que el compuesto 1. La actividad antidiabética del éster de 1 se determinó a 50 mg/Kg de dosis única utilizando un modelo de ratones diabéticos por estreptozotocina-nicotinamida. Los resultados indicaron una disminución moderada de los niveles de glucosa en plasma a través de las 7 h post-administración. Además, se llevó a cabo un estudio acoplamiento molecular del compuesto 1 sobre los receptores PPAR γ y GPR40, que muestra gran afinidad para ambos receptores. Hemos observado importantes interacciones polares entre el grupo carboxílico y restos principales en las cavidades. Por tanto, el compuesto 1 tiene un potencial para el desarrollo de agentes antidiabéticos con novedosa actividad dual.

"DESCUBRIMIENTO, DISEÑO Y SÍNTESIS DE LIGANDOS SELECTIVOS DEL RECEPTOR σ_1 EN EL TRATAMIENTO EXPERIMENTAL DEL DOLOR. ANÁLISIS IN COMBO DE SUS EFECTOS ANTINOCICEPTIVOS."



Dr. Gabriel Navarrete Vázquez. Universidad Autónoma del Estado de Morelos.

SEMBLANZA

Cursó sus estudios de QFB y Maestría en Farmacia, obteniendo la Medalla “Alfonso Caso” y la Mención Honorífica a la Mejor Tesis de posgrado en la UNAM, donde también obtuvo el grado de Doctor en Ciencias. Fue alumno del Residential School in Medicinal Chemistry y realizó una estancia postdoctoral en la Unidad de Biomedicina de FES-Iztacala. Posee una producción científica de 73 artículos publicados en revistas de prestigio internacional con arbitraje, los cuales han sido citados 1239 veces, con un índice h = 19. Ha dirigido y titulado a 5 alumnos de doctorado, 16 de maestría y 30 de licenciatura. Es Profesor Investigador Titular “C” en la Licenciatura y el posgrado de la Facultad de Farmacia, UAEM. Es miembro del Sistema Nacional de Investigadores nivel 3. Es editor académico regional del Journal of Chemistry y Medicinal Chemistry (Bentham). Arbitro de 55 revistas de prestigio internacional. Su línea de investigación es la Química Farmacéutica (diseño, síntesis y bioevaluación) de sustancias heterocíclicas con interés farmacológico.

RESUMEN

El dolor es una experiencia sensorial y emocional desagradable asociada con daño concreto o latente en el tejido. Los analgésicos tradicionales (AINES) y los esteroidales son los más utilizados en la terapia, sin embargo todos ellos muestran efectos secundarios bien conocidos y han limitado la eficacia en el tratamiento de la nocicepción, que se define como el proceso neurofisiológico subyacente a la sensación de dolor. Esto refleja la necesidad de continuar la búsqueda de nuevos y mejores fármacos antinociceptivos, con mecanismo de acción novedosos.

En este trabajo se diseñaron una serie de compuestos de tipo aminoetilariloxiacetamida, los cuales se sintetizaron y ensayaron como ligandos de los receptores σ_1 y σ_2 , cuyo antagonismo ha sido reportado como un nuevo blanco para la terapia antinociceptiva. Varios compuestos mostraron una alta afinidad y selectividad por los receptores σ_1 ($K_i = 320.42$ y 6 nM) siendo 36 veces más selectivos sobre el receptor σ_1 que sobre el σ_2 . El análisis mediante acoplamiento molecular de los compuestos más activos sobre un modelo del receptor σ_1 construido mediante homología mostró interacciones electrostáticas entre el anillo ionizado de morfolina o piperidina y Asp126, así como importantes contactos con los residuos Tyr120, His154 y Trp164. El análisis de eficiencia del ligando, así como la toxicología *in vitro* revelaron una excelente calidad intrínseca de los compuestos. Los efectos de los compuestos fueron ensayados *in vivo* en varios modelos murinos de dolor (neuropático, artrítico e inflamatorio) demostrando su efecto como agentes antinociceptivos.



SIMPOSIO 7

7. "Química Orgánica. Síntesis Total." Coordina: Dr. J. Martín Torres Valencia, Presidente Academia Mexicana de Química Orgánica- AMQO

"Síntesis Total de Productos Naturales Carbo- y Heterocíclicos." Dr. Joaquín Tamariz Mascarúa. Escuela Nacional de Ciencias Biológicas. Instituto Politécnico Nacional

"<Serpientes y Escaleras> en la Síntesis Total de *Flustraminas* de *Flustra foliacea*." Dra. Martha Sonia Morales Ríos. Departamento de Química del Cinvestav-IPN

"Secuencias radicalarias-iónicas: Herramientas útiles en síntesis orgánica." Dr. Alejandro Cordero Vargas. Instituto de Química- UNAM

"Una nueva aproximación poco tóxica y muy accesible para la síntesis total de alcaloides." Dr. Fernando Sartillo Piscil. Facultad de Química de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP), Puebla, México

Simposio 7

"QUÍMICA ORGÁNICA. SÍNTESIS TOTAL."

Coordina: Dr. J. Martín Torres Valencia, Presidente Academia Mexicana de Química Orgánica- AMQO

RESUMEN GENERAL

La síntesis orgánica es una disciplina fundamental de la química que permite transformar las moléculas aisladas de la naturaleza para formar otros compuestos de origen natural (síntesis parcial), o construirlas a partir de moléculas mucho más sencillas (síntesis total).

La síntesis de moléculas de interés a partir de compuestos químicos sencillos es una tarea multifacética. La estrategia debe considerar las transformaciones químicas en una secuencia que pueda conducir de manera plausible a la estructura objetivo, teniendo en cuenta que el número de pasos y el rendimiento de cada transformación determinará la eficacia de una síntesis exitosa. Se puede emplear la analogía de la síntesis con el juego infantil muy conocido, Serpientes y Escaleras, donde la capacidad para producir un compuesto es una Escalera sintética y la falta de eficacia es una Serpiente anti-sintética. La búsqueda de una vía de síntesis que evite todas las serpientes es muy difícil, ya que en el espacio de reacciones químicas hay pocas escaleras, pero muchas, muchas serpientes.

