

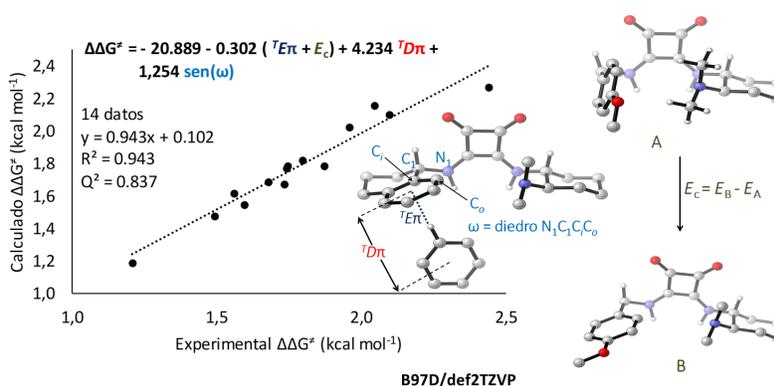


Evaluación de interacciones CH...? en el diseño de organocatalizadores bifuncionales

Howard Yoav Díaz Salazar, Wilmer Esteban Vallejo Narváez, Marcos Hernández Rodríguez

Instituto de Química, UNAM

Los organocatalizadores bifuncionales han sido ampliamente explorados en el campo de la síntesis asimétrica.¹ En estos catalizadores, un grupo donador de enlaces de hidrógeno y una amina terciaria realizan cooperativamente una activación simultánea de nucleófilo y electrófilo en una configuración espacial adecuada.² La adición de Michael de compuestos 1,3-dicarbonílicos a α -nitroalquenos es la reacción de formación de enlaces carbono-carbono más conocida para evaluar el alcance de los catalizadores bifuncionales.³ Con esta reacción modelo se hizo un análisis de escuaramidas con diferentes sustituyentes bencilo con el objetivo de modificar la densidad electrónica del anillo aromático del catalizador y comprender el impacto de la interacción CH...? en la enantioselectividad de la reacción. Calculamos los parámetros ω reportados por Sigman y colaboradores⁴ así como los parámetros conformacionales necesarios para que dicha interacción ocurra y los empleamos en un análisis de regresión lineal multivariable (B97D/def2TZVP).⁵ Identificamos que la escuaramida derivada de (S)-1-aminotetralina ofrece la mejor actividad catalítica, así como la selectividad más alta. Para este sistema se calculó el estado de transición (PCM(tolueno)-B97D/TZVP)⁶ y se analizaron las interacciones no covalentes empleando QTAIM e IQA. Demostramos que la enantioselectividad de la reacción depende de la fortaleza de las interacciones CH...? entre catalizador y sustrato en el estado de transición.





Referencias:

1. Asymmetric Organocatalysis, ed. B. List, Springer, Berlin, 2010.
2. Miyaji, R.; Asano, K.; Matsubara, S. *J. Am. Chem. Soc.* 2015, 137, 6766-6769.
3. (a) Kótai, B.; Kardos, G.; Hamza, A.; Farkas, V.; Pápai, I.; Soós, T. *Chem. Eur. J.* 2014, 20, 5631–5639. (b) Jiménez, E. I.; Vallejo-Narváez, W. E.; Román-Chavarría, C. A., Vazquez-Chavez, J., Rocha-Rinza, T.; Hernández-Rodríguez, J. *Org. Chem.* 2016, 81, 7419-7431. (c) Jiménez, E. I.; Vallejo Narváez, W. E.; Rocha-Rinza, T.; Hernández-Rodríguez, M. *Catal. Sci. Technol.* 2017, 7, 4470–4477 (d) Yang, C-; Wang, J.; Liu, Y.; Ni, X.; Li, X.; Cheng, J.-P. *Chem. – Eur. J.* 2017, 23, 5488–5497.
4. Orlandi, M.; Coelho, J. A. S.; Hilton, M. J.; Toste, F. D.; Sigman, M. S. *J. Am. Chem. Soc.* 2017, 139, 6803-6806.
5. (a) Santiago, C. B.; Guo, J.-Y.; Sigman, M. S. *Chem. Sci.*, 2018, 9, 2398-2412. (b) Reid, J. P.; Sigman, M. S. *Nature Reviews Chemistry*, 2018, 2, 290-305.
6. Rooks, B. J.; Haas, M. R.; Sepúlveda, D.; Lu, T.; Wheeler, S. E. *ACS Catal.* 2015, 5, 272–280.



TDDFT study of excited states of Br₂ in clathrates cages

Cercis Morera Boado, Margarita Bernal Urruchurtu and Ramón Hernández Lamonedá

Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Ave. Universidad 1001, Cuernavaca 62209, Morelos, Mexico, Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Ave. Universidad 1001, Cuernavaca 62209, Morelos, Mexico, Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Ave. Universidad 1001, Cuernavaca 62209, Morelos, Mexico

The ultraviolet and visible spectra of halogen clathrates have been the subject of several experimental studies.¹ The main interest in the structure and physicochemical properties of these cages relies on the remarkable potential applications in energy and environment, in addition to open questions in basic science. The most extensive and detailed experimental information about these systems have been obtained for bromine, where UV-vis spectra were analyzed for polycrystalline tetragonal structure and cubic simple samples among other. A large and characteristic blue-shift have been obtained, which is due to halogen bonding and can be understood in terms of simple molecular orbital concepts. Ab initio calculations have been extensively used in order to reproduce experimental shifts, and guest-host intermolecular potentials for ground and excited states of bromine inside clathrate cages.^{2,3} However, the search for a less computationally demanding method that allows exploring the dynamics of the Br₂ inside the 51262 particular cage as well as its UV-vis spectra introduces us to TDDFT. Therefore, we use TDDFT with different density functionals ranging from m-GGAs to Hybrid and Range Separated Hybrid (RSH) types to understand the electronic shifts, the halogen bonding and the dynamics of Br₂ inside the 51262 particular cages. Preliminary results indicate the good performance of RSH in reproducing experimental and ab-initio calculated electronic shifts.



Referencias:

1. G. Kerenskaya et. al., J. Phys. Chem. A 110, 13792–13798 (2006).
2. M. I. Bernal-Uruchurtu et al., J. Phys. Chem. A. 119, 3452-459 (2015).
3. F. A. Batista-Romero et. al., J. Chem. Phys. 146, 144311 (2017)



Las diferentes formas de apilar un material bidimensional con estructura hexagonal

Jessica Arcudia, Miguel Eduardo Cifuentes Quintal, Gabriel Merino

Departamento de Física Aplicada, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Unidad Mérida, km. 6 Antigua carretera a Progreso. Apdo. Postal 73, Cordemex, 97310 Mérida, Yuc., México.

El apilamiento de materiales bidimensionales (2D) es uno de los factores más importantes en la fabricación de estructuras de van der Waals (vdW), ya que sus propiedades dependen directamente de la manera en que sus capas se acomodan. Sin embargo, a pesar del gran número de estudios en este tema,¹⁻⁴ no hay consenso sobre el total de combinaciones para ciertos sistemas, generando que no se tenga claro cuál es la estructura de mínima energía. En este trabajo, se encontró por medio del análisis combinatorio las diferentes posibilidades de apilar N capas de un material 2D con estructura hexagonal considerando su composición y buckling. En particular, se analizaron sistemas bicapa a través de métodos gráficos, donde se hallaron 2 formas de apilar materiales homonucleares planos; 5 para materiales heteronucleares planos y homonucleares distorsionados; y 16 arreglos para materiales heteronucleares distorsionados. Como ejemplo, se estudiaron las bicapas de fosforeno y arseneno hexagonal (Figura 1), para las cuales no hay un acuerdo sobre el número total de apilamientos. Por medio de la teoría del funcional de la densidad, se calcularon las propiedades electrónicas donde se determinó que la estructura más favorable para el fosforeno es la forma A1B-1 y para el arseneno la A1B1, cuyas configuraciones se reportan por primera vez. Estos hallazgos resaltan la importancia de considerar todas las configuraciones de apilamiento posibles en la búsqueda de la estructura de mínima energía.

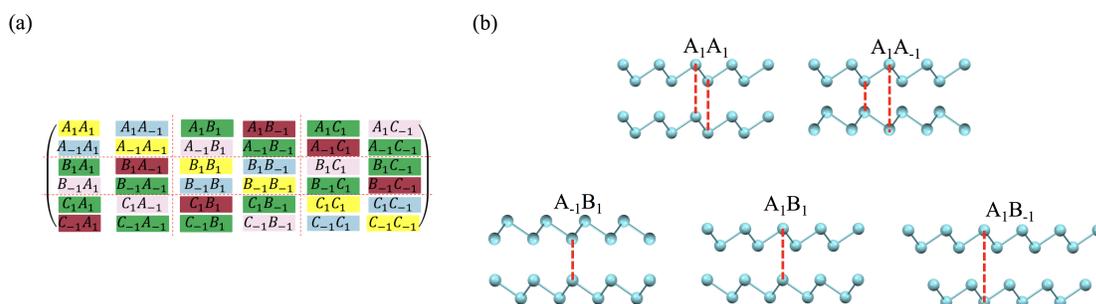


Figura 1. (a) Todas las posibilidades para apilar bicapas homonucleares distorsionadas acomodadas en forma matricial. (b) Las cinco configuraciones de apilamiento diferentes para este tipo de materiales.



Referencias:

- [1] Pontes, R.; Miwa, R.; da Silva, A.; Fazzio, A.; Padilha, J. Phys. Rev. B. 2018, 97, 235419.
- [2] Ahn, J.; Hong, I.; Kwon, Y.; Clay, R.; Shulenburger, L.; Shin, H.; Benali, A. Phys. Rev. B. 2018, 98, 085429.
- [3] Cao, H.; Yu, Z.; Lu, P. Superlattice Microst. 2015, 86, 501-507.
- [4] Kadioglu, Y.; Santana, J.; O'zaydin, H.; Ersan, F.; Aktu'rk, O.; Aktu'rk, E.; Reboredo, F. J. Chem. Phys. 2018, 148, 214706.



Exploración teórica de 2,2'-bipiridinas como electrolitos activos en baterías de flujo

Mariano Sánchez-Castellanos, Martha M. Flores-Leonar, Zaahel Mata-Pinzón, Humberto G. Laguna, Karl M. García-Ruiz, Sergio S. Rozenel, Víctor M. Ugalde-Saldívar, Rafael Moreno-Esparza, Joep J. H. Pijpers, Carlos Amador-Bedolla.

Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Department of Chemistry, University of Toronto, Instituto Nacional de Electricidad y Energías Limpias

Las baterías de flujo orgánicas acuosas representan una opción más barata y amigable con el medio ambiente que los dispositivos comerciales actuales empleando vanadio como electrolito activo. En este rubro el espectro de moléculas que han sido estudiadas hasta el momento no es muy amplio y abarca básicamente las familias de quinonas, naftoquinonas, antraquinonas, derivados del viológeno y derivados del TEMPO. Esta aparente limitación es precisamente la que abre las puertas para explorar teóricamente nuevos materiales orgánicos que pudieran ser utilizados en baterías de flujo orgánicas. En este trabajo, a partir de la estructura de 156 derivados de la 2,2'-bipiridina, cuya síntesis se encuentra reportada en la literatura, se estimaron los potenciales de reducción, la segunda constante de acidez y la solubilidad en agua. Los cálculos fueron calibrados usando datos experimentales de un pequeño subconjunto de moléculas. Se analizó el efecto de los grupos electrodonadores y electroattractores en los potenciales de reducción y la constante de acidez a través del parámetro de Hammett. Los cálculos indican que un conjunto de cinco de los derivados estudiados, tienen potenciales redox, constantes de acidez y una solubilidad adecuados para aplicaciones como materiales electroactivos en baterías de flujo acuosas.



Referencias:

M. Sánchez-Castellanos, M. M. Flores-Leonar, Z. Mata-Pinzón. H. G. Laguna, K. M. García-Ruiz, S. S. Rozenel, V. M. Ugalde-Saldívar, R. Moreno-Esparza, J. J. H. Pijpers and C. Amador-Bedolla. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2019,21, 15823-15832.

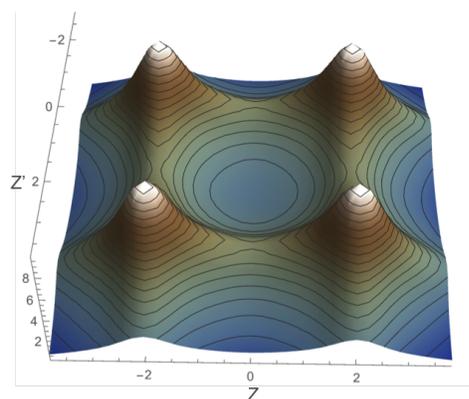
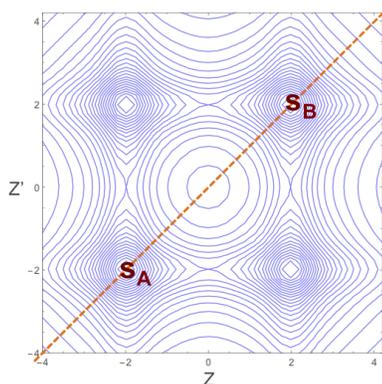


Esquema General para el estudio Topológico de la Matriz Densidad Reducida de Orden Uno

Karem Hernández Lechuga (a), Julio-Manuel Hernández-Pérez (b), Minhuy Hô (a)

a) Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, Morelos, México., b) Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, México.

Recientemente en nuestro grupo hay un renovado interés en la Matriz Densidad Reducida de Orden Uno $\rho(r;r')$ [1], en particular, en su topología, inspirados en la Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas de Bader. En este trabajo presentamos un esquema computacional generalizado para estudiar la topología de $\rho(r;r')$, que, a diferencia de la densidad electrónica, es complicado debido a la presencia de nodos, regiones negativas y positivas. El campo de gradiente $\nabla\rho(r;r')$ divide el mapa de $\rho(r;r')$ en regiones de manera inequívoca. Dicha partición de $\rho(r;r')$ en regiones específicas nos proporciona herramientas para analizar el carácter antienlazante en la molécula. El algoritmo empieza con la colocación de los puntos críticos de $\rho(r;r')$ utilizando el método de optimización de función racional particionada (P-RFO) de Simons et al. [2] adaptado a $\rho(r;r')$, una función de seis dimensiones.





Referencias:

1. Jacinto Sandoval¹Lira, Minhuy Hô, Raymundo Hernández²Esparza, Juan Carlos Ramírez¹, Julio M. Hernández²Pérez, *Theor. Chem. Acc.* (2016) 135:149
2. A. Banerjee, N. Adams, J. Simons, and R. Shepard, *J. Phys. Chem.*, 89, 52 (1985)



Momento Dipolar Restringido en la Teoría de Funcionales de la Densidad (CD-DFT).

Javier Carmona-Espíndola¹, Edgar Nuñez-Rojas¹, Valeria García-Melgarejo², José L. Gázquez², José Alejandro²

¹Departamento de Química, CONACYT-Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco 186, Ciudad de México, 09340, México., ²Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco 186, México, Ciudad de México, 09340, México.