En los últimos dos décadas, muchos investigadores han enfocado sus esfuerzos en desarrollar síntesis orgánicas con el punto de vista menos contaminante posible. Para este fin, se han desarrollado desde reactivos, disolventes, catalizadores y hasta estrategias sintéticas que han ofrecido algunas treguas al medio ambiente.

En este simposio, se presentarán varias estrategias para la síntesis total de productos naturales o sustancias de interés biológico. Así, se describirá la síntesis de carbo- y heterociclos (terpenos, heterociclos furánicos, benzofuránicos, pirrólicos, cumarinas, carbazoles y carboazúcares) y de flustraminas obtenidas del briozoo marino *Flustra foliacea*, las cuales presentan en su estructura un anillo indolenina fusionando a una pirrolidina, bromo y una o dos unidades de prenilo. También se detallará el uso de secuencias radicalarias-iónicas para la síntesis de varias sustancias naturales de importancia farmacológica como las lactonas defucogilvocarcina M y la arnotina I, así como lactamas con esqueleto de alcaloides indolizídnicos. Finalmente se presentará la síntesis de amidas glicídicas (2,3-epoxiamidas), intermediarios clave para la preparación de los alcaloides norbalasubramida, la (+)-piplaroxida (repelente de hormigas cortadoras de

hojas), utilizando NaClO₂, un agente oxidante suave, extremadamente barato y no tóxico. Esta estrategia también se empleó con éxito para la síntesis de un iminoazúcar, potente inhibidor de la biosíntesis de la glucosidasa y glicolípidos.

"SÍNTESIS TOTAL DE PRODUCTOS NATURALES CARBO- Y HETEROCÍCLICOS."

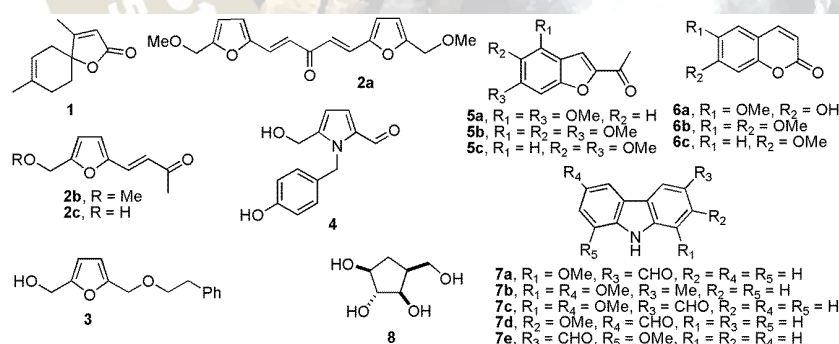
Dr. Joaquín Tamariz Mascarúa. Escuela Nacional de Ciencias Biológicas. Instituto Politécnico Nacional

SEMBLANZA

Es originario de la Ciudad de México y está adscrito a la Escuela Nacional de Ciencias Biológicas (ENCB) del IPN, desde 1983. Realizó estudios de Químico y Maestría en la UNAM, y sus estudios de doctorado en química orgánica en la Universidad de Lausana (Suiza) (1983). Llevó a cabo una estancia posdoctoral con el Profesor Louis S. Hegedus en Colorado State University (1989-1990), y una estancia como Profesor Visitante en West Virginia University (1997-1998). Ha dirigido y codirigido tesis de licenciatura (22), maestría (37) y doctorado (24); ha publicado artículos en revistas indizadas (140). Es miembro del SNI (Nivel III) y de la Academia Mexicana de Ciencias. Ha obtenido el Diploma a la Investigación (IPN, 2001), el Premio Nacional de Química Andrés Manuel del Río 2007 en Investigación (SQM, 2007), el Premio a la Investigación (IPN, 2007), y la Presea Lázaro Cárdenas (IPN, 2008).

RESUMEN

naturales, y su complejidad estructural, como la de los alcaloides, no tiene paralelo. Hemos desarrollado nueva metodología para la síntesis de monoterpenos como la Andiolactona (**1**). Heterociclos furánicos y pirrólicos han sido preparados de forma sencilla y convergente, como son las Remanonas A-C (**2a-c**), el Pichiafurano C (**3**) y la Pirrolemarumina (**4**). Se ha desarrollado una nueva estrategia sintética para la construcción de benzofuranos y cumarinas naturales, como la Calebentina (**5a**), Caleprunina A (**5b**), Caleprunina B (**5c**), Escopoletina (**6a**), Escoparona (**6b**) y Herniarina (**6c**). Entre los alcaloides, los carbazoles son abundantes y de estructura muy diversa. Se han diseñado dos rutas sintéticas generales para su preparación, concluyéndose la síntesis total de carbazoles 1-, 2- y 4-oxigenados, entre ellos los carbazoles naturales **7a-e**. Entre los carboazúcares, se ha diseñado una ruta en cascada de la β-D-carboxilosa (**8**).



"<SERPIENTES Y ESCALERAS> EN LA SÍNTESIS TOTAL DE FLUSTRAMINAS DE FLUSTRA FOLIACEA.

" Dra. Martha Sonia Morales Ríos. Departamento de Química del Cinvestav-IPN

SEMBLANZA

Obtuvo el título de químico farmacéutico biólogo por la UNAM (1975) y el doctorado en química por la Universidad Pierre et Marie Curie, París (1982). Desde 1983 es investigadora en el Departamento de



Química del Cinvestav-IPN y profesora en el Departamento de Farmacología de la misma institución desde 2003. Su campo de investigación es la síntesis de moléculas orgánicas pequeñas de interés farmacológico. Ha graduado 15 maestros en ciencias y 11 doctores. Su acervo se cifra en una centena de publicaciones. Es miembro del Sistema Nacional de Investigadores Nivel III. Sus méritos le han conducido al reconocimiento plural de instituciones. Es recipientaria de 6 premios en México y uno en España: Premio Martín de la Cruz en 1997, Premios Canifarma 2008 y Dr. Jorge Rosenkranz en 2009 y Premio de la Academia Iberoamericana de Farmacia, Sevilla, 2014, entre otros.

RESUMEN

Con la aceptación creciente de que la diversidad química de los productos naturales responde mejor a los fármacos exitosos que la diversidad de colecciones de compuestos de síntesis, el interés en la aplicación de la diversidad química natural para el descubrimiento de fármacos parece ir en aumento.

La síntesis de productos naturales a partir de compuestos químicos sencillos es una tarea multifacética que en muchos casos representa grandes desafíos; por ello la analogía con el juego infantil muy conocido <Serpientes y Escaleras>. La búsqueda de una ruta de síntesis que evite todas las serpientes es difícil, ya que en el espacio de reacciones químicas hay pocas escaleras, pero muchas, muchas serpientes.

El interés en los productos naturales marinos se debe a que muchos de ellos poseen actividades biológicas excepcionalmente potentes. Sin embargo, su disponibilidad extremadamente limitada ha impedido en muchos casos realizar estudios detallados.

El briozoo marino *Flustra foliacea*, que se distribuye en aguas árticas a profundidades entre 0 y 100 metros, es una fuente rica en alcaloides. La síntesis total de 7 de las 16 flustraminas hasta ahora conocidas se realizó a partir de una indolenina polifuncional que actuó como bloque de construcción. Este enfoque permite el aprovechamiento del equilibrio prenilo-prenilo invertido en la formación de un enlace C-C que ensambla un carbono cuaternario, concomitante con una lactonización intramolecular.

"SECUENCIAS RADICALARIAS-IÓNICAS: HERRAMIENTAS ÚTILES EN SÍNTESIS ORGÁNICA."

Dr. Alejandro Cordero Vargas. Instituto de Química- UNAM

SEMBLANZA

Es originario de la ciudad de Puebla. Hizo su Licenciatura en Químico Farmacobiólogo en el año 2000, cuya tesis fue dirigida por la Dra. Leticia Quintero Cortés. Realizó la Maestría en Química en el 2001 y el Doctorado en Química en el 2005 en la Universidad de Paris XI, ambos bajo la supervisión del Prof. Samir Z. Zard. Posteriormente, llevó a cabo una estancia posdoctoral con el Prof: Josep Bonjoch en la Universitat de Barcelona (2005–2007). Se incorporó al Instituto de Química de la UNAM en enero de 2008 como Investigador Asociado C y es Investigador Titular A desde 2013. Es miembro del Sistema Nacional de Investigadores Nivel I y sus líneas de investigación son Secuencias radicalarias iónicas aplicadas a la síntesis de productos naturales y Síntesis estereoselectiva de C-glicósidos naturales.

RESUMEN

En este trabajo se presentan reacciones radicalarias de transferencia de átomo (RTA) cuyos productos se someten a una reacción iónica, produciendo grupos funcionales útiles en síntesis orgánica. Con las secuencias mencionadas, se logran preparar epóxidos, dicarbonilos, lactonas y lactamas, que con los sustituyentes adecuados, son utilizados como intermediarios avanzados en la síntesis total de productos de interés biológico, como los perhidroaza-azulenos, la tiloforina, la dendroprimina, la indolizidina (–)-167B y la de-O-metilcentrolobina.

"UNA NUEVA APROXIMACIÓN POCO TÓXICA Y MUY ACCESIBLE PARA LA SÍNTESIS TOTAL DE ALCALOIDES."

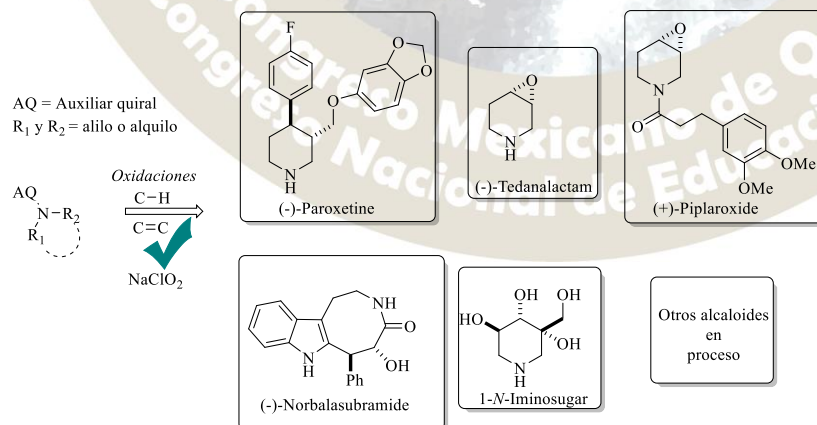
Dr. Fernando Sartillo Piscil. Facultad de Química de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP), Puebla, México

SEMBLANZA

Es originario de la ciudad de Puebla. Hizo su Licenciatura en Químico Farmacobiólogo en el año 2000, cuya tesis fue dirigida por la Dra. Leticia Quintero Cortés. Realizó la Maestría en Química en el 2001 y el Doctorado en Química en el 2005 en la Universidad de Paris XI, ambos bajo la supervisión del Prof. Samir Z. Zard. Posteriormente, llevó a cabo una estancia posdoctoral con el Prof: Josep Bonjoch en la Universitat de Barcelona (2005–2007). Se incorporó al Instituto de Química de la UNAM en enero de 2008 como Investigador Asociado C y es Investigador Titular A desde 2013. Es miembro del Sistema Nacional de Investigadores Nivel I y sus líneas de investigación son Secuencias radicalarias iónicas aplicadas a la síntesis de productos naturales y Síntesis estereoselectiva de C-glicósidos naturales.