En este trabajo se desarrolla una nueva metodología para describir a un sistema con un momento dipolar restringido, CD-DFT (constrained dipole density functional theory). Se propone un nuevo Lagrangiano el cual tiene la restricción de que el momento dipolar del sistema tenga un valor pre-definido. La solución autoconsistente de esta metodología ofrece una densidad única que minimiza la energía del sistema y reproduce el valor esperado del momento dipolar preestablecido. Con esta metodología se determinaron cargas para la parametrización de campos de fuerza en dinámicas moleculares clásicas [1]. Para este fin, se implementó el método ADCH [2] (atomic dipole moment corrected Hirshfeld population method), el cual corrige las cargas de Hirshfeld para que estas reproduzcan el momento dipolar de la densidad autoconsistente. Los valores predefinidos de los momentos dipolares en los cálculos autoconsistentes son los que reproducen la constante dieléctrica experimental del fluido correspondiente. Los campos de fuerza parametrizados de esta forma llevan a resultados razonables en la predicción de diversas propiedades, como los calores de vaporización, los coeficientes de autodifusión, las viscosidades, las compresibilidades isotérmicas y los coeficientes de expansión volumétrica de sustancias puras.



Referencias:

1. Salas, F. J.; Méndez-Maldonado, G. A.; Núñez-Rojas, E.; Aguilar-Pineda, G. E.; Domínguez, H.; Alejandre, J., Systematic Procedure To Parametrize Force Fields for Molecular Fluids. *J. Chem. Theory Comput.* 2015, 11, 683-693.
2. Lu, T.; Chen, F. W., Atomic dipole moment corrected Hirshfeld population method. *J. Theor. Comput. Chem.* 2012, 11, 163-183.

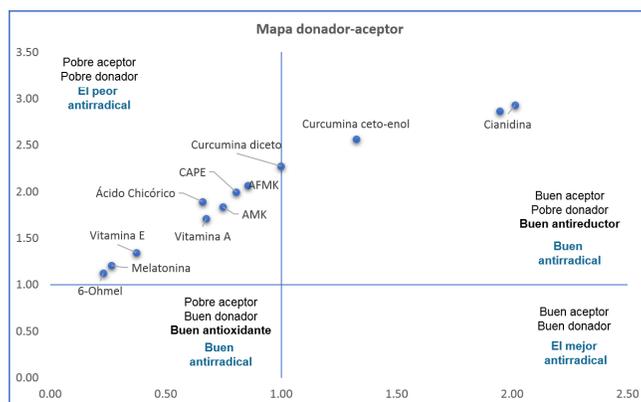


Mecanismos de acción de algunas moléculas antirradicales: endógenas y exógenas

Brenda Manzanilla Viveros, Juvencio Robles García

Universidad de Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas, Departamento de Farmacia, Noria Alta S/N, Col. Noria Alta, Guanajuato, Gto., C.P. 36050, México.

Los antirradicales son moléculas capaces de retardar o inhibir el daño celular causado por el estrés oxidativo, provocado por los radicales libres que se presentan de manera natural en el organismo.¹⁻³ Pero, debido a factores como malos hábitos y contaminación ambiental, los radicales libres pueden ser producidos en altas cantidades provocando diversas enfermedades.² En este trabajo se presentan resultados del estudio teórico-computacional de distintos antirradicales endógenos como la melatonina y tres de sus metabolitos activos y exógenos como vitaminas (vitamina A y E) y compuestos de productos naturales (curcumina y ácido chicórico). Se evaluaron 3 mecanismos de acción antirradical como la transferencia de electrón simple (SET) mediante el mapa donador-aceptor (DAM, Fig. 1) y el mapa total donador-aceptor de electrones (FEDAM); la transferencia de átomos de hidrógeno y la inhibición de la Xantina Oxidasa (XO) en AutoDock.⁴⁻⁷ También, se usaron descriptores de la Teoría de Funcionales de la Densidad Conceptual para evaluar su reactividad y, finalmente, evaluamos su permeabilidad a la membrana, biodisponibilidad y toxicidad. Todos los cálculos fueron realizados en Gaussian09 con el nivel de teoría M06-2X/6-31+G(d)/SMD, elegido de una calibración previa. Por último, para modelar el medio hidrofílico se utilizó agua y para la parte lipofílica, al pentiletanoato, con el modelo de solvente de medio continuo SMD.





Referencias:

Yang, C. S. et al. Antioxidants: Differing Meanings in Food Science and Health Science. *J. Agric. Food Chem.* 66, 3063–3068 (2018).

Sies, H., Berndt, C. & Jones, D. P. Oxidative Stress. *Annu. Rev. Biochem.* 86, 715–748 (2017).

Phaniendra, A., Jestadi, D. B. & Periyasamy, L. Free Radicals: Properties, Sources, Targets, and Their Implication in Various Diseases. *Indian J. Clin. Biochem.* 30, 11–26 (2015).

Galano, A. & Raúl Alvarez-Idaboy, J. Computational strategies for predicting free radical scavengers' protection against oxidative stress: Where are we and what might follow? *Int. J. Quantum Chem.* 119, (2019).

Geerlings, P., De Proft, F. & Langenaeker, W. Conceptual Density Functional Theory. *Chem. Rev.* 103, 1793–1874 (2003).

Martínez, A., Rodríguez-Girones, M. A., Barbosa, A. & Costas, M. Donator acceptor map for carotenoids, melatonin and vitamins. *J. Phys. Chem. A* 112, 9037–9042 (2008).

Galano, A. A first principles investigation on the electron donor ability of synthetic melatonin derivatives: implications for their antioxidant activity. *Theor. Chem. Acc.* 135, 1–12 (2016).



Inhibidores de la corrosión a través de estudios de estructura electrónica

Alejandra Montserrat Navarrete López

Departamento de Ciencias Básicas, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco

El desarrollo de inhibidores de la corrosión basados en compuestos orgánicos es un campo de interés que está creciendo debido a su aplicación en la industria. Un método para proteger a los metales y las aleaciones de un entorno agresivo y de la corrosión, es adicionar especies orgánicas a la solución de contacto para reducir la tasa de corrosión. La mayoría de estos inhibidores son compuestos orgánicos que contienen átomos electronegativos, tales como N,S,P y O; enlaces insaturados, y sistemas conjugados planos incluyendo ciclos aromáticos. [1,2] Grupos de moléculas orgánicas, tales como son las xantinas pueden formar capas protectoras en la superficie del metal con habilidades inhibitoras de la corrosión y que además son amigables con el medio ambiente. Los cálculos de estructura electrónica representan una herramienta para la comprensión e interpretación de diversos fenómenos químicos y resultados experimentales.[3] ¿Es posible comprender la eficiencia inhibitora de la corrosión de dichas moléculas a través del análisis de la estructura electrónica molecular?[4] Para responder ésta pregunta analizaremos a la familia de las xantinas que han sido propuestas como inhibidores de la corrosión y se presenta la actuación de la cafeína sobre dos superficies metálicas. Finalmente pondremos de manifiesto las limitaciones que se presentan para comprender y estudiar de manera global el fenómeno de la inhibición de la corrosión y los alcances que se pueden lograr hasta el momento.



Referencias:

1. Soliman, S. A., Metwally, M. S., Selim, S. R., Bedair, M. A., and Abbas, M. A. (2014). Corrosion inhibition and adsorption behavior of new Schiff base surfactant on steel in acidic environment: Experimental and theoretical studies. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 20(6), 4311-4320.
2. Jacob, K. S., and Parameswaran, G. (2010). Corrosion inhibition of mild steel in hydrochloric acid solution by Schiff base furoin thiosemicarbazone. *Corrosion Science*, 52(1), 224-228.
3. Bedair, M. A. (2016). The effect of structure parameters on the corrosion inhibition effect of some heterocyclic nitrogen organic compounds. *Journal of Molecular Liquids*, 219, 128-141.
4. Kokalj, A. (2010). Is the analysis of molecular electronic structure of corrosion inhibitors sufficient to predict the trend of their inhibition performance. *Electrochimica Acta*, 56(2), 745-755.



Implementación Semidirecta de EPT2 con base auxiliar

Juan Felipe Huan Lew Yee, José Luis Morales, Roberto Flores Moreno, Jorge Martín del Campo Ramírez

Universidad Nacional Autónoma de México, Universidad de Guadalajara

Se presentará una implementación semidirecta de la teoría del propagador del electrón de segundo orden (EPT2) aplicando el ajuste local de la densidad (local density fitting, ldf) sobre la base auxiliar. Esta implementación no guarda las integrales de repulsión electrónica de tres centros (ERIs), sino un objeto tensorial que resulta de aplicar la aproximación de resolución de la identidad a las ecuaciones de EPT2. El objeto tensorial requiere la misma cantidad de memoria que las ERIs, pero permite una mejor gestión de memoria y una división por lotes más regular. Se usa la metodología de Modified Cholesky en la matriz de Coulomb obtenida tras la aplicación de LDF, lo que permite obtener soluciones estables con un bajo costo computacional. Para sistemas grandes el algoritmo resulta más eficiente que una implementación convencional que guarde ERIs, ya que evita la escritura a disco cuando no hay suficiente memoria, también resulta más eficiente que una implementación directa ya que minimiza la cantidad de veces que hay que evaluar las ERIs. En consecuencia, se vuelve una mejor alternativa en tiempo de cómputo respecto a otros algoritmos. El algoritmo fue implementado en paralelo con OpenMP dentro del software Nagual. Se presentarán comparaciones del algoritmo propuesto contra el algoritmo convencional, así como contra el algoritmo directo. También se presentarán resultados de sistemas grandes, como fullerenos, para demostrar la aplicabilidad del algoritmo.



Figura 1: C60



Figura 2: C70

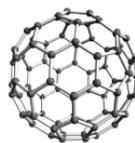


Figura 3: C82

Cuadro 1: Energías de ionización para fullerenos, números de funciones de base (N) y tiempos de cómputo con el algoritmo semidirecto para EPT2. Se usó base 6-311+G(d) con base auxiliar GEN-A2*.

Molécula	EP2 (eV)	KT (eV)	Exp.(eV)	N	N_{aux}	$N_{batches}$	Tiempo EPT2(h)
C60	7.075	7.909	7.6	1380	5640	3	4.95
C70	7.004	7.562	-	1610	6580	4	9.00
C82	6.261	6.947	-	1886	7708	7	16.19



Referencias:

R. Flores-Moreno, J. A. Guerrero-Cruz, A. Venegas-Reynoso, H. N. Gonzalez-Ramirez, J. J. Villalobos-Castro, T. Tamayo-Mendoza, M. A. Diaz-Tinoco, J. A. Flores-Ramos, B. A. Zuniga-Gutierrez, M. U. Delgado-Jaime, J. F. H. Lew-Yee, J. M. del Campo, Nagual 1, Guadalajara Jal., Mexico (2019).

J.D.J. Villalobos-Castro, J.A. Guerrero-Cruz, B. Zuniga-Gutierrez, and R. Flores-Moreno, Computational and Theoretical Chemistry 1136–1137, 29 (2018).

S.H. Cheng and N.J. Higham, SIAM J. Matrix Anal. & Appl. 19, 1097 (1998).

J.V. Ortiz, Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science 3, 123 (2013).

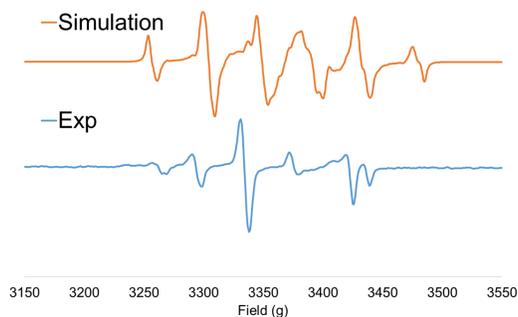


Identificación de radicales libres mediante la simulación de espectros de RPE

Hugo Vazquez-Lima 1, Cándida Pastor-Ramírez 1, Samuel Hernández-Anzaldo 1, Yasmi Reyes Ortega 1, Telesforo Jesús Morales-Juárez 2, Ivan Garcia-Orozco 3

1 ICUAP, BUAP, 2 Facultad de Química, UAEMex, 3 Laboratorio de Investigación y Desarrollo de Materiales Avanzados, Facultad de Química, UAEMex

La identificación de radicales orgánicos en ligantes no inocentes coordinados a metales de transición requiere amplia evidencia espectroscópica para corroborar su existencia. El modelado computacional puede fungir como intérprete de estos resultados experimentales. En este trabajo presentamos un estudio teórico-práctico donde un compuesto de coordinación de Ni(II) con ligantes α -oxoditioéster presenta comportamiento paramagnético originado por un radical orgánico en el estado sólido pero pierde carácter paramagnético en disolución. Cálculos de DFT de diferentes conformaciones y tautómeros fueron comparados con la estructura cristalográfica. Esto permitió establecer la localización del radical orgánico. La simulación del espectro de RPE y de los tensores de acoplamiento hiperfino mediante DFT concuerda con los espectros experimentales. Finalmente, el modelado computacional de la restricción sistemática en un ángulo diedro del ligante permitió dar una explicación a los diferentes comportamientos magnéticos en estado sólido y en disolución.





Referencias:

Ninguna



Coordinación de aluminio a sistemas bioquímicos.

Rafael Grande-Aztatzi, Elena Formoso, Jon I. Mujika, Jesus M. Ugalde, Xabier Lopez

Euskal Herriko Unibertsitatea (UPV/EHU) y Donostia International Physics Center (DIPC). Donostia, 2018, Euskadi, España.

El aluminio es el tercer elemento más abundante en la corteza terrestre, pero no es un elemento esencial en ningún sistema vivo y ha sido excluido de los ciclos bióticos; sin embargo, debido a la intervención humana y al amplio uso en la vida diaria, su biodisponibilidad se ha incrementado y se ha incorporado en sistemas biológicos a lo largo del último siglo. Desafortunadamente, su toxicidad ha sido relacionada con varias enfermedades de significativo riesgo para la salud humana.[1,2] En los últimos años, hemos estudiado la interacción de este metal con diferentes especies de interés bioquímico, tales como ligandos de bajo peso molecular, como citratos, biofosfatos, entre otros, así como fragmentos de proteínas relacionadas con la enfermedad de Alzheimer, para entender la participación del aluminio en los procesos de agregación de neurofilamentos. Todos los estudios han sido desarrollados usando métodos teóricos, analizando las energías de afinidad de los ligandos y así determinar el tipo de especies que pueden estar presentes en los ambientes biológicos para entender los efectos del aluminio en ellos.[3-5]



Referencias:

- [1] C. Exley, *Journal of Inorganic Biochemistry*, 97, 1 (2003).
- [2] L. Tomljenovic, *Journal of Alzheimer's Diseases*, 23, 567 (2011).
- [3] N. B. Luque, et al., *Physical Chemistry Chemical Physics*, 16, 20107 (2014).
- [4] R. Grande-Aztatzi, et al. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18, 7197 (2016).
- [5] E. Formoso, et al. *Journal of Inorganic Biochemistry*, 192 (2019).