RESUMEN

Ante los recientes cuestionamientos sobre la pregunta trivial “¿por qué hacer síntesis?”, existirá un sinfín de respuestas cargadas de valor práctico e incluso filosófico que cada investigador, desde su perspectiva o interés personal, utilizará para justificar su quehacer en la síntesis. La gran mayoría de ellos coincide en que se hace síntesis porque “resuelve problemas”. Sin embargo, bajo esta simple respuesta, surge una pregunta aterradora: ¿el hacer síntesis genera contaminación ambiental? Obviamente la respuesta a esta pregunta deberá ser un unánime “SÍ”. Por tanto, en los últimos dos décadas, muchos investigadores han enfocado sus esfuerzos en lograr sus síntesis con el enfoque menos contaminante posible. Para este fin, se han desarrollado desde reactivos, disolventes, catalizadores y hasta estrategias sintéticas que han ofrecido algunas treguas al medio ambiente. En este sentido, mi grupo de investigación se ha preocupado en desarrollar metodologías sintéticas capaces de llevar a cabo C–H y C=C oxidaciones en condiciones suaves y en ausencia de metales de transición, los cuales su gran mayoría además de ser muy costosos son muy contaminantes. Estas metodologías sintéticas han sido capaces de transformar simples aminas quirales terciarias en alcaloides biológicamente importantes como la (–)-paroxetine (antidepresivo), (+)-pirlaroxide (repelente de hormigas cortadores de hojas *Atta cephalotes*), la (–)-tedanalactam, la (+)-norbalasubramida y un 1-*N*-iminoazúcar inhibidor de la biosíntesis de la glucosidasa y glicolípidos (Figura 1).



SIMPOSIO 8

"Sensores 2016.", Coordinadores: Dra. Carolina Godoy y Dr. Anatoli Yatsimirski, Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos y Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México

"Sensores químicos y biosensores para la cuantificación electroquímica de analitos en medio acuoso." Dra. María Teresa Ramírez Silva, Área de Química Analítica, UAM-I.

"Desarrollo de sensores colorimétricos de iones metálicos.", Dr. Mario Alejandro Rivera, Centro de Investigaciones en Óptica

"Sensores basados en nanomateriales autoensamblados para el desarrollo de herramientas de diagnóstico inmediato de enfermedades." Dr. Gustavo Adolfo Zelada Guillén, Facultad de Química, UNAM

"Quimiosensores para análisis biológicos basados en receptores luminiscentes.", Dr. Alejandro Dorazco González, Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable, UNAM

Simposio 8

"SENSORES 2016."

Coordinadores: Dra. Carolina Godoy y Dr. Anatoli Yatsimirski, Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos y Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México

RESUMEN GENERAL

Este simposio tiene como objetivo presentar los últimos avances de la investigación en el área de Sensores Químicos que se desarrolla en el país. Participan investigadores de la Universidad Autónoma Metropolitana, la Universidad Nacional Autónoma de México y el Centro de Investigaciones en Óptica.

Un sensor es un objeto capaz de detectar eventos o cambios en su ambiente y proveer una señal que puede ser eléctrica u óptica. En la actualidad se han desarrollado dispositivos que son capaces de medir analitos empleando un elemento de reconocimiento que le da al dispositivo la característica de selectividad para determinar que hay y cuánto hay de una especie en particular. Esta cuantificación puede hacerse a través de métodos colorimétricos, luminiscentes o bien electroquímicos. La naturaleza de los analitos a ser detectados es diversa desde iones metálicos, aniones inorgánicos, halogenuros, derivados de urea, nucleótidos, neurotransmisores, fármacos, pesticidas, compuestos fenólicos hasta proteínas, virus o bacterias. Se emplean como receptores iminas con grupos aromáticos, moléculas catiónicas fluorescentes con unidades de quinolonio y bisimida, compuestos organometálicos, ionóforos de estructura diversa, β -ciclodextrinas, enzimas hasta materiales nanoestructurados tales como nanotubos de carbono. Los dispositivos diseñados contemplan el desarrollo por ejemplo de quimiosensores en solución acuosa, un papel indicador capaz de detectar iones divalentes de cobre, electrodos de trabajo que actúan como biosensores en medio acuoso o sistemas biomiméticos supramoleculares en estado sólido con potencial aplicación en diagnóstico clínico inmediato de enfermedades en tiempo real en muestras líquidas.

Las conferencias de los invitados incluirán la preparación y caracterización química de los receptores, la descripción de los elementos de reconocimiento, la metodología de identificación y cuantificación de los analitos, así como el diseño de los dispositivos además de su uso y aplicación como quimiosensores y/o biosensores.



"SENSORES QUÍMICOS Y BIOSENSORES PARA LA CUANTIFICACIÓN ELECTROQUÍMICA DE ANALITOS EN MEDIO ACUOSO."

Dra. María Teresa Ramírez Silva, Área de Química Analítica, UAM-I.

SEMBLANZA

Doctorado en Ciencias Química, Universidad Autónoma Metropolitana 1996, Estancia en la Universidad Autónoma de Barcelona 1993.

Nivel 3 del SNI, formación de recursos humanos (69), Posdoctorado 3, Doctorado 17, Maestría 20 y Licenciatura 29.

Artículos de Investigación revistas con arbitraje 58 indizadas 108, docencia con arbitraje 13 indizadas 3 y libros 3

500 cursos de licenciatura, maestría y doctorado.

Obtuve el premio a la Investigación de Ciencia Básica 2007, 2009 y 2012 en la UAM

Evaluadora de: PIFI, PNPC, Conacyt, Premio Nacional de Ciencias y Artes 2011, CONAEQ

Participación en EGEL.