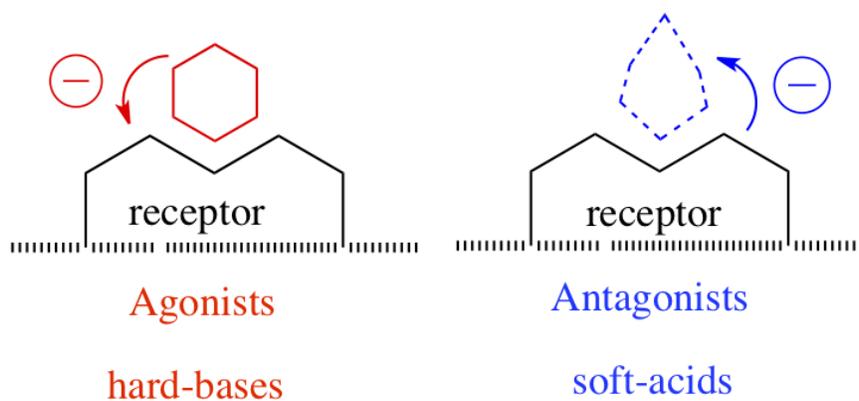


Antipsicóticos y química cuántica

Ana Martínez

Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM

La palabra "psicosis" fue utilizada por primera vez en 1845 como una alternativa a la locura y la manía. Se deriva del griego - psico que significa alma y osis que significa anormal. La psicosis se controla con antipsicóticos. Los antipsicóticos comenzaron como antihistamínicos. El primero de ellos fue el Largactil® y su descubrimiento dio pie a la cuarta revolución en psiquiatría. Después se han sintetizado cientos de antipsicóticos. En este trabajo presentamos un estudio teórico basado en la teoría de funcionales de la densidad de diversos antipsicóticos, y proponemos un modelo para su clasificación que puede ayudar en la síntesis y el diseño de nuevas drogas. Utilizando diversos descriptores químicos proponemos además un posible mecanismo de reacción. Los antipsicóticos que se utilizan son agonistas o antagonistas de la dopamina. Utilizando la teoría de Pearson de ácidos y bases duros y blandos, nuestros resultados muestran que los antagonistas se pueden clasificar como ácidos blandos mientras que los agonistas son bases duras. Los agonistas tienen un mecanismo de acción similar al de la dopamina. Con estos resultados se tiene más información sobre este complejo sistema y se contribuye al entendimiento de la psicosis.





Referencias:

- [1] Ana Martínez, Rubicelia Vargas. A component of the puzzle, when attempting to understand antipsychotics: a theoretical study of chemical reactivity indexes. *J. of Pharmacology and Pharmaceutical Research*, 1, 1-8 (2018) (Nueva revista, invitación)
- [2] Ana Martínez, Ilich A. Ibarra, Rubicelia Vargas. A quantum chemical approach representing a new perspective concerning agonist and antagonist drugs in the context of schizophrenia and Parkinson's disease. (2019) *PLOSone*, (sometido)
- [3] Ana Martínez, Miguel Á. Rodríguez-Gironés, Andrés Barbosa, Miguel Costas. Donator Acceptor Map for Carotenoids, Melatonin and Vitamins. *Journal of Physical Chemistry A*, 112, 9037-9042 (2008)

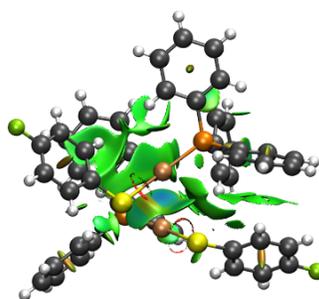
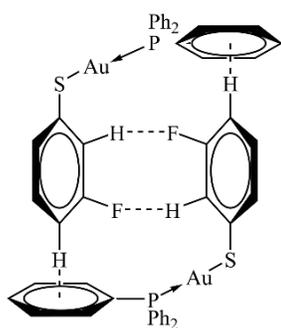


Modificando la estructura de complejos de Oro (I) mediante el grado de fluoración

José Manuel Guevara-Vela, Luis Turcio García, Eduardo Romero-Montalvo, Tomás Rocha-Rinza, Ángel Martín Pendás, Marcos Flores-Álamo, Hugo Torrens, Guillermo Moreno-Alcántar

Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México. Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, Delegación Coyoacán, 04510, Ciudad de México., Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México. Circuito Escolar, Ciudad Universitaria, Delegación Coyoacán, 04510, Ciudad de México., Departamento de Química Física y Analítica, Universidad de Oviedo, E-33006, Julián Clavería, 8, 33006, Oviedo, España., Institut de Science et d' Ingénierie Supramoléculaires (ISIS), University of Strasbourg. 8 allée Gaspard Monge, 67083 Strasbourg Cedex, Francia.

En este trabajo, presentamos un ejemplo del uso de la teoría cuántica de átomos en moléculas (QTAIM) [1] y el índice de interacción no covalente (NCI) [2] para explorar las interacciones supramoleculares que dirigen el empaque cristalino en un serie de compuestos de fluorotiolato trifenilfosfina Oro (I) con la fórmula general $[Au(S^?F)(Ph_3P)]$ donde Ph_3P = trifenilfosfina y $SRF = SC_6F_5$ (1), SC_6HF_4 -4 (2), $SC_6F_4(CF_3)$ -4 (3), $SC_6H_3F_2$ -2,4 (4), $SC_6H_3F_2$ -3,4 (5), $SC_6H_3F_2$ -3,5 (6), $SC_6H_4(CF_3)$ -2 (7), SC_6H_4F -2 (8), SC_6H_4F -3 (9), SC_6H_4F -4 (10), SCF_3 (11), SCH_2CF_3 (12). Para ello obtuvimos las densidades electrónicas de los distintos compuestos usando el funcional BP86 en combinación con la base Def2-TZVP y el Hamiltoniano correspondiente a la aproximación regular de orden cero para tomar en cuenta los efectos relativistas de los electrones moviéndose a altas velocidades cerca del núcleo. Usando este procedimiento, que ha sido validado en experiencias anteriores [3], identificamos tres tipos de interacciones no covalentes: enlaces de hidrógeno débiles, apilamiento π - π y contactos oro-oro que juntos determinan el tipo de empaque de cristal de cada sistema. Mediante esta investigación obtuvimos una vista detallada de las propiedades electrónicas y estructurales, derivadas de los patrones de fluoración en los ligandos, que caracterizan esta serie de compuestos.





Referencias:

R. F. W. Bader, *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*, Oxford University Press, 1991.

E. R. Johnson, S. Keinan, P. Mori-Sánchez, J. Contreras-García, A. J. Cohen, W. Yang, Revealing noncovalent interactions. *J. Amer. Chem. Soc.* 2010, 132, 6498-6506.

G. Moreno-Alcántar, J. M. Guevara-Vela, R. Delgadillo-Ruíz, T. Rocha-Rinza, Á. Martín Pendás, M. Flores-Álamo, H. Torrens, Structural effects of trifluoromethylation and fluorination in gold (i) BIPHEP fluorothiolates, *New J. Chem.* 2017 , 41 , 10537-10541.



Una reacción en dos medios, medio diferentes: Agua líquida y su interfase con el aire

Bijayalaxmi Athokpam, Damien Laage, Margarita I. Bernal-Uruchurtu

CNRS, École Normale Supérieure, Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos

En los últimos años se ha observado experimentalmente que numerosas reacciones de síntesis orgánica se aceleran, entre tres y seis órdenes de magnitud, al ocurrir en microgotas[1]. Además, estudios de algunas reacciones atmosféricas han puesto en relevancia la diferencia importante entre la reactividad observada en disolución y en la interfase agua/aire de procesos como la formación del radical OH a partir de ozono en la tropósfera[2]. Lo anterior ha promovido la búsqueda de rutas abióticas de la síntesis de algunos ribonucleósidos y el descubrimiento de la reducción espontánea de algunas moléculas orgánicas en microgotas[3]. Estos antecedentes nos motivaron a explorar la formación del enlace peptídico, que Griffith y Vaida detectaron experimentalmente [4] catalizado en la interfase por iones metálicos, en ausencia de ellos como una posible ruta prebiótica para la formación de péptidos. Empleando SEBOMD (Dinámica Molecular Born-Oppenheimer Semi-Empírica) [5] con el modelo semi-empírico, PM3-MAIS [7] implementado en AmberTools18 [6], estudiamos la condensación de dos moléculas del ester etílico de la Leucina en medio acuoso. Comparamos lo observado en la interfase agua/aire con el bulto de la disolución. Mostraremos la caracterización molecular de las etapas del mecanismo observado en uno y otro sistema así como las barreras energéticas que se calcularon empleando técnicas comunes, en particular umbrella-sampling.



Referencias:

Banerjee, S., et al., *Analyst*, 142, 1399 (2017);

Anglada, J. M. et al., *PNAS*, 111, 11618 (2014)

Nam, I., Nam, H. H., and Zare, R. N., *PNAS*, 115, 36 (2018); Lee, J. K., *JACS*, 142, 10585 (2019)

Griffith, E.C., and Vaida, V., *PNAS*, 109, 15697 (2012)

Marion, A., Gokcan, H., and Monard, G., *J. Chem Inf. Mod.* 59, 206 (2019)

D.A. Case, I.Y. Ben-Shalom, S.R. Brozell, D.S. Cerutti, T.E. Cheatham, III, V.W.D. Cruzeiro, T.A. Darden, R.E. Duke, D. Ghoreishi, M.K. Gilson, H. Gohlke, A.W. Goetz, D. Greene, R. Harris, N. Homeyer, S. Izadi, A. Kovalenko, T. Kurtzman, T.S. Lee, S. LeGrand, P. Li, C. Lin, J. Liu, T. Luchko, R. Luo, D.J. Mermelstein, K.M. Merz, Y. Miao, G. Monard, C. Nguyen, H. Nguyen, I. Omelyan, A. Onufriev, F. Pan, R. Qi, D.R. Roe, A. Roitberg, C. Sagui, S. Schott-Verdugo, J. Shen, C.L. Simmerling, J. Smith, R. Salomon-Ferrer, J. Swails, R.C. Walker, J. Wang, H. Wei, R.M. Wolf, X. Wu, L. Xiao, D.M. York and P.A. Kollman (2018), *AMBER 2018*, University of California, San Francisco.

Bernal-Uruchurtu, M.I., and Ruiz-Lopez, M. F., *Chem. Phys. Lett.*, 330, 118 (2000)

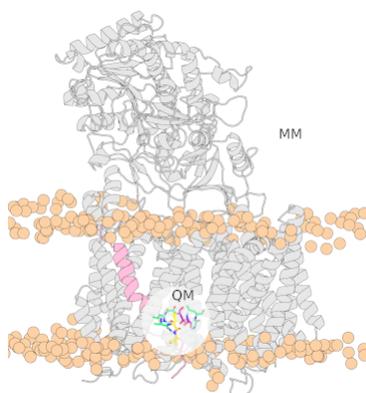


Estudio computacional del mecanismo de acción de la enzima γ -secretasa

Dulce Consuelo Guzmán Ocampo, Rodrigo Aguayo Ortiz, Laura Domínguez Dueñas

Departamento de Físicoquímica, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Department of Internal Medicine, Division of Cardiovascular Medicine, University of Michigan, Departamento de Físicoquímica, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México

La enzima γ -secretasa participa en el último paso de la escisión secuencial de la Proteína Precursora Amiloide (APP), que culmina en la formación de los péptidos γ -amiloides (A γ). Estos péptidos pueden formar agregados extracelulares, cuya acumulación es una de las dos evidencias patológicas de la enfermedad de Alzheimer. La escisión de γ -secretasa a APP conduce a la producción de péptidos A γ con diferentes longitudes. De acuerdo con la hipótesis amiloidogénica, un desbalance en la proporción de A γ 40:A γ 42 resulta en el desarrollo de la enfermedad de Alzheimer. Es indispensable una descripción del mecanismo de reacción como guía para el diseño racional de fármacos enfocados a curar o detener la enfermedad de Alzheimer. En este estudio se emplearon metodologías de la química computacional QM/MM para determinar el mecanismo de escisión de APP por γ -secretasa, responsable de la generación de los péptidos A γ . Se identificaron las interacciones entre el sitio catalítico y el sustrato que dirigen la catálisis de la enzima, así como el efecto energético y estérico de una mutación que conduce a un cambio en el sitio de corte, responsable de la generación de los péptidos A γ 42 más tóxicos y propensos a agregarse.





Referencias:

- LaFerla, F. M.; Green, K. N.; Oddo, S. *Nat. Rev. Neurosci.* 2007, 8 (7), 499–509.
- Mucke, L. *Nature* 2009, 461 (7266), 895–897.
- Coates, L.; Tuan, H. H.; Tomanicek, S.; Kovalevsky, A.; Mustyakimov, M.; Erskine, P.; Cooper, J. J. *Am. Chem. Soc.* 2008, 130 (23), 7235–7237.
- Zhou, R.; Yang, G.; Guo, X.; Zhou, Q.; Lei, J.; Shi, Y. 2019, 363 (6428).
- Seabra, G. D. M.; Walker, R. C.; Elstner, M.; Case, D. A.; Roitberg, A. E. *J. Phys. Chem. A* 2007, 111 (26), 5655–5664.



Estructura Electrónica y Especiación de Óxidos de Actínidos

Pere Miró

University of South Dakota

Los óxidos y peróxidos de actínidos son altamente relevantes para el desarrollo de un ciclo nuclear avanzado incluyendo el reprocesado de residuos nucleares y su almacenaje a largo plazo. Las nanocapsulas de peróxido de uranilo emergieron como una familia única dentro de los compuestos actínidos, especialmente por su generación a través del autoensamblaje de monómeros en fase acuosa. Sin embargo detrás de su aparente simplicidad sintética y estructural estas especies ocultan una gran complejidad en su crecimiento que está altamente controlado por el pH, contraiones, y las concentraciones de las diferentes especies en solución. En esta ponencia se presentaran nuestros estudios teóricos sobre la estructura electrónica y especiación de peróxidos de uranilo usando DFT incluyendo la dimerización inicial de compuestos monoméricos, el proceso de formación y especiación de tetrámeros $[(UO_2)_4(O_2)_8]^{8-}$ (U4), pentámeros $[(UO_2)_5(O_2)_{10}]^{10-}$ (U5), y hexámeros $[(UO_2)_6(O_2)_{12}]^{12-}$ (U6), la estabilidad relativa de los isómeros estructurales de $[(UO_2)_{20}(O_2)_{30}]^{20-}$ (U20) y finalmente la estructura electrónica de diferentes nanocapsulas.



Referencias:

Ninguna



Relativistic Effects on Atoms In Molecules: Results for 2-Component Hamiltonians

James S. M. Anderson

Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México

The quantum theory of atoms in molecules (QTAIM) as originally formulated is a successful method for computing atomic properties within a nonrelativistic quantum mechanical framework. Prof. R.F.W. Bader and coworkers showed that AIM satisfies the Schwinger principle of stationary action and as such justifying its utility for computing atomic properties in a nonrelativistic setting. Relativity must be accounted for when computing properties of chemical systems that include nuclei with atomic number larger than 37. I will demonstrate how to formulate QTAIM to include relativistic effects in defining a proper quantum subsystem that satisfies Schwinger's principle of stationary action for two-component Hamiltonians. This will be carried out in an analogous way to the nonrelativistic treatment of QTAIM. I will concentrate on some popular two-component Hamiltonians including the popular scalar-relativistic zeroth-order regular approximation (SR-ZORA). I will show how relativistic effects can alter the molecular graph.