RESUMEN

En la actualidad se han desarrollado dispositivos químicos que son capaces de medir diferentes analitos en matrices complejas de una manera sencilla, éstos son desarrollados en la mayoría de los casos, utilizando un elemento de reconocimiento que le da al dispositivo las características de selectividad para determinar que hay y cuánto hay de una especie en particular, los neurotransmisores, fármacos, pesticidas, compuestos fenólicos (involucrados en la determinación de capacidad antioxidante), entre otros compuestos de interés, generalmente son estudiados en medios no acuosos, en esta plática se presenta el desarrollo de sensores químicos y métodos de cuantificación en medio acuoso para este tipo de compuestos, así como las diferentes modificaciones que se han llevado a cabo en los sensores y en el medio acuoso de trabajo para que este tipo de especies químicas permanezcan sin alteraciones químicas durante el tiempo de estudio.

"DESARROLLO DE SENSORES COLORIMÉTRICOS DE IONES METÁLICOS."

Dr. Mario Alejandro Rivera, Centro de Investigaciones en Óptica

SEMBLANZA

Obtuvo el título de Químico Industrial por la Universidad Veracruzana en el 2001, consiguió el grado de Doctor en Ciencias Químicas en el departamento de Química de CINVESTAV-IPN en el 2007, es miembro del SNI desde el año 2009, nivel II. Realizó una estancia posdoctoral en el Laboratoire de photophysique et photochimiesupramoléculaires et macromoléculaires (PPSM) de la Escuela Normal Superior de Cachan (Francia) en el 2009. Ha publicado un total de 38 artículos científicos en revistas internacionales con riguroso arbitraje. Ha dirigido un total de 14 tesis de licenciatura y 3 de maestría, actualmente se encuentran en proceso 2 tesis de doctorado. Sus líneas de investigación se relacionan con el diseño, la síntesis, caracterización química y óptica de moléculas orgánicas para su aplicación en la fabricación de dispositivos fotónicos y opto-electrónicos.

RESUMEN



El desarrollo de los sensores químicos colorimétricos de iones metálicos en solución acuosa es de gran importancia para las ciencias biomédicas y medioambientales debido principalmente a los efectos nocivos en la salud y en el medio ambiente de algunos. En el presente trabajo se reporta el estudio de una familia de Iminas o bases de Schiff como posibles sensores colorímetros de iones metálicos disueltos en agua. Estas iminas fueron sintetizadas con buenos rendimientos usando calentamiento por microondas y su estructura química se corroboró por difracción de rayos X. El diseño de estas iminas tiene como finalidad su aplicación como posibles sensores químicos colorimétricos de iones metálicos disueltos en agua, por lo cual, se evaluó la estabilidad de las iminas en dicho disolvente. Posteriormente, se estudió la selectividad de las iminas para la detección específica de iones metálicos indicado por un cambio de color tanto en solución como en impregnadas en papel. A partir de estos resultados se desarrolló papel indicador capaz de detectar el ion cobre disuelto en agua mediante un cambio de color observable a simple vista, el cual fue corroborado por espectroscopia de absorción. Dicho sistema tiene un límite de detección de 5×10^{-5} M a simple vista, el cual fue determinado utilizando el estándar que indica el protocolo de la norma mexicana para la detección colorimétrica de iones Cobre (Norma Mexicana NMX-AA-66-1981, "Análisis de agua determinación de cobre método colorimétrico de la Neocuproina" límite de detección de 1×10^{-4} M).

"SENSORES BASADOS EN NANOMATERIALES AUTOENSAMBLADOS PARA EL DESARROLLO DE HERRAMIENTAS DE DIAGNÓSTICO INMEDIATO DE ENFERMEDADES."

Dr. Gustavo Adolfo Zelada Guillén, Facultad de Química, UNAM

SEMBLANZA

Químico por la FQ-UNAM, trabajó en el Departamento de Química Analítica de la FQ-UNAM de 2004 a 2005, en la compañía P&G de 2005 a 2007 y simultáneamente en la FQ-UNAM en 2007. En 2008, obtuvo el grado de Maestría en Nanociencia y Nanotecnología por la Universitat Rovira i Virgili (España) e inició los estudios de Doctorado en Nanociencia y Nanotecnología en la misma universidad, en donde también ocupó el cargo de Personal Docente Investigador entre 2009 y 2011 y el de Colaborador Investigador del Instituto de Investigación Sanitaria P. Virgili, obteniendo el grado de Doctor en 2011. Entre 2012 y 2013 fue Investigador Experto Marie Curie de la Unión Europea, en la compañía Polymaterials AG, en Kaufbeuren, Alemania. Entre 2013 y 2014, fue Investigador Científico en el Instituto Leibniz de Materiales Interactivos - DWI, en Aachen, Alemania. Desde 2014 es Profesor-Investigador Titular T.C. en la FQ-UNAM, y actualmente es SNI 1 del CONACYT

RESUMEN

Este trabajo presenta el diseño de herramientas de diagnóstico inmediato de enfermedades a partir de sensores nanoestructurados basados en sistemas autoensamblados derivados de nanomateriales funcionalizados con sistemas supramoleculares de tipo biomolecular y biomimético.

"QUIMIOSENSORES PARA ANALÍTOS BIOLÓGICOS BASADOS EN RECEPTORES LUMINISCENTES."