Referencias:

No references



Diseño Racional de Antioxidantes Multifuncionales: Primera Etapa

Annia Galano

Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa

Actualmente el estrés oxidativo ha sido relacionado con el desarrollo de muchas enfermedades multifactoriales de alto impacto, como los desórdenes neurodegenerativos. Es por ello que la búsqueda de antioxidantes multifuncionales es un área de investigación con posibles implicaciones terapéuticas. En esta plática se describe un protocolo computacional diseñado para la búsqueda de antioxidantes multifuncional con potencial aplicación como neuroprotectores. Se ejemplifica su uso con derivados de melatonina.



Referencias:

Ninguna

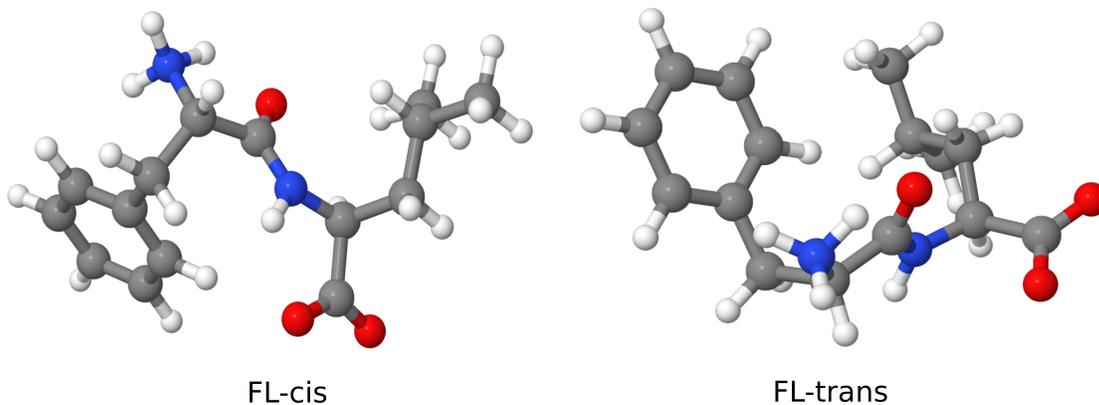


Impacto de la estabilidad relativa de conformeros zwitteriónicos en péptidos cristalinos

Álvaro de Jesús Ochoa Calle, Marcelo Galván, Joel Ireta

Universidad Autónoma Metropolitana.-Iztapalapa

Debido a sus propiedades fisicoquímicas como la gran dureza o su capacidad piezoeléctrica, los dipéptidos han despertado un gran interés para desarrollar biomateriales con aplicación tecnológica. Algunos de estos dipéptidos tienden a cristalizar como un ensamble de estructuras tubulares con canales hidrofóbicos o hidrofílicos. Los dipéptidos conformados por L-Ala, L-Val o L-Ile-Ala, forman canales hidrofóbicos mientras que los que contienen L-Phe, L-Leu o L-Ile-Leu forman canales hidrofílicos. En el primer tipo de cristales la conformación de los dipéptidos es tal que las cadenas laterales se encuentran en lados opuestos del plano peptídico. En este trabajo se estudia la estabilidad relativa de los dos conformeros presentes más estables en los cristales formados por estos péptidos. Se corrobora la propuesta de que los conformeros más estables en presencia de disolvente son los que prevalecen en fase sólida. Debido a la naturaleza zwitteriónica de estos sistemas se utilizan modelos de solvente de respuesta no uniforme que describen apropiadamente la solvatación de aniones y cationes y que muestran un buen desempeño en la descripción de la estructura zwitteriónica de la glicina.





Referencias:

Ninguna



Nuevos Ligandos Azadiboriridina y 12-P-6 Oxafosfato: Estructura y Reactividad

J. Oscar C. Jimenez-Halla, Rong Shang, Masaaki Nakamoto, Yohsuke Yamamoto

Departamento de Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad de Guanajuato, Noria Alta s/n 36050, Guanajuato, Gto., Department of Chemistry, Graduate School of Science, Hiroshima University, 1-3-1 Kagamiyama, 7398526 Higashi-Hiroshima, Japan.

La búsqueda de nuevos ligandos que, tanto estérica como electrónicamente, confieran una reactividad modulada diferente a lo que se hubo reportado anteriormente es muy importante en la Química Organometálica y de Coordinación para desarrollar reacciones aún no conocidas. En este trabajo se presenta un nuevo ligando, tri(*t*-butil)azadiboriridina, usado en la síntesis de compuestos de organoboro como en las reacciones de acoplamiento de Suzuki-Miyaura, frente a un complejo de AuCl(L). Nuestros cálculos a nivel DFT revelan que, dependiendo de la capacidad donadora de L, éste se transfiere o no a la azadiboriridina y esto tiene implicaciones en la reactividad frente a isonitrilos, como ejemplo. Por otro lado, analizamos estereoisómeros de 12-P-6 oxafosfatos, que son compuestos de fósforo hipervalentes, estudiados dentro de la química de pares de Lewis frustrados, derivados del ligando de Martin. Se presenta evidencia teórica y experimental sobre su mecanismo de formación, a diferencia de un ligando similar investigado por Matsukawa y col.



Referencias:

van Bonn, K. H.; Schreyer, P.; Paetzold, P.; Boese, R.; Chem. Ber. 1988, 121, 1045; (b) Boese, R.; Kroeckert, B.; Paetzold, P.; Chem. Ber. 1987, 120, 1913.

Shang, R.; Saito, S.; Jiménez-Halla, J.O.C.; Yamamoto, Y.; Dalton Trans. 2018, 47, 5181.

Matsukawa, S.; Kojima, S.; Kajiyama, K.; Yamamoto, Y.; Akiba, K.-Y.; Re, S.; Nagase, S.; J. Am. Chem. Soc. 2002, 124, 13154.

Jiang, X.-D.; Toya, Y.; Matsukawa, S.; Kojima, S.; Jiménez-Halla, J.O.C.; Shang, R.; Nakamoto, M.; Yamamoto, Y.; Chem. Sci. 2019, 10, 3466.



Electrones desapareados dentro de la Teoría de Matriz de Densidad

Raúl Quintero-Monsebaiz, Alberto Vela, Mario Piris

Centro de Investigación y Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional (CINVESTAV), Donostia International Physics Center (DIPC)

Dentro de los métodos que utilizan la matriz de densidad de primer orden para describir sistemas cuánticos, el método Piris natural orbital funcional (PNOF) ha ganado popularidad en los últimos años, esto es debido a que el diseño de los funcionales cumplen condiciones necesarias de representabilidad de la matriz de densidad reducida de orden dos y condiciones necesarias y suficientes de la matriz del ensamble de la matriz de orden uno. En particular, el PNOF5 y PNOF7 están contruidos con estos criterios. Estos funcionales pueden describir tanto sistemas con espín compensado como no compensado. Los funcionales de espín polarizado PNOF5 y PNOF7 tienen la restricción que los números de ocupación para electrones fraccionarios están fijos, para poder cumplir con el valor esperado de la proyección del espín en el eje z y el espín total. En este trabajo se propone una nueva forma de los funcionales PNOF 5 y 7 de espín polarizado pero ahora con electrones desapareados fraccionarios y conservando las condiciones de N -representabilidad y simetría de espín.



Referencias:

M. Piris, X. Lopez, F. Ruipérez, J. M. Matxain, and J. M. Ugalde, *J. Chem. Phys.* 134, 164102 (2011).

M. Piris, J. M. Matxain, and X. Lopez, *J. Chem. Phys.* 139, 234109 (2013).

M. Piris, *Phys. Rev. Lett.* 119, 063002 (2017).

I. Mitxelena, M. Rodríguez-Mayorga, and M. Piris, *Eur. Phys. J. B* 91, 109 (2018).

R. Quintero, I. Mitxelena, M. Rodríguez, A. Vela, M. Piris, *J. Phys: Condens Matter*, (2019)



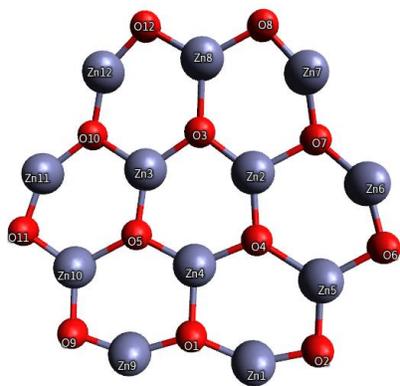
Modelamiento estructural del ZnO-M (M = Al, Ag) destacando las propiedades electrónicas

Cristian Eduardo García López, Irineo Pedro Zaragoza Rivera

Tecnológico Nacional de México, Campus Instituto Tecnológico de Tlalnepantla., Av. Mario Colín S/N, Ap. Postal 750, Tlalnepantla de Baz, La Comunidad, Edo. Méx., México

Los agregados de átomos de zinc y oxígeno se presentan en monocapas planas con forma estructural de hexágonos. El modelo inicial consta de 24 átomos que forma una estructura de ZnO con Zn_{12} y O_{12} denominada modelo de monocapa. Para obtener una estructura tridimensional se utilizaron dos monocapas con un desfase de tal forma que un átomo de zinc de una monocapa se coloca encima de un átomo de oxígeno de la otra monocapa, para determinar la interacción Zn-O y obtener dicha estructura por medio del cálculo de optimización la geometría. A partir de este modelo tridimensional de 48 átomos se seleccionó por cálculos single point el átomo con menor energía para el intercambio de Zn por (Al, Ag). Seleccionando la sustitución se calculó la estructura optimizada, observando los diferentes cambios estructurales y distribución de la carga por medio del análisis poblacional según Mulliken. Además, se analizaron los valores de la energía, la longitud de los enlaces y los orbitales de frontera para cada sistema optimizado de $Zn_{22} Al_2$ y O_{24} en forma equivalente para Ag. Los cambios de energía y transferencia de carga se discuten en términos de la distancia de interacción entre los átomos compuestos por (Al, Ag) y sus diferentes formas resultantes en cada estructura final dopada. La metodología está en el nivel de Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT), con el funcional M06-2x, funciones base DZVP, con multiplicidad 1 y carga neutra, utilizando el paquete de computo NWChem.

--- Información de depuración ---
FPS: 0.0233
Tamaño de imagen: 1,243 x 528
Átomos: 24
Cadenas: 30





Referencias:

Irineo-Pedro Zaragoza, Luis-Antonio Soriano-Agueda, Raymundo Hernández-Esparza, Rubicelia Vargas, Jorge Garza, Analyzing ZnO clusters through the density-functional theory, J Mol Model (2018) 24:164

H. S. Bhatti · Atul Gupta · N. K. Verma · Sunil Kumar Optical characterization of ZnO nanobelts J Mater Sci: Mater Electron (2006) 17: 281–285

A . K . R A Y C H A U D H U R I Growth of aligned arrays of ZnO nanorods by low

temperature solution method on Si surface J MATER SCI (2006) 41: 3623–3630

D. R. Sahu, Chuan-Pu Liu, Ruey-Chi Wang, Chien-Lin Kuo, Jow-Lay Huang* Growth and Application of ZnO Nanostructures, Int. J. Appl. Ceram. Technol., (2013)10 [5] : 814–838

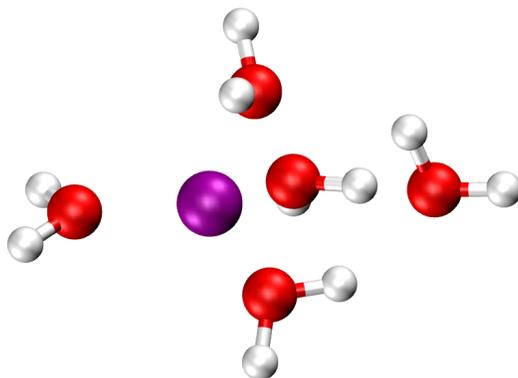


EFFECTOS NO ADITIVOS EN LA INTERACCIÓN DE CÚMULOS DE AGUA CON CATIONES Y ANIONES

Arturo Sauza de la Vega, Tomás Rocha Rinza

Instituto de Química UNAM

Las propiedades del agua dependen principalmente de las interacciones entre las moléculas de agua mediante enlaces de hidrógeno. Una de las características más importantes es su capacidad de disolver y solvatar una gran cantidad de compuestos iónicos. Además, los iones representan un factor importante en la estabilización de biomoléculas y son primordiales en procesos ambientales e industriales. Se estudia la influencia de los iones Li, Na, K, Be, Mg, Ca, F, Cl, Br, NO₃ y SO₄ sobre el enlace de hidrógeno en los cúmulos de agua (H₂O)_n, n=1-8. Se realizó la búsqueda de los confórmeros de menor energía electrónica empleando el funcional de intercambio y correlación M06-2X con las funciones de base Def2TZVP. A continuación se realizaron optimizaciones de geometría con el mismo funcional y la base orbital 6-311++G(3df,3pd). También se han utilizado herramientas de topología química cuántica, en especial la teoría cuántica de átomos en moléculas (QTAIM, por sus siglas en inglés) y la partición de la energía electrónica de átomos cuánticos interactuantes (IQA, por sus siglas en inglés) para estudiar los efectos no aditivos en las interacciones estudiadas. Se observaron efectos cooperativos y anticooperativos asociados con las interacciones ión-dipolo y los enlaces de hidrógeno. Los efectos anticooperativos en la interacción ión-dipolo causan una disminución en la energía de interacción entre el catión y las moléculas de agua vecinas.





Referencias:

F. Frank, *The Physics and Physical Chemistry of Water*, Plenum Press, 1972.

R. F. W. Bader, *Atoms in molecules. A quantum theory*, Oxford University Press, 1990.

M. A. Blanco, A. Martín Pendás and E. Francisco, *J. Chem. Theory Comput.* 1 (2005), 1096.

J. M. Guevara-Vela, R. Chiávez-Calvillo, M. García-Revilla, J. Hernández-Trujillo, O. Christiansen, E. Francisco, Á. Martín Pendás, T. Rocha-Rinza, *Chem. Eur. J.* 19 (2013), 14304.



Implementación de un Hartree Fock LDF con efectos relativistas dentro del programa deMon2k

Kevin Oswaldo Pérez Becerra, Héctor Xolotl Silos Vega, Bernardo Antonio Zúñiga Gutierrez

Departamento de Química Universidad de Guadalajara, Departamento de Química Universidad de Colima, Departamento de Química Universidad de Guadalajara

Cuando se lidia con moléculas que contiene núcleos grandes los modelados se complican debido a que éstos presentan efectos relativistas, por ello es necesario implementar éstos para obtener resultados que se acerquen a los datos experimentales y poder hacer predicciones teóricas correctas. En este trabajo se incluyeron efectos relativistas escalares en el método Hartree Fock LDF [1], el cuál posee una alta eficiencia computacional. Para tratar los efectos relativistas escalares se utilizó la aproximación regular de orden cero (ZORA por sus siglas en inglés) [2]. Para validar los resultados obtenidos con nuestra implementación, se compararon contra cálculos que no consideran los efectos relativistas y simultáneamente contra datos experimentales de energías de ionización. Presentando además un análisis del tiempo de computo requerido en lo cálculos.



Referencias:

1. D. Mejía-Rodríguez and A. M. Köster The Journal of Chemical Physics 141, 124114 (2014); doi: 10.1063/1.4896199
2. E. van Lenthe, E. J. Baerends, and J. G. Snijders J. Chem. Phys. 99, 4597 (1993); doi: 10.1063/1.466059

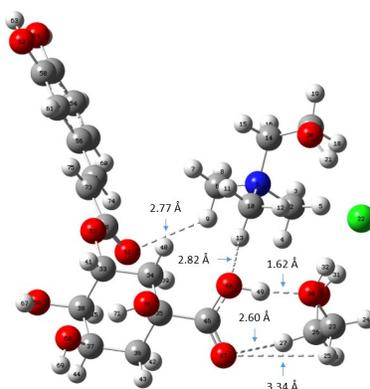


Estudio teórico de las interacciones entre DESs y CFs

Mauricio Méndez-Torruco, Myrna H. Matus

Unidad de Servicios de Apoyo en Resolución Analítica, Universidad Veracruzana., Av. Luis Castelazo Ayala S/N, Col. Industrial-Ánimas, Xalapa, Veracruz, C. P. 91190, MÉXICO

La química verde busca activamente el desarrollo de nuevos compuestos que reemplacen los disolventes orgánicos comunes que presentan toxicidad inherente y son peligrosos para el ambiente. Una alternativa son los disolventes eutécticos profundos (Deep Eutectic Solvents, DESs), los cuales han llamado la atención para su aplicación en procesos químicos como extracción y síntesis [1]. Dentro de las aplicaciones de los DESs, se ha estudiado su uso en la extracción de compuestos bioactivos (fenólicos) [2]. Con el fin de explorar más a fondo el proceso de extracción de compuestos fenólicos empleando DESs y comprenderlo, desde el punto de vista molecular, es importante conocer qué tipo de interacciones intermoleculares (tales como puentes de hidrógeno, catión- π o van der Waals) entre el DES y los compuestos fenólicos permiten que estos últimos se solubilizan en dicho DES. Por lo anterior, se propone el uso de las herramientas de la Química Computacional [3], tales como AIM y NCI empleando el nivel de cálculo PBE-D3/6-31++G(d,p), para el estudio de las interacciones intermoleculares entre DES y compuestos fenólicos.





Referencias:

1. Dai, Y., van Spronsen, J., Witkamp, G. J., Verpoorte, R. & Choi, Y. H. “Natural deep eutectic solvents as new potential media for green technology”. *Analytica Chimica Acta*, Vol. 766, p. 61–68, 2013.
2. Zainal-Abidin, M. H., Hayyan, M., Hayyan, A. & Jayakumar, N. S. “New horizons in the extraction of bioactive compounds using deep eutectic solvents: A review”. *Analytica Chimica Acta*, Vol. 979, p. 1–23, 2017.
3. Jensen, F. “Part 1: Introduction”. *Introduction to Computational Chemistry*, 3a ed., Wiley, 2017.

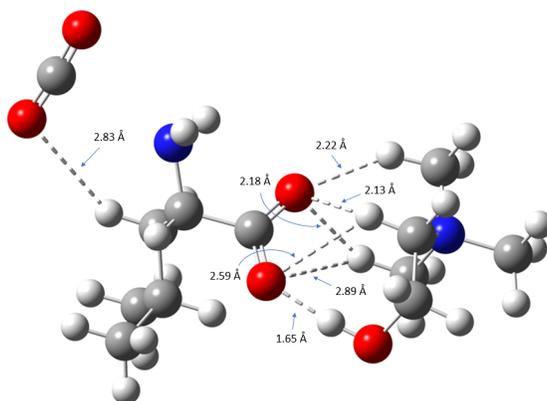


ESTUDIO DE LAS INTERACCIONES ENTRE LÍQUIDOS IÓNICOS Y CO₂ EMPLEANDO TFD

Diego Román-Montalvo, Myrna H. Matus

Unidad de Servicios de Apoyo en Resolución Analítica, Universidad Veracruzana, Av. Luis Castelazo Ayala S/N, Col. Industrial-Ánimas, Xalapa, Veracruz, C. P. 91190, MÉXICO.

En los procesos de producción a nivel industrial, se generan diariamente, además de nuestros productos deseados, grandes cantidades de desechos y contaminantes. Por esto, se ha buscado modificar los procesos de producción, implementando el tratamiento de residuos siempre que sea posible, para disminuir nuestra huella ecológica y cumplir con lineamientos internacionales. Entre estos tratamientos nos encontramos de manera frecuente con la limpieza de gases contaminantes mediante un proceso de absorción, aunque para ello comúnmente utilizamos disolventes que también resultan ser contaminantes. Ante este problema, surge el interés por mejorar estos procesos empleando Líquidos Iónicos (LIs) [1], los cuales, debido a sus peculiares propiedades [2] y a su gran versatilidad, se les considera sustancias amigables con el medio ambiente. Siendo que no es sencillo realizar pruebas y mediciones precisas de propiedades de LIs sin equipo especializado, en este trabajo se propone el uso de la Química Computacional para el diseño y estudio de diversos LIs que cumplan con las propiedades termoquímicas necesarias para capturar CO₂ de manera eficiente [3]. Este estudio se llevó a cabo realizando una optimización y un análisis de las interacciones inter- e intramoleculares empleando el nivel de cálculo PBE-D3/6-311++G**.





Referencias:

1. Plechkova, N. V. & Seddon, K. R. “Applications of ionic liquids in the chemical industry”, *Chemical Society Reviews*, Vol. 37, No. 1, p. 123–150, 2008.
2. Weingärtner, H. “Understanding ionic liquids at the molecular level: facts, problems, and controversies”, *Angewandte Chemie International Edition*, Vol. 47, No. 4, p. 654–670, 2008.
3. Lu, J. G., Li, X., Zhao, Y. X., Ma, H. L., Wang, L. F., Wang, X. Y., Yu, Y. F., Shen, T. Y., Xu, H., Zhang, Y. T. “CO₂ capture by ionic liquid membrane absorption for reduction of emissions of greenhouse gas”, *Environmental Chemistry Letters*, Vol. 17, No. 2, p. 1031–1038, 2019.



Propiedades mesoscópicas y moleculares de LI utilizados como dispersantes de asfaltenos

Ana Cristina Ramírez Gallardo, Isidoro García Cruz

Instituto Mexicano del Petróleo

Los asfaltenos se definen como la fracción más pesada y polar del petróleo. Para mejorar el transporte de aceite crudo, se buscan opciones que mejoren el flujo mediante la disolución de los asfaltenos con diferentes dispersantes o detergentes. Recientemente los líquidos iónicos (LIs) han sido considerados como una nueva clase de disolventes que permiten hacer los procesos más verdes o ecológicos debido a sus propiedades físicas y químicas, por lo que pueden ser utilizados como disolventes y dispersantes para diferentes procesos químicos, entre ellos, la inhibición de la agregación asfáltica. En este trabajo, se determinaron propiedades termodinámicas de solventes orgánicos y líquidos iónicos tales como densidad, viscosidad y tensión interfacial, con simulación molecular con el software Large-Scale Atomic Molecular Massively Parallel Simulator, considerando ensambles microcanónicos NVT y NPT. Estos resultados fueron correlacionados con propiedades electrónicas del asfalteno, con solventes orgánicos y LIs, mediante la Teoría de Funcionales de la Densidad, empleando el código computacional DMol3 del paquete de programas Materials Studio. Con base en los resultados de tensión interfacial, densidad y viscosidad de los LIs, obtenidos con simulación molecular, así como de estructura electrónica se puede establecer que los LIs y solventes orgánicos estudiados en este trabajo pueden ayudar a solubilizar al asfalteno, estructura obtenida a partir de un aceite crudo de México.



Referencias:

LAMMPS, Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator, <http://lammps.sandia.gov>, Sandia National Laboratories, 2003

BIOVIA MAterials Studio de Dessault Systems, 2016, San Diego, USA.



Diseño de antioxidantes multifuncionales derivados de sesamol.

Laura María Castro González, Annia Galano, Juan Raúl Álvarez Idaboy

1. Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, 2. Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa.

Este trabajo reporta el diseño computacional de nuevos derivados de sesamol. Los derivados se crearon mediante la adición de cuatro grupos funcionales (-OH, -NH₃, -COOH, -SH) en tres posiciones diferentes de la molécula de sesamol. Se obtuvo un total de 50 derivados entre compuestos mono, di y trisustituidos. Se evaluaron todos los derivados y un conjunto de referencia de fármacos neuroprotectores comerciales según sus propiedades de absorción, distribución, metabolismo, excreción y toxicidad calculadas computacionalmente (ADMET). Se diseñó un criterio de puntaje de selección para escoger los derivados más promisorios. Las propiedades de acidez tales como p_{ka}, los índices de reactividad y las energías de disociación de enlace de los 12 candidatos seleccionados se estimaron utilizando cálculos de estructura electrónica en el marco de la teoría del funcional de la densidad. Finalmente, se seleccionaron cuatro derivados de acuerdo con el consenso de todas las propiedades calculadas. Se propone que estas nuevas moléculas son potentes antioxidantes, incluso mejores que el sesamol y otros antioxidantes comerciales. Esta metodología permite el estudio fácil y rápido de las moléculas derivadas, proporcionando un pequeño conjunto de moléculas que podrían evaluarse experimentalmente para validar los resultados obtenidos. Motivado por estos resultados, se realizarán más investigaciones teóricas y experimentales para estudiar en profundidad las moléculas candidatas más promisorias.



Referencias:

1. A. Galano, A. Pérez-González, R. Castañeda-Arriaga, L. Muñoz-Rugeles, G. Mendoza-Sarmiento, A. Romero-Silva, A. Ibarra-Escutia, A. M. Rebollar-Zepeda, J. R. León-Carmona, M. A. Hernández-Olivares and J. R. Alvarez-Idaboy, *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2016, 56, 1714-1724.
2. A. Pérez-González, R. Castañeda-Arriaga, B. Verastegui, M. Carreón-González, J. R. Alvarez-Idaboy and A. Galano, *Theoretical Chemistry Accounts*, 2018, 137, 5.
3. A. Pérez-González, A. Galano and J. V. Ortiz, *The Journal of Physical Chemistry A*, 2014, 118, 6125-6131.
4. H. A. Zhong, V. Mashinson, T. A. Woolman and M. Zha, *Curr Top Med Chem*, 2013, 13, 1290-1307.

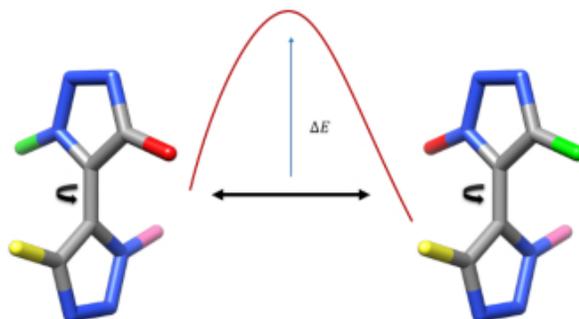


Identificando atropisómeros en bi-1,2,3-triazoles mediante métodos computacionales

Joanatan Michael Bautista Renedo, Sabrina Ayala Bueno, Nelly Ma. de la Paz González Rivas, Horacio Reyes Perez, Erick Cuevas Yañez

Universidad Autónoma del Estado de México, Tecnológico de Estudios Superiores de Jocotitlán

Los 1,2,3-triazoles (1,2,3-Tz) son compuestos heterocíclicos versátiles con diversas aplicaciones. De entre estas se encuentra su uso como antimicrobianos, fungicidas, quelantes e incluso han sido utilizados como catalizadores. Por otra parte, los 5,5'-bi-1,2,3-Tz son compuestos biarílicos que constan de dos 1,2,3-Tz unidos entre si mediante un enlace sencillo. Esta característica estructural no solo provee al sistema de las cualidades originales de los triazoles, si no que otorga la posibilidad de presentar atropoisomería, un tipo de isomería axial que surge debido a la rotación dificultada de un enlace. De tal modo que barreras energéticas relacionadas a la rotación del enlace con un valor mayor a 30 kcal/mol indican la presencia de atropisómeros. La relevancia de la presencia de atropisómeros surge en la selectividad conformacional, fenómeno conocido por desempeñar un papel fundamental en sistemas biológicos. En el presente trabajo se estudia mediante teoría de funcionales de la densidad a un nivel de teoría B3LYP/6-31G** la energía necesaria para rotar el enlace sencillo Tz-Tz en una serie de 5,5'-bi-1,2,3-Tz propuesta por el grupo de Cuevas Yañez y colaboradores, con el fin de predecir la presencia de atropisómeros. De manera adicional se estudiaron las posibles interacciones que surgen a raíz de este cambio conformacional.





Referencias:

Celik, F.; Unver, Y.; Barut, B, Ozel, A. and Sancak, K. Synthesis, Characterization and Biological Activities of New Symmetric Bis-1,2,3-Triazoles with Click Chemistry Med. Chem. 2018, 14, 3, 230-241 .

Connell, T. U.; White, J. M.; Smith, T. A. and Donnelly, P. S. Luminescent Iridium(III) Cyclometalated Complexes with 1,2,3-Triazole “Click” Ligands. Inorg. Chem. 2016, 55, 6, 2776-2790 .

Hosseinnejad, T.; Fatemeh, E. M. and Fattahia , B. Computational investigations of click-derived 1,2,3-triazoles as keystone ligands for complexation with transition metals: a review RSC Adv., 2018,8, 12232-12259



Estudios de productos naturales relacionados con perezona como agentes antineoplásicos.

Maricarmen Hernández-Rodríguez (A), Pablo I. Mendoza Sánchez (A), Martha Edith Macias Perez (B), Erika Rosales Cruz (C), Elvia Mera Jiménez (B), María Inés Nicolás Vázquez (A), René Miranda Ruvalcaba (A)

(A) Química inorgánica-orgánica del Departamento de Ciencias Químicas, de la Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán. Campo 1, Universidad Nacional Autónoma de México, Avenida 1o de Mayo S/N, Santa María las Torres, Cuautitlán Izcalli, Estado de México, México. , (B) Laboratorio de Cultivo Celular, Escuela Superior de Medicina, Instituto Politécnico Nacional, Salvador Díaz Mirón S/N, Santo Tomás, 11340 Ciudad de México. , (C) Laboratorio de Hematopatología, Escuela Nacional de Ciencias Biológicas, Instituto Politécnico Nacional, Prolongación de Carpio y Plan de Ayala s/n, Miguel Hidalgo, Santo Tomás, 11340 Ciudad de México. mirruv@yahoo.com.mx.

Perezona (Per) representa un fitoproducto con actividad antineoplásica. Nuestro grupo de trabajo ha demostrado que la inhibición de la enzima Poli [ADP-ribosa] polimerasa 1 (PARP-1) y la inducción de un estado de estrés oxidativo representan los mecanismos de acción de Per. Por lo tanto, el objetivo del presente estudio fue evaluar dos productos naturales relacionados estructuralmente con Per; hidroxiperezona (OHPer) y su correspondiente monoangelato (OHPer-MAng). Dichos compuestos se evaluaron in vitro en seis líneas celulares de cáncer (K562, MCF-7, MDA-MB-231, HeLa, U373 y A549) y una línea celular sana (Vero) para determinar su citotoxicidad, tipo de muerte celular inducida, capacidad para evitar la migración celular y modificación del ciclo celular. Además, se realizaron estudios in vitro y computacionales para determinar la inhibición de PARP-1 y su posible modo de unión. La proliferación celular y los ensayos del ciclo celular demostraron que el tratamiento con OHPer-MAng induce apoptosis en líneas celulares MCF-7 ($IC_{50} = 26.23 \mu M$) y MDA-MB-231 ($IC_{50} = 3.53 \mu M$) por aumento de las fases G0/G1 del ciclo celular, además, de inhibición de la migración. La inhibición de PARP-1 se corroboró, siendo OHPer-MAng el más potente ($IC_{50} = 36.3 \mu M$). Los estudios de acoplamiento molecular (docking) mostraron que OHPer-MAng interacciona con el sitio catalítico de PARP-1. De acuerdo con los resultados obtenidos, fue posible demostrar la actividad anticancerígena de OHPer-MAng.