Dr. Alejandro Dorazco González, Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable, UNAM

SEMBLANZA

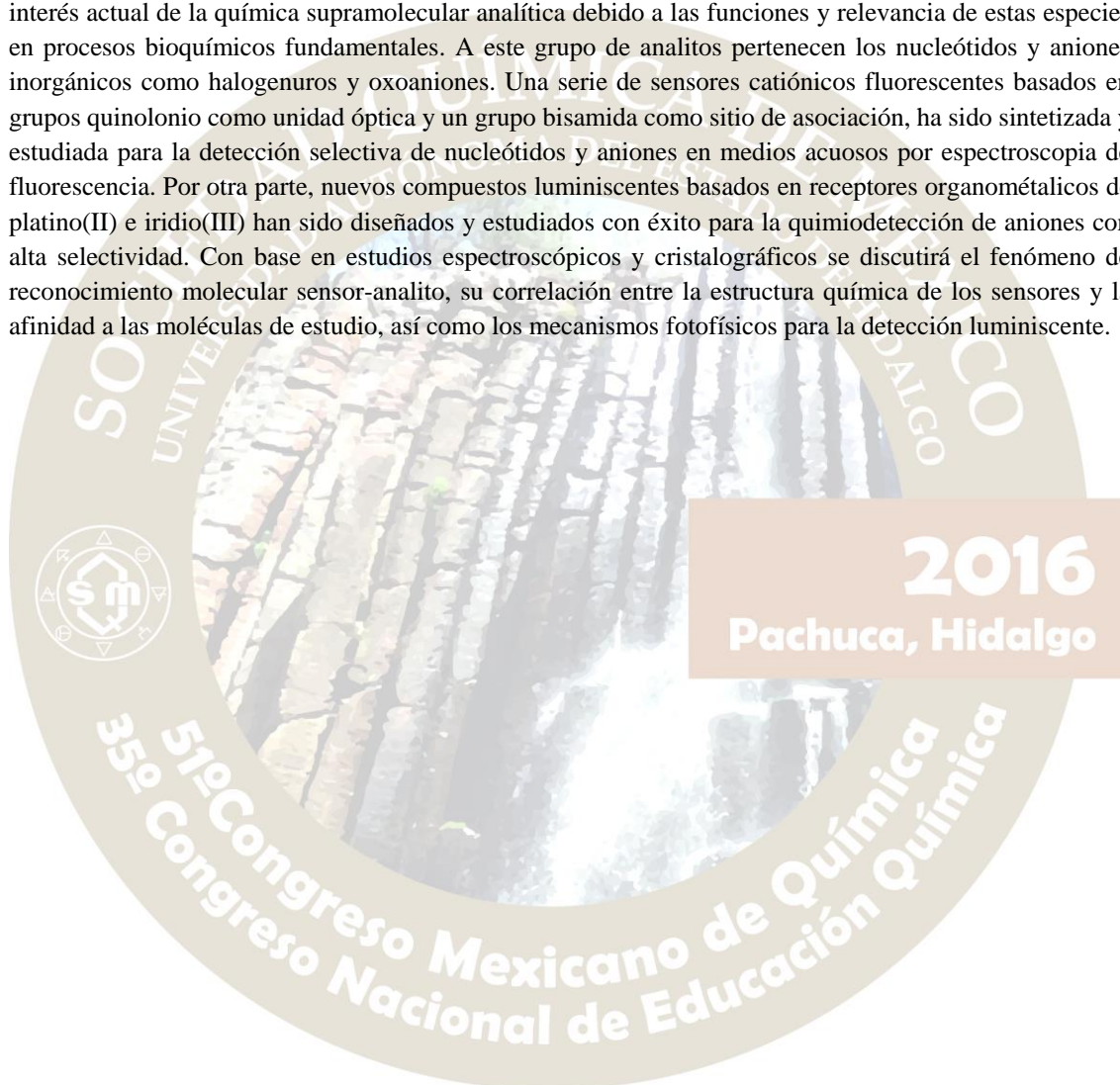
Es un investigador nacido en la Ciudad de México. En 2013, se unió al Instituto de Química-CCIQS como Investigador Asociado T.C. realizando proyectos de investigación independientes en quimiosensores para análisis biológicos basados en receptores luminiscentes. Se graduó de Químico con honores por la Universidad Autónoma del Estado de México (2005). Curso maestría en Ciencias Químicas en la Universidad Nacional Autónoma de México (2006) con estudios en ingeniería de cristales. El obtuvo su



Doctorado en Química Supramolecular en la misma universidad (2010), investigando nuevos receptores artificiales para especies con relevancia biológica bajo la dirección del Prof. Yatsimirsky. Posteriormente fue distinguido con una beca de postdoctorado (2011-2012) por el Swiss Federal Institute of Technology Lausanne (EPFL) para realizar investigación en sensores moleculares. Es miembro del Sistema Nacional de Investigadores, Sociedad Química de México, American Chemical Society y de la Swiss Chemical Society

RESUMEN

El desarrollo de quimiosensores selectivos para analitos biológicos en medios acuosos es un campo de interés actual de la química supramolecular analítica debido a las funciones y relevancia de estas especies en procesos bioquímicos fundamentales. A este grupo de analitos pertenecen los nucleótidos y aniones inorgánicos como halogenuros y oxoaniones. Una serie de sensores catiónicos fluorescentes basados en grupos quinolonio como unidad óptica y un grupo bisamida como sitio de asociación, ha sido sintetizada y estudiada para la detección selectiva de nucleótidos y aniones en medios acuosos por espectroscopia de fluorescencia. Por otra parte, nuevos compuestos luminiscentes basados en receptores organometálicos de platino(II) e iridio(III) han sido diseñados y estudiados con éxito para la quimiodetección de aniones con alta selectividad. Con base en estudios espectroscópicos y cristalográficos se discutirá el fenómeno de reconocimiento molecular sensor-analito, su correlación entre la estructura química de los sensores y la afinidad a las moléculas de estudio, así como los mecanismos fotofísicos para la detección luminiscente.





SIMPOSIO 9

Química Teórica del Estado Sólido, Coordina: Dr. Alberto Vela, Departamento de Química, CINVESTAV-IPN

"Estudio sobre la reactividad de las superficies de hidróxidos dobles laminares usando la teoría de los funcionales de la densidad." Dr. Joel Ireta Moreno. Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa.

"Computational Methods in Solid State Chemistry and their Applications to Producing and Storing Clean Energy." Dr. José Luis Mendoza Cortes. Department of Chemical and Biomedical Engineering, College of Engineering in Florida State University.

"Modelado de superficies catalíticas." Dr. José Miguel Mora Fonz. Profesor-Investigador, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco.

"Enlaces y transformaciones químicas en materiales. Estudios ab initio sobre modelos periódicos." Dr. Claudio Zicovich Wilson. Profesor-Investigador del Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas de la UAE-Morelos.

Simposio 9

Inicia 16:00 - 18:30

QUÍMICA TEÓRICA DEL ESTADO SÓLIDO

Coordina: Dr. Alberto Vela, Departamento de Química, CINVESTAV-IPN

RESUMEN GENERAL

Se cubrirán cuatro ejemplos de aplicación de diversas metodologías que permiten el estudio de la estructura electrónica de sistemas periódicos (sólidos) a problemas de interés en Química. Se presentan resultados que se obtiene con dos tipos de bases: localizadas (gaussianas) y ondas planas. Utilizando estos métodos, se presentan aplicaciones a zeolitas, hidrotalcitas, polímeros, producción y almacenamiento de energía limpia y a la descripción teórica de superficies catalíticas.

"ESTUDIO SOBRE LA REACTIVIDAD DE LAS SUPERFICIES DE HIDRÓXIDOS DOBLES LAMINARES USANDO LA TEORÍA DE LOS FUNCIONALES DE LA DENSIDAD."

Dr. Joel Ireta Moreno. Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa.

SEMBLANZA

El Dr. Ireta se doctoró en la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa (UAMI) en 1999. Después de una estancia como becario Humboldt en el Instituto Fritz-Haber de Alemania, se incorporó al depto. de Química de la UAMI en 2007. El Dr. Ireta se ha especializado en el estudio de interacciones no covalentes en materiales orgánicos e inorgánicos usando métodos de la física del estado sólido.

RESUMEN

Los hidróxidos dobles laminares, también conocidos como arcillas aniónicas o compuestos tipo hidrotalcita, son una familia de materiales cuya estructura consiste en láminas apiladas de hidróxidos de metales



divalentes y trivalentes, y espacios interlaminares que alojan especies aniónicas junto con moléculas de agua. Dentro de sus diversas aplicaciones se encuentra la de catalizar la reacción de la cianoetilación del metanol. En la presente contribución se detallarán una serie de experimentos computacionales diseñados para elucidar la relación entre la actividad catalítica de los hidróxidos dobles laminares y su composición. Particularmente se analiza la estabilización del anión metóxido, paso intermedio en la reacción de la cianoetilación del metanol, sobre la superficie de los hidróxidos dobles laminares compuestos por Mg/Al, Mg/Ga, Zn/Al y Zn/Ga. Usando la teoría de los funcionales de la densidad, modelos de superficies infinitas y el código VASP, se muestra que procesos difusivos sobre la superficie y la cercanía de los sitios activos sobre ella, son determinantes de la reactividad de estos materiales.

"COMPUTATIONAL METHODS IN SOLID STATE CHEMISTRY AND THEIR APPLICATIONS TO PRODUCING AND STORING CLEAN ENERGY."

Dr. José Luis Mendoza Cortes. Department of Chemical and Biomedical Engineering, College of Engineering in Florida State University.

SEMBLANZA

I was born in the state of Oaxaca, Mexico. I obtained my B.Sc. (Honors) from Tec de Monterrey in 2008 with a visit to UCLA. In 2005 I worked at the University of Illinois at Urbana-Champaign with Prof. Jerrey S. Moore as a Snyder fellow. From 2006 to 2008 I worked with Prof. Omar M. Yaghi where I developed the first 3D-COFs and chemoinformatics of the secondary building blocks for MOFs. For this work we received the AAAS Newcomb Cleveland Prize, 2007 (AAAS's oldest award, best paper in Science magazine). By the end of 2007 I started doing my B.Sc. thesis at the lab of Prof. William A. Goddard III in collaboration with the lab of Prof. Yaghi. Then in the fall of 2008 I joined Caltech's grad school program which I finished in the spring of 2012 working in quantum mechanics, molecular dynamics and statistical mechanics. In 2013, I joined the Joint Center for Artificial Photosynthesis (JCAP) and I was a Staff Scientist at Caltech until Nov 4th, 2013. Then I worked in the Lawrence Berkeley National Laboratory (Materials Division) and in Berkeley (Chemistry Dept.) with Martin Head-Gordon. In January 2015, I started as assistant professor in the Department of Chemical and Biomedical Engineering at the College of Engineering in Florida State University.

RESUMEN

Computational Solid State Chemistry algorithms are now powerful enough that they can predict many properties of materials and molecules before they are synthesized. By implementing and developing new approaches to calculate materials and chemical properties in supercomputers, we have predicted over 100,000 materials for energy storage and catalysis.[1-4] The computations predicted several new materials which were made and tested in the lab, leading to the discovery and development of five new materials that overcome the Department of Energy (DOE) targets for CH₄ and H₂ storage as well as new mechanistic insights allowing to design better catalysts.[5-6] The intend of all this work is towards developing alternative ways to generate and store energy; e.g. conversion of sunlight into chemical fuels. Our approach is thus inspired in Nature, where sunlight, water, and carbon dioxide is converted to chemical fuels called carbohydrates. However, we intend to convert sunlight and water into another fuel called molecular hydrogen. The advantage of "burning" molecular hydrogen in fuel cell reaction is that it can generate electricity and as only side product is water vapor. Thus we can close the cycle and approach a carbon neutral source of energy and storage that can be restored. [5-6] In a recent effort to close the loop towards a possible sustainable and clean energy, we found a new strategy for tuning the band gap of layered materials to capture light which may couple to its intrinsic water-splitting catalytic properties, thus resembling photosynthesis.[7] What this means is that we can capture sunlight effectively with abundant and cheap elements, which is also good at converting water into molecular Hydrogen and Oxygen. Our



ultimate goal is to use sunlight, H₂O and CO₂ and generate chemical fuels easier to handle such as methanol or ethanol.