Referencias:

1. Cancer Incidence and Mortality Worldwide: IARC CancerBase. 2012.
2. L. Río de la Loza, “Discurso pronunciado por el catedrático de química médica de la Escuela de Medicina (Noviembre 23, 1852),” in *Escritos de Leopoldo Río de la Loza*, J. M. Noriega, Ed., Imprenta de Ignacio Escalante, (1911) 94-100.
3. M. Hernández-Rodríguez, P.I. Mendoza-Sánchez, M.E. Macias-Perez, E. Rosales-Cruz, E. Mera-Jiménez, M.I. Nicolás-Vázquez MI, R. Miranda-Ruvalcaba, In vitro and computational studies showed that perezone inhibits PARP-1 and induces changes in the redox state of K562 cells, *Arch. Biochem. Biophys.* (2019) 30147-X

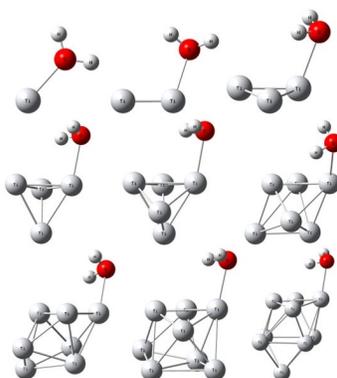


Cúmulos de titanio: $Ti_n^0, \pm 1$ y su solvatación con agua ($n \geq 9$). Un estudio teórico DFT

Angeles Ortega y Miguel Castro

Dpto. Física y Química teórica, Unidad de Posgrado, edificio B, Facultad de Química, UNAM

En este trabajo se han estudiado las propiedades estructurales y electrónicas de cúmulos de titanio neutros, catiónicos y aniónicos: $Ti_n^0, \pm 1$ ($n \geq 9$) mediante cálculos cuánticos utilizando el funcional puro BPW91 y bases orbitales 6-311++G(2d,2p). También se determinó la absorción de una molécula de agua por estos cúmulos. Para cada caso, Ti_n y $Ti_n^0, \pm 1-H_2O$ se identificó la estructura de mínima energía. Se analizó la naturaleza del enlace metal-metal, la estabilidad de los cúmulos de Ti_n dependiendo del tipo de carga, los momentos magnéticos y su reactividad. Para los sistemas $Ti_n^0, \pm 1-H_2O$, se analizaron los cambios estructurales de la molécula de agua al ser absorbida. Para algunos casos, las distancias y/o ángulos de enlaces H-O-H y Ti-O revelan la formación de enlaces agósticos, en donde además del enlace covalente Ti-O también hay una interacción Ti-H, que produce la activación del enlace H-O. Los espectros IR, determinados para cada sistema en la aproximación armónica, permiten identificar los corrimientos de las frecuencias de vibración del agua y del grupo Ti-O en donde ocurre la adsorción. Estos resultados permiten el análisis de los detalles nacientes de solvatación de estos cúmulos.





Referencias:

- [1] Attia, Y., & Samer, M. (2017). Metal clusters: New era of hydrogen production. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 79, 878-892. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.05.113>
- [2] Castro, Miguel, Liu, S.-R., Zhai, H.-J., & Wang, L.-S. (2003). Structural and electronic properties of small titanium clusters: A density functional theory and anion photoelectron spectroscopy study. *The Journal of Chemical Physics*, 118(5), 2116-2123. <https://doi.org/10.1063/1.1532000>
- [3] Han, J.-G., & Morales, J. A. (2006). A theoretical investigation on the clusters by density functional theory methods. *Chemical Physics*, 323(2-3), 249-258. <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2005.09.023>
- [4] Medina, J., de Coss, R., Tapia, A., & Canto, G. (2010). Structural, energetic and magnetic properties of small Tin ($n = 2-13$) clusters: a density functional study. *The European Physical Journal B*, 76(3), 427-433. <https://doi.org/10.1140/epjb/e2010-00214-3>
- [5] Meza, B., Miranda, P., & Castro, M. (2017). Structural and Electronic Properties of Hydrated $V_n H_{2n} O$ and $V_{n+1} H_{2n+2} O$, $n \geq 13$, Systems. *The Journal of Physical Chemistry C*, 121(8), 4635-4649. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b11652>

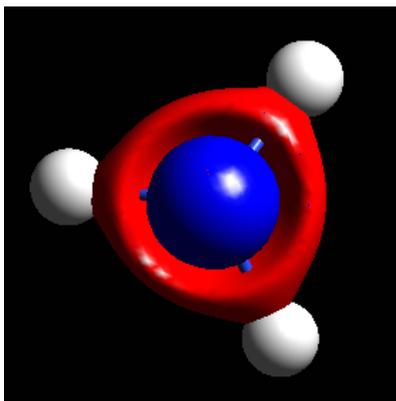


Uso de simetría en el software Nagual

José Alfredo Flores Ramos, Roberto Flores-Moreno

Departamento de Química, Universidad de Guadalajara

En esta contribución se describen las librerías de simetría implementadas en el software Nagual [1]. Nagual es una paquete de software de estructura electronica que además puede realizar calculos ab Initio de orbitales de proton, positron y otros tipos de partículas a nivel Hartree-Fock y correcciones basadas en funciones de Green. El algoritmo es capaz de determinar el grupo puntual establecido por la distribución de los núcleos. Posteriormente utiliza teoría de grupos y la representación del grupo en matrices ortogonales de 3×3 para construir diferentes representaciones reducibles e irreducibles que contienen la simetría del sistema inicial [2]. Utilizando la representación reducible de las operaciones de simetría en las funciones de base de un cálculo de estructura electrónica regular y el lema de Schur se obtienen combinaciones lineales adaptadas por simetría. La base adaptada por simetría es utilizada para bloquear las matrices requeridas para el cálculo de energía en las ecuaciones del proceso de convergencia de campo auto-consistente. Consecuentemente, los orbitales moleculares resultantes quedan identificados con una representación irreducible. Además se implementó el etiquetado con los símbolos de Mulliken [3]. De esta manera se obtiene información más detallada sobre la configuración electrónica molecular y se optimiza el tiempo de cómputo requerido para sistemas con alta simetría. Se presentarán ejemplos específicos de resultados obtenidos con el programa Nagual.





Referencias:

- [1] R. Flores-Moreno, J. A. Guerrero-Cruz, A. Venegas-Reynoso, H. N. Gonzalez-Ramirez, J. J. Villalobos-Castro, T. Tamayo-Mendoza, M. A. Diaz-Tinoco, J. A. Flores-Ramos, B. A. Zuniga-Gutierrez, M. U. Delgado-Jaime, J. F. H. Lew-Yee, J. M. del Campo, Nagual 1, Guadalajara Jal., México, 2019.
- [2] M. Tinkham, Group Theory and Quantum Mechanics. Dover Publications, 2003.
- [3] R. S. Mulliken, "Electronic structures of polyatomic molecules and valence. IV. electronic states, quantum theory of the double bond," Phys. Rev., vol. 43, pp. 279–302, Feb 1933.

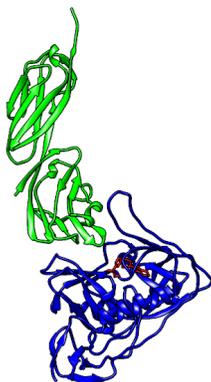


DINAMICA MOLECULAR DE 5 POTENCIALES INHIBIDORES DE ENTRADA DEL VIH-1

Raúl Márquez Avilés, Durbis Javier Castillo Pazos, Joaquín Barroso Flores

Instituto de Química UNAM

El Virus de Inmunodeficiencia Humana (VIH) inicia su ciclo de vida mediante la interacción de la glicoproteína gp120 ubicada en su superficie con la segunda región de la proteína CD4 de los linfocitos Th formando un complejo que permite la fusión posterior de la membrana viral con la membrana celular. La búsqueda de inhibidores de entrada para evitar la formación de este complejo en el proceso de generación de antiretrovirales ha sido enormemente estudiada desde el descubrimiento del virus a inicios del año 1980. En este proyecto se realizaron dinámicas moleculares en AMBER a 500 ns de las interacciones de cinco posibles inhibidores generados a partir del núcleo de piperazina de un compuesto base mediante un algoritmo de docking molecular y scoring previamente realizado. Se generaron trayectorias de 500 ns en un ensamble NPT y se calcularon las energías de unión por Poison-Boltzmann y Generalized Born, energías electrostáticas y de Van der Waals del complejo, así como mapas de potencial electrostático a partir de optimizaciones del ligando en cuestión, para conocer las interacciones principales que genera con las proteínas implicadas en la entrada del VIH y su posible inhibición. De este modo se encontró que los cinco ligandos seleccionados actúan como buenos inhibidores de entrada del VIH-1, interactuando con la cavidad Phe43 durante todo el proceso de simulación.





Referencias:

Castillo-Pazos, D. J., Romo-Mancillas, A. Barroso-Flores, J. 'Piperazine-based HIV-1 entry inhibitors: Massive in silico library design and screening for gp120 attachment inhibitors'.

Kwong, P. D., Wyatt, R., Robinson, J., Sweet, R. W., Sodroski, J. and Hendrickson, W. A. Structure of an HIV gp120 envelope glycoprotein in complex with the CD4 receptor and a neutralizing human antibody. Nature 1998. 393, 648-659.

Jorgensen, W. L. The Many Roles of Computation in Drug Discovery. Science. 2004. 303, 1813– 1818.

Arts, E. J. and Hazuda, D. J. HIV-1 antiretroviral drug therapy. Cold Spring Harbor Perspectives in Medicine. 2012. 2.

Moss, J. A. HIV/AIDS Review. Radiologictechnology Journal. 2013. 84, 247–270.

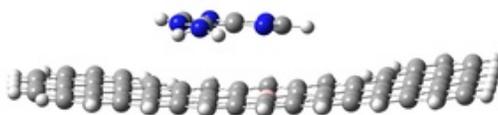


Nanocapas de grafeno con defectos para la adsorción y detección de nucleobases

Roberto Carrión Ramírez, Alan Miralrio, Ximena Martínez Coronel, Miguel Castro

1- Departamento de Física y Química Teórica, DEPg. Facultad de Química, UNAM, Del. Coyoacán, Ciudad, de México., 2- Departamento de Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Campus Toluca, Eduardo Monroy Cárdenas 2000, San Antonio Buenavista, 50110 Toluca, México.

En años recientes, se han diseñado y probado diversos dispositivos de escala nanométrica para el secuenciamiento del DNA a alta velocidad basados en el grafeno. En este trabajo, se reporta un estudio teórico, dentro de la teoría del funcional de la densidad con correcciones de dispersión, de las propiedades de las nucleobases que forman al DNA y al RNA (adenina, timina, guanina, citosina y uracilo) al interactuar con nanocapas de grafeno con defectos puntuales. La adsorción de las nucleobases en las nanocapas se estudia en profundidad. Las nanocapas de grafeno fueron inicialmente activadas químicamente mediante defectos puntuales intrínsecos (defectos de Stone-Wales) y extrínsecos (átomos sustitucionales de boro y nitrógeno). La evidencia inicial apunta a que los defectos extrínsecos activaron en mayor medida a las nanocapas de grafeno. Basados en esto, se estudiaron diversas geometrías de las nanocapas de grafeno, esto con el fin de determinar el diseño más favorable para la detección de las nucleobases. Los análisis se realizaron en términos de las energías de adsorción, energías de ionización, afinidades electrónicas, orbitales moleculares de frontera, distribuciones de carga, espectros vibracionales y mapas de potencial electrostático. Los resultados obtenidos se compararon con aquellos obtenidos para las nucleobases en fase gas y para el grafeno con defectos puntuales.





Referencias:

Heerema, S. J., & Dekker, C. (2016). Graphene nanodevices for DNA sequencing. *Nature nanotechnology*, 11(2), 127.



Modelación Computacional de Nanotubos de Nitruro de Boro Aplicados a la Biomedicina

M.C. Jonatan Isaí Sánchez Sánchez, Dr. Juan Francisco Rivas Silva, Dr. Dolores García Toral

IFUAP

Los nanotubos de Nitruro de Boro (BNNTs) tienen excelentes propiedades que los hace viables para diversas aplicaciones, una de ellas en la biomedicina. En este trabajo se analizan dos tipos de nanotubos, los llamados “armchair” y los “zigzag” (nombres que provienen de sus conformaciones geométricas) usando diferentes funcionales DFT, calculando en particular dos de sus propiedades fisicoquímicas importantes para su notoria aplicación médica, el momento dipolar y la energía de solvatación. Se halla que es importante averiguar como estas propiedades están relacionadas entre sí varían y como varían respecto a la geometría. Una vez obtenido el nanotubo que será viable para su estudio en el área mencionada, se hace uso del método semiempírico PM7 en Gaussian 16 para estudiar el encapsulamiento del medicamento anticancerígeno Carboplatin en fase gaseosa y con agua como solvente de por medio (usando la aproximación PCM). En ambas fases se hace una optimización de geometría, es decir, las variables se relajan en todas las direcciones buscando un mínimo de energía. Por último, se proponen métodos de vectorización de medicamentos por medio de estos BNNTs.



Referencias:

- [1] G. Cao, Nanostructures and Nanomaterials: Synthesis, Properties and Applications, Imperial College Press, University of Washington, USA (2004).
- [2] Z. Zhou, J. Zhao, Z. Chen, P. V. R. Schleyer, Atomic and Electronic Structures of Fluorinated BN Nanotubes: Computacional Study, *J. Phys. Chem. B*, 110: 25678-25685 (2006).
- [3] Y. Noel, P. DÁrco, R. Demichelis, C. M. Zicovich-Wilson, R. Dovesi, On the use of symmetry in the ab initio quantum mechanical simulation of nanotubes and related materials, *J. Comput. Chem.*, 31: 855-862 (2010).
- [4] P. DÁrco, Y. Noel, R. Demichelis and R. Dovesi, Single-layered chrysotile nanotubes: a quantum mechanical ab initio simulation, *J. Chem. Phys.*, 131: 204701 (2009).
- [5] A. Rubio, J. L. Corkill, M. Cohen, Theory of Graphitic Boron Nitride Nanotubes, *Phys. Rev. B*, 49 (7): 5081-5084 (1994).
- [6] N. G. Chopra, R. L. Luyken, K. Cherry, V. H. Crespi, M. L. Cohen, S. G. Louie, A. Zettl, Boron Nitride Nanotubes, *Science*, 269: 966-967 (1995).
- [7] Y. F. Zhukovskii, S. Piskunov, N. Pugno, B. Berzina, L. Trinkler, S. Bellucci, Ab Initio Simulations on the Atomic and Electronic structure of Single- Walled BN Nanotubes and Nanoarches, *J. Phys. Chem. Solids*, 70: 796-803 (2009).
- [8] Z. Gao, C. Zhi, Y. Bando, D. Golberg, T. Serizawa, Nocovalent Functionalization of Boron Nitride Nanotubes in Aqueous Media Opens Application Roads in Nanobiomedicine, *Nanobiomedicine* 1 (2014) 7.
- [9] Z. Khatti, S. Majid, Boron Nitride Nanotubes as a Dilevery System for Platinum Drugs: Drug Encapsulation and Diffusions Coeficient Prediction, *Eur. J. Pharm. Sci.*, 88: 291-297 (2016).
- [10] G. Ciofani, V. Raffa, A. Menciassi, A. Cuschieri, Boron Nitride Nanotubes: An Innovative Tool for Medicine, *Nano Today*, 4 (1): 8-10 (2008).
- [11] Z. Mahdivafar, R. Moridzadeh, Theoretical Prediction of Encapsulation and Adsorption of Platinum-Anticancer Drugs Into Sigle Walled Boron Nitride and Carbon Nanotubes, *J. Incl*



Phenom. Macrocycl. Chem 79 (2014): 443-357.