References: (1) Mendoza-Cortes, J. L.; et al. *J. Phys. Chem. A* 2010, 114, 10824. (2) Mendoza-Cortes, J. L.; et al. *J. Phys. Chem. A* 2011, 115, 13852. (3) Mendoza-Cortes, J. L. et al, *J. Phys. Chem. A* 2012, 116, 1621. (4) Mendoza-Cortes, J. L.; et al, *J. Phys. Chem. Lett.* 2012, 3, 2671. (5) J. L. Mendoza-Cortes, et al. *J. Am. Chem. Soc.*, 2013, 1073. (6) J. L. Mendoza-Cortes, et al. *Metalloproteins*, 2015 (7) Mendoza-Cortes, J. L., et al *J. Phys. Chem. C*, 2015, 119, 22838.

"MODELADO DE SUPERFICIES CATALÍTICAS."

Dr. José Miguel Mora Fonz. Profesor-Investigador, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco.

SEMBLANZA

Obtuvo su licenciatura en Ingeniería Química en la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, posteriormente realizó una maestría en Ciencias obteniendo el grado con una tesis experimental-teórica en acidez de zeolitas naturales. El doctorado lo obtuvo en la "University College London" donde investigó la nucleación de zeolitas usando herramientas de química computacional. Realizó un posdoctorado en Londres trabajando en la condensación de aluminatos para formar gibbsita, además estudió la incorporación de arsénico en piritita. En Berlín realizó una estancia posdoctoral estudiando los sitios ácidos de zeolitas. José Miguel actualmente es profesor e investigador en la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco. Sus principales temas de interés son la aplicación de química computacional en la nucleación de minerales y superficies catalíticas.

RESUMEN

Las técnicas de química computacional y las capacidades de computo que están disponibles en estos días proveen de una valiosa herramienta a múltiples disciplinas de la Ciencia, desde el estudio de proteínas hasta reacciones químicas en polvo interestelar. Uno de estos campos, de clara importancia por sus implicaciones en el mejoramiento ambiental y la producción de nuevos combustibles, es la catálisis. Las diferentes superficies que puede presentar un sólido, la interacción que ocurren posterior a la adsorción de moléculas sobre superficies sólidas, los mecanismos de difusión estos adsorbatos sobre la superficie, las reacciones que tienen lugar en los llamados sitios activos de la superficie, el papel que tienen los defectos de las superficies, la adición de una segunda fase dispersa sobre la superficie principalmente cúmulos de átomos de transición y transición interna como sitio activo y la posterior desorción de las moléculas producto de las reacciones en la superficie, son todos ellos aspectos de relevancia en estudios de catálisis heterogénea, y son estos accesibles a su estudio con herramientas de química computacional.

En este trabajo mostraremos como algunos de los aspectos de importancia en la catálisis heterogénea pueden ser estudiados con métodos de química computacional. En particular la interacción adsorbato-superficie y las conformaciones adoptadas por diferentes moléculas orgánicas que contienen un heteroátomo de azufre, nitrógeno u oxígeno en la superficie de un soporte catalítico utilizado ampliamente, TiO₂. Los compuestos orgánicos, principalmente aquellos con anillos que contienen azufre, nitrógeno y oxígeno en su estructura, forman una importante parte de los precursores de contaminantes en combustibles fósiles, que deben ser removidos, para evitar daños a la salud de seres humanos y otros seres vivos. Los estudios realizados utilizando la teoría de funcionales de la densidad, DFT (del inglés density functional theory) muestran que es posible entender mejor como se encuentran adsorbidas estas moléculas en la superficie del catalizador, cual es la energía de adsorción y con esto contribuir a la construcción un mecanismo plausible de la remoción de estas especies contaminantes.



"ENLACES Y TRANSFORMACIONES QUÍMICAS EN MATERIALES. ESTUDIOS AB INITIO SOBRE MODELOS PERIÓDICOS."

Dr. Claudio Zicovich Wilson. Profesor-Investigador del Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas de la UAE-Morelos.

SEMBLANZA

Se graduó como Licenciado en Ciencias Químicas (Química Orgánica) en la Universidad Nacional de Buenos Aires, Argentina. Obtuvo el doctorado dentro de la especialidad "Química Física" por la Universidad de Valencia, España, con la tesis "Control orbital en reacciones catalizadas por zeolitas de poro grande", que obtuvo la máxima calificación: Apto cum laude. Sus líneas de investigación principales son: A.- El desarrollo de códigos computacionales para la química cuántica de sistemas periódicos (ver CRYSTAL, <http://www.crystal.unito.it>). B.- Aplicaciones al estudio teórico de propiedades químicas de materiales. Actualmente es Profesor-Investigador Titular B del Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas de la UAE-Morelos. Es nivel III del SNI. Tiene más de 130 publicaciones internacionales y 5000 citas bibliográficas (Web of Science).

RESUMEN

En esta plática se ilustra el uso actual de métodos de cálculo ab initio sobre modelos periódicos para entender el comportamiento químico de los materiales. Para ello se toman tres ejemplos de características diferentes, a saber: estudio de la interacción dopante-polímero en Li-Poliacetileno, combinación química de defectos de vacancia e intersticiales del diamante y transición de fase épsilon-zeta del oxígeno cristalino a presiones del orden de 100 GPa. En estas investigaciones se usó el programa CRYSTAL para el cálculo de la estructura electrónica de sistemas periódicos el cual considera bases de orbitales atómicos. Esta aproximación permite tratar sistemas periódicos infinitos de diferente dimensionalidad con el mismo nivel de teoría y por ello también comparar directamente resultados de cálculos periódicos con cálculos moleculares usando las aproximaciones más usuales en la química cuántica.

Pachuca, Hidalgo

51º Congreso Mexicano de Química
35º Congreso Nacional de Educación Química