[12] E. Shakerzadeh, S, Noorizadeh , A First Principle Study of Pristine and Al-doped Boron Nitride Nanotubes Interacting with Platinum-Based Anticancer Drugs, Physica E 57(2014): 47-55.

[13] E. Durverger, T. Gharbi, E. Delabrousse, F. Picaud, Quantum Study of Boron Nitride Nanotubes Functionalized with Anticancer Molecules, Phys. Chem 16 (2014) 18425.



Desempeño de funcionales de intercambio híbridos de un parámetro en átomos confinados

Michael Adán Martínez Sánchez*, Francisco Adrián Duarte Alcaráz**, Marcos Rivera Almazo*, Rubicelia Vargas*, Rodrigo Arturo Rosas Burgos*** y Jorge Garza*

*Departamento de Química, División de Ciencias Básicas e Ingeniería. Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina. Iztapalapa. C. P. 09340. Ciudad de México. México., **Departamento de Investigación en Física. División de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Sonora. Blvd. Luis Encinas y Rosales S/N, Col. Centro. Hermosillo. C.P. 83000. Sonora. México., ***Departamento de Física, Universidad de Sonora. Blvd. Luis Encinas y Rosales S/N, Col. Centro. Hermosillo. C.P. 83000 Sonora, México

En este trabajo, el desempeño de funcionales de intercambio híbridos de un parámetro, diseñados con una fracción del intercambio exacto obtenido a partir del método Hartree-Fock (HF) y una fracción correspondiente al funcional de intercambio PBE, es analizado para el estudio de átomos confinados por paredes penetrables e impenetrables, donde el intercambio exacto es tomado como referencia. Encontramos que estos funcionales híbridos dan una descripción cualitativa apropiada para átomos confinados por paredes impenetrables; sin embargo, para el caso de paredes penetrables la situación es distinta, ya que estos funcionales predicen resultados apreciablemente diferentes a los obtenidos por el método HF en el régimen de confinamientos extremos. De igual forma, en este mismo régimen confinamientos extremos, mostramos que los funcionales de gradiente generalizado son incapaces de dar una buena descripción de la densidad electrónica del átomo confinado por paredes penetrables; sin embargo, esta tendencia puede ser aliviada por la inclusión del intercambio exacto en el funcional de intercambio híbrido de un parámetro. Aunque el modelo de átomo confinado es extremadamente simple, es capaz de reproducir algunas características predichas por métodos sofisticados de estructura electrónica diseñados para sistemas cristalinos; en consecuencia, este modelo puede ser utilizado para examinar funcionales de intercambio definidos dentro de la teoría de funcionales de la densidad[1].



Referencias:

- [1] Francisco-Adrián Duarte-Alcaráz, Michael-Adán Martínez-Sánchez, Marcos Rivera-Almazo, Rubicelia Vargas, Rodrigo-Arturo Rosas-Burgos and Jorge Garza 2019 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 52 135002



Propiedades luminiscentes del aminoácido Triptófano en solución

Diana Milena Uriza Prias, Juan Francisco Rivas Silva, Antonio Méndez Blas

IFUAP

Estudiamos de forma teórica y experimental las propiedades luminiscentes del aminoácido Triptófano (TRP) debido a su importancia en el campo de la biología, medicina, física y química, ya que se encuentra en muchas de las proteínas fundamentales, dando lugar a procesos bioquímicos importantes como los de transferencia de energía. Se ha estudiado por más de 70 años la fluorescencia que genera esta molécula y que la hace importante, por ejemplo para usarse como biomarcador debido a su sensibilidad al ambiente local tanto en medios polares como no polares. Centrándonos en el estudio de soluciones preparadas con TRP y agua en diferentes concentraciones, encontramos experimentalmente una fuerte dependencia de sus espectros de excitación como de emisión en el valor de la concentración del compuesto en las soluciones, con aspectos relevantes para altos valores. Para obtener explicaciones cualitativas de ello se realizan cálculos teóricos a nivel semiempírico y de DFT en modelos convenientes.



Referencias:

Protein Fluorescence, J.R. Lacowicz (Springer, Berlin, Germany, 2006)

G. Weber, Biochem J. 75, 335 (1960)

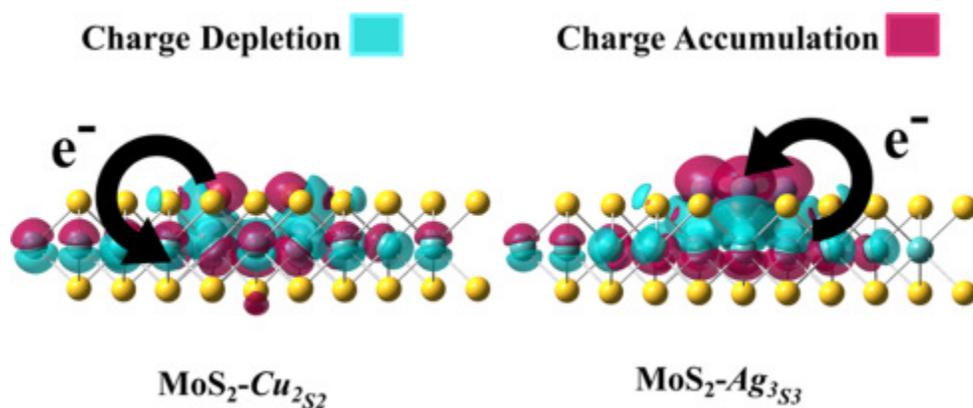


Activación química de monocapas de disulfuro de molibdeno mediante átomos sustitucionales

Alan Miralrío, Eduardo Rangel, Miguel Castro

Departamento de Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Campus Toluca, Eduardo Monroy Cardenas 2000, San Antonio Buenavista, 50110 Toluca, México., Materiales Avanzados y Sistemas Energéticos, Escuela Superior de Apan, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Carretera Apan-Calpulalpan Km. 8, Col. Chimalpa, Apan, 43920, Hidalgo, México., Departamento de Física y Química Teórica, DEPg, Facultad de Química, UNAM, Del. Coyoacán, Ciudad, de México.

Monocapas de disulfuro de molibdeno, con hasta tres átomos sustitucionales de Cu y Ag en sitios de S, se estudiaron por primera vez mediante la teoría del funcional de la densidad con correcciones de dispersión. Se espera que las especies embebidas permanezcan estables y fijas en sus sitios dado que se obtuvieron energías de enlace de más de -2.6 eV. Se observó la aparición de nuevos estados en la brecha prohibida, resultando en la reducción del gap energético a medida que se añaden más átomos sustitucionales. Mayormente, estos nuevos estados tienen contribuciones de los orbitales d del Mo y p de los átomos embebidos. La brecha energética fue reducida hasta 0.10 y 0.35 eV, para los trímeros de Cu y Ag, respectivamente. Los átomos sustitucionales y los dímeros donan carga a la capa intermedia de Mo, mientras que los trímeros la acumulan. El potencial electrostático más bajo también se obtuvo en aquellas zonas que rodean a los defectos. Los índices condensados de Fukui revelaron que todos los sistemas incrementaron su reactividad química alrededor de los átomos embebidos, tanto para ataques nucleofílicos como electrofílicos. Así, los cambios producidos en las propiedades energéticas, electrónicas y de reactividad de todos los sistemas analizados apuntan a un nuevo material promisorio para la absorción de gases.





Referencias:

Miralrio, A., Rangel, E., & Castro, M. (2019). Activation of MoS₂ monolayers by substitutional copper and silver atoms embedded in sulfur vacancies: A theoretical study. *Applied Surface Science*, 481, 611-624.

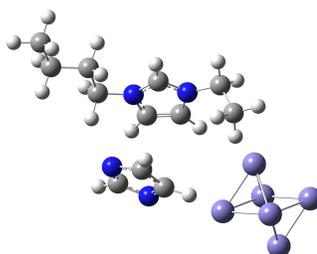


Líquidos iónicos como inhibidores de la corrosión en acero: Un estudio teórico.

Ashley Acosta, Alan Miralrio, Miguel Castro

1-Departamento de Física y Química Teórica, DEPg. Facultad de Química, UNAM, Del. Coyoacán, Ciudad, de México., 2-Departamento de Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Campus Toluca, Eduardo Monroy Cárdenas 2000, San Antonio Buenavista, 50110 Toluca, México.

La corrosión es un proceso natural producido por las interacciones de tipo electroquímicas de los materiales con el ambiente que conduce a su deterioro y debilitamiento. [1] El alto costo económico asociado a los daños causados por la corrosión se contrapone a los riesgos ambientales que son generados por el uso de determinados inhibidores de corrosión. La búsqueda de nuevas sustancias que no afecten al ambiente es un tópico de especial interés. [2] En este contexto, se evalúan las propiedades que como inhibidores de la corrosión en acero presentan diferentes líquidos iónicos (imidazolato de 1-butil-3-etil imidazolio, imidazolato de 1-butil-3-propil imidazolio e imidazolato de 1-butil 3-hexil imidazolio). Para elucidar los detalles estructurales, electrónicos y energéticos del mecanismo de adsorción se utilizó la aproximación de cúmulos, en la cual se empleó un cúmulo de Fe_6 , bajo la teoría de los funcionales de la densidad electrónica con correcciones por dispersión, D2 [3,4], utilizando un funcional de intercambio-correlación vía GGA [5-11], BPW91 [12-14], con la base orbital 6-31++G(2d,2p) [15]. Los análisis se hicieron en términos de las energías de adsorción, energías de ionización, afinidades electrónicas, orbitales moleculares de frontera, distribuciones de carga, topología de la densidad electrónica y mapas de potencial electrostático. Los resultados teóricos obtenidos se comparan con datos experimentales determinados mediante mediciones con métodos electroquímicos.





Referencias:

1. R.W. Revie, H.H. Uhling, Corrosion and Corrosion Control, Fourth ed. Wiley, (2007) 1–3.
2. M. Ladan, W.J. Basirun, S.N. Kazi, F.A. Rahman, Corrosion protection of AISI 1018 steel using Co-doped TiO₂/polypyrrole nanocomposites in 3.5% NaCl solution, Mater. Chem. Phys. 192 (2017) 361-373. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2017.01.085>.
3. S. Grimme, Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction, J. Comput. Chem. 27 (2006) 1787-1799.
<https://doi.org/10.1002/jcc.20495>.
4. S. Grimme, Density functional theory with London dispersion corrections, vol. 1, Wiley Interdiscip Rev Comput Mol Sci, (2011), pp. 211-228. <https://doi.org/10.1002/wcms.30>.
5. A. Zarrouk, H. Zarrok, Y. Ramli, et al., Inhibitive properties, adsorption and theoretical study of 3,7-dimethyl-1-(prop-2-yn-1-yl)quinoxalin-2(1H)-one as efficient corrosion inhibitor for carbon steel in hydrochloric acid solution, J. Mol. Liq. 222 (2016) 239-252. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2016.07.046>.
6. M. Yadav, T.K. Sarkar, T. Purkait, Amino acid compounds as eco-friendly corrosion inhibitor for N80 steel in HCl solution: Electrochemical and theoretical approaches, J. Mol. Liq. 212 (2015) 731-738. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2015.10.021>.
7. X. Li, X. Xie, S. Deng, G. Du, Two phenylpyrimidine derivatives as new corrosion inhibitors for cold rolled steel in hydrochloric acid solution, Corros. Sci. 87 (2014) 27-39. <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2014.05.017>.
8. J. Cruz, E. Garcia-Ochoa, M. Castro, Experimental and Theoretical Study of the 3-Amino-1,2,4-triazole and 2-Aminothiazole Corrosion Inhibitors in Carbon Steel, J. Electrochem. Soc. 150 (2003) B26. <https://doi.org/10.1149/1.1528197>.
9. A. Ehsani, M.G. Mahjani, R. Moshrefi, et al., Electrochemical and DFT study on the inhibition of 316L stainless steel corrosion in acidic medium by 1-(4-nitrophenyl)-5-amino-1H-tetrazole, RSC Adv. 4 (2014) 20031-20037. <https://doi.org/10.1039/C4RA01029A>.
10. G. Gece, S. Bilgiç, Quantum chemical study of some cyclic nitrogen compounds as



corrosion inhibitors of steel in NaCl media, *Corros. Sci.* 51 (2009) 1876-1878. <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2009.04.003>.

11. I.B. Obot, N.O. Obi-Egbedi, 2,3-Diphenylbenzoquinoxaline: A new corrosion inhibitor for mild steel in sulphuric acid, *Corros. Sci.* 52 (2010) 282-285. <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2009.09.013>.

12. G.L. Gutsev, C.W. Bauschlicher, Electron Affinities, Ionization Energies, and Fragmentation Energies of Fe_n Clusters ($n = 2-6$): A Density Functional Theory study, *J. Phys. Chem.* 107 (2003) 7013-7023. <https://doi.org/10.1021/jp030288p>.

13. M. Castro, P. Mareca, Theoretical Study of Neutral and Charged $Fe_7-(C_6H_6)_m$, $m=1, 2$ Rice-ball clusters, *J. Phys. Chem.* 118 (2014) 5548-5558. <https://doi.org/10.1021/jp504561j>.

14. M. Castro, The role of the Jahn-Teller distortions on the structural, binding, and magnetic properties of small Fe_n clusters, $n=7$, *Int. J. Quant. Chem.* 64 (1997) 223-230. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-461X\(1997\)64:2%3c223::AID-QUA9%3e3.0.CO;2-Y](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-461X(1997)64:2%3c223::AID-QUA9%3e3.0.CO;2-Y).

15. I. Valencia, A. Guevara-García, M. Castro, Bonding and Magnetism of $Fe_6-(C_6H_6)_m$, $m=1, 2$, *J. Phys. Chem.* 113 (2009) 6222-6238. <https://doi.org/10.1021/jp811065w>.



Adsorción del cisplatino en prototipos finitos de óxido de grafeno

Ma del Refugio Cuevas Flores, Massimiliano Bartolomei, Marco Antonio García Revilla

Unidad Académica de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Zacatecas. Zacatecas, México., Instituto de Física Fundamental, Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Madrid, ES., Departamento de Química, Universidad de Guanajuato, Guanajuato, México

El óxido de Grafeno (GO) tiene aplicaciones potenciales como nanoacarreador del cisplatino (CP), el cual, es un fármaco utilizado en tratamiento de cáncer¹. A diferencia del grafeno, el GO tiene los grupos epóxido, hidróxido y carboxilo que le confieren mayor solubilidad². Los complejos formados entre los prototipos de GO y CP se optimizaron al nivel de teoría PBE-D3(BJ)³. Para entender la naturaleza de la interacción entre los dos complejos se efectuó un análisis EDA⁴ determinando la energía de interacción y sus contribuciones, ΔE_{elst} , ΔE_{orb} , ΔE_{exch} y ΔE_{disp} . Los resultados mostraron que la energía total de interacción se incrementa con el tamaño del soporte. En todos los casos los soportes que contienen al grupo hidróxido tienen una mayor energía de interacción con CP, alrededor de 10 kcal mol⁻¹ mayor que para los soportes no oxidados, esto podría ser debido a la formación de un enlace de hidrógeno entre el amoníaco del CP y el grupo hidróxido del GO. Estos resultados contrastan con los obtenidos para los soportes no oxidados en los cuales la contribución de dispersión domina. Esto permite concluir que el CP tiene una mayor energía de adsorción en el GO respecto del grafeno y mayor solubilidad en medio acuoso, lo cual es deseable para un nanoacarreador.



Referencias:

P. Liu et al., European Journal of Pharmaceutical Sciences 121 (2018) 319–329.

D.R. Dreyer et al., Chem. Soc. Rev. 39 (2010) 228.

J. Perdew et al., Phys. Rev. Lett. 77(1996) 3865.

F.M. Bickelhaupt et al., Chem. Eur. J. 12 (2006) 9196-9216.

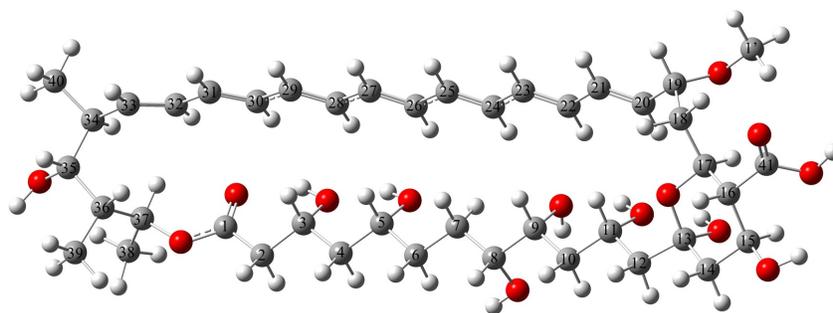


Estudio de la capacidad pro-oxidante de la anfotericina B en medio lipídico

Manuel Eusebio Medina López, Ángel Rafael Trigos Landa

Centro de Investigación en Micología Aplicada, Universidad Veracruzana, Médicos 4, Unidad del bosque 91010, Xalapa, Veracruz, México.

Se llevó a cabo el estudio de la capacidad pro-oxidante de la anfotericina B empleando un modelo químico (AMF) con similares características. El estudio de la capacidad pro-oxidante de la AMF se llevó a cabo considerando la teoría de funcionales de la densidad. En este estudio se consideró el mecanismo de transferencia electrónica, empleando la teoría de Marcus para su estudio y considerando el medio lipídico para simular las condiciones de la membrana celular. Los resultados termodinámicos muestran que la AMF puede ser una molécula pro-oxidante a través de los mecanismos tipo I y II; sin embargo, los resultados cinéticos indican que la AMF es una molécula pro-oxidante principalmente por el mecanismo tipo II. La AMF muestra una constante de velocidad de reacción calculada para los mecanismos tipo I y II de 8.94×10^9 y $1.89 \times 10^{10} \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$, respectivamente; mientras que la velocidad de reacción total fue de $2.79 \times 10^{10} \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Por lo tanto, los resultados de este estudio brindan soporte a la propiedad pro-oxidante de la anfotericina B en medio lipídico; de esta forma, este mecanismo podría ser importante en la actividad antifúngica de la anfotericina B.



AMF



Referencias:

César Espinoza, Ángel Trigos, and Manuel E. Medina, Theoretical Study on the Photosensitizer Mechanism of Phenalenone in Aqueous and Lipid Media. *J. Phys. Chem. A* 2016, 120, 6103-6110.

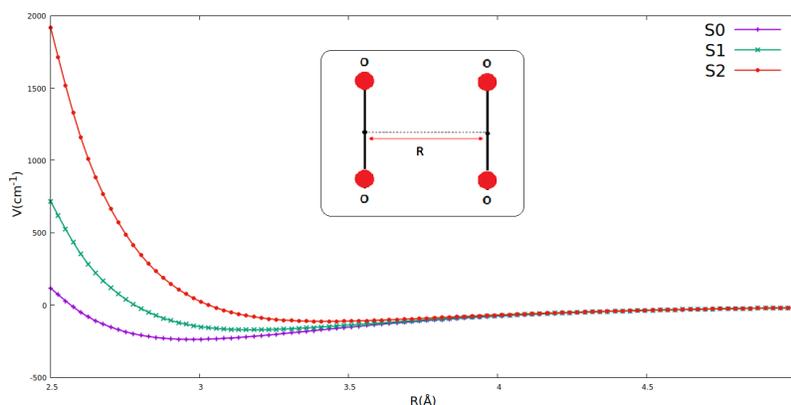


Potenciales Intermoleculares dependientes del espín: el caso del dímero de oxígeno

Mónica A. Valentín-Rodríguez, Ramón Hernández-Lamoneda

Universidad Autónoma del Estado de Morelos

El interés por el dímero de oxígeno proviene de su presencia en una variedad de áreas de la ciencia tales como la físico-química atmosférica[1] y las fases condensadas.[2] La determinación precisa de los parámetros de equilibrio y de las fuerzas intermoleculares que rigen al complejo, son un reto de abordar tanto por perspectivas teórica como experimental.[3-5] Dentro de una metodología restringida los estados $S=0,1$ del complejo dan lugar a cuasi-degeneraciones invalidando el uso de metodología monoreferencial. Como alternativa para eliminar los problemas de la metodología multireferencial está la utilización de métodos no restringidos a través de la herramienta Antiferromagnetic Coupling de Gaussian. De un análisis de las representaciones acoplada y desacoplada del espín concluimos que los cálculos no restringidos aproximan al estado triplete. Utilizando el Hamiltoniano de Heisenberg y los potenciales de los estados $S=1,2$ calculados a nivel UCCSD(T) con extrapolación de base AVTZ/AVQZ, obtenemos al conjunto de los potenciales más exactos a la fecha. Realizamos comparaciones estrictas con las determinaciones experimentales más precisas publicadas: coeficientes radiales obtenidos de la inversión de datos de secciones eficaces[3] y constante de acoplamiento obtenida de espectroscopia electrónica.[6] También hablaremos de la dependencia de los potenciales con el espín y sus implicaciones para la fase ϵ [7] de alta presión.





Referencias:

Slanger, T. G.; Copeland, R. A. Chem. Revs. 2003, 103.

Gorelli, F. A.; Ulivi, L.; Santoro, M.; Bini, R. Phys. Rev. Lett. 1999, 83.

Aquilanti, V.; Ascenzi, D.; Bartolomei, M.; Cappelletti, D.; Cavalli, S.; Víttores, M. d. C.; Pirani, F. J. Amer. Chem. Soc. 1999, 121, 10794.

Bartolomei, M.; Carmona-Novillo, E.; Hernandez, M. I.; Campos-Martinez, J.; Hernandez-Lamonedá, R. J. Chem. Phys. 2008, 128, 214304.

Bartolomei, M.; Hernandez, M. I.; Campos-Martinez, J.; Carmona-Novillo, E.; Hernandez-Lamonedá, R. Physical chemistry chemical physics : PCCP 2008, 10, 5374.

Santoro, M.; Gorelli, F. A.; Ulivi, L.; Bini, R.; Jodl, H. J. Phys. Rev. B 2001, 64.

Crespo, Y.; Fabrizio, M.; Scandolo, S.; Tosatti, E. Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. 2014, 11.



Diseño de quelantes utilizados en el tratamiento de enfermedades neurodegenerativas

Romina Castañeda Arriaga, Adriana Pérez Gonzalez, Annia Galano Jiménez

Universidad Autónoma Metropolitana.

La quelación de metales sirve como una estrategia terapéutica para el tratamiento de la Enfermedad de Alzheimer. En este trabajo se realizó una búsqueda sistemática de compuestos derivados del 2-(2-hidroxifenil)-benzoxazole (HBX), un compuesto utilizado como agente quelante. Para esto se utilizaron códigos computacionales los cuales incluyen la determinación de propiedades fisicoquímicas así como refractividad molar. Se evaluaron la biodisponibilidad y viabilidad de administración oral según los criterios de Lipinski, Ghose y Veber. Además, se hizo la estimación de toxicidad utilizando el código computacional T.E.S.T., basado en relaciones estructura actividad. Se evaluaron los siguientes descriptores de toxicidad: mutagenicidad de Ames, LD₅₀, LCF₅₀, LCD₅₀ e IGC₅₀. Se estimó la accesibilidad sintética utilizando el código computacional SILVIA-XT, basado en relaciones estructura actividad. Con esta información, se identificaron los compuestos con mejores propiedades para su estudio computacional de capacidad antioxidante, usando métodos de estructura electrónica dentro del marco de la teoría de funcionales de la densidad, necesarios para obtener los datos termodinámicos y cinéticos que permitan evaluar la capacidad antioxidante primaria, atrapadores de radicales libres. Para esto se utilizará la metodología QM-ORSA. También se evaluó la capacidad antioxidante preventiva, en particular la inhibición de la producción de radicales OH en presencia de iones metálicos.



Referencias:

www.molinspiration.com

http://www.niper.gov.in/pi_dev_tools/DruLiToWeb/DruLiTo_index.html

Boda K, Seidel T, & Gasteiger J (2007) Structure and reaction based evaluation of synthetic accessibility. *J. Comput. Aided Mol. Des.* 21(6):311-325.

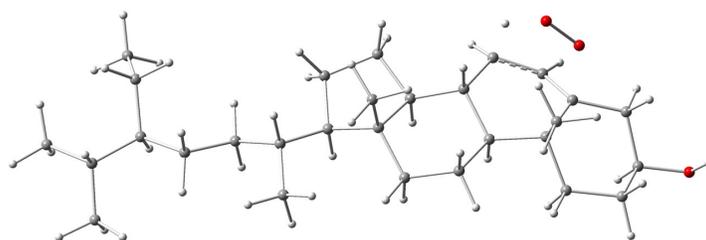


ESTUDIO TEÓRICO DEL DAÑO OXIDATIVO A β -SITOSTEROL POR OXÍGENO SINGULETE

Jorge Manuel Ortiz Escarza, Ángel Rafael Trigos Landa, Manuel Eusebio Medina López

Doctorado en Ciencias Biomédicas, Universidad Veracruzana, Luis Castelazo Ayala, Industrial las Animas, 91190, Xalapa, Veracruz, México, Centro de Investigación en Micología Aplicada, Universidad Veracruzana, Médicos 5, Unidad del Bosque, 91010, Xalapa, Veracruz, México

En condiciones de estrés oxidativo las especies reactivas de oxígeno son capaces de dañar biomoléculas de gran importancia para el organismo, como el ADN, las proteínas, los carbohidratos y los lípidos. El β -sitosterol es el esteroide más importante en las plantas y forma parte fundamental en la dieta del ser humano, además se ha observado que es susceptible a reacciones de oxidación en presencia de especies reactivas de oxígeno. En este trabajo se realizó el estudio termodinámico y cinético de química computacional del daño oxidativo a β -sitosterol por oxígeno singulete, en medio lipídico, considerando que el mecanismo Alder-eno por el cual se lleva a cabo esta reacción es a través de la formación de un peróxido intermediario previo a la abstracción del átomo de hidrógeno alílico. Se consideraron 4 rutas de reacción posibles, dependiendo del hidrógeno que es abstraído en el segundo paso: 6 α , 6 β , 7 α y 7 β , determinando la factibilidad termodinámica de cada una de estas. La velocidad de reacción total calculada para la reacción entre β -sitosterol y oxígeno singulete fue de $1.03 \times 10^4 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Considerando que la velocidad de reacción de ácidos grasos como el ácido oleico con oxígeno singulete es de $1.7 \times 10^4 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$, podemos concluir que el β -sitosterol competirá con los ácidos grasos por el oxígeno singulete presente en el organismo, fungiendo así como un antioxidante.





Referencias:

Galano, A. y Alvarez-Idaboy, J. (2013). A computational methodology for accurate predictions of rate constants in solution: Application to the assessment of primary antioxidant activity. *Journal of Computational Chemistry*, 34(28), 2430-2445.

McCarthy, F., Chopra, J., Ford, A., Hogan, S., Kerry, J., & O'Brien, N., Ryan E. y Maguire A. (2005). Synthesis, isolation and characterisation of β -sitosterol and β -sitosterol oxide derivatives. *Organic & Biomolecular Chemistry*, 3(16), 3059.

Sudhamalla, B., Gokara, M., Ahalawat, N., Amooru, D. G., y Subramanyam, R. (2010). Molecular dynamics simulation and binding studies of β -sitosterol with human serum albumin and its biological relevance. *The Journal of Physical Chemistry B*, 114(27), p. 9054.

Wilkinson, F., Helman, W. P., & Ross, A. B. (1995). Rate constants for the decay and reactions of the lowest electronically excited singlet state of molecular oxygen in solution. An expanded and revised compilation. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 24(2), 663-677.

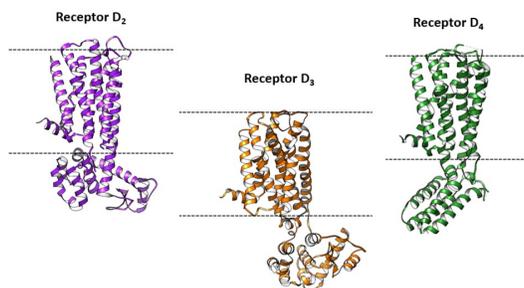


Búsqueda de compuestos antipsicóticos novedosos: una aproximación por QSPR y docking

Navarrete-Herrera, Diana Saray, Razo-Hernández, Rodrigo Said

Universidad Autónoma del Estado de Morelos

En la actualidad, la esquizofrenia es uno de los padecimientos de carácter mundial que afecta a más de 21 millones de personas. Algunos de sus síntomas son las alteraciones en la percepción de la realidad, alucinaciones, cambios a nivel conductual y emocional, entre otros. Se ha determinado que el exceso de dopamina en las áreas mesocorticales y mesolímbicas está asociado a la presencia de las conductas psicóticas. Por ello los receptores dopaminérgicos tipo D2 son un sitio diana clave para el desarrollo de fármacos antipsicóticos. Los fármacos antipsicóticos actuales tienen varios efectos adversos debido a su baja selectividad por su receptor diana. En este trabajo se realizó la búsqueda de un andamio molecular con posible actividad antagonista sobre los receptores dopaminérgicos, empleando herramientas computacionales. Para ello completamos un estudio QSPR para obtener un modelo que nos relacione la estructura molecular y la permeabilidad hacia la barrera hematoencefálica. Posteriormente, hicimos un cribado molecular en bibliotecas virtuales para identificar posibles moléculas antipsicóticas empleando como criterio de búsqueda ciertas características estructurales y físicoquímicas de interés. Por último, efectuamos estudios de acoplamiento molecular (docking), para determinar la energía de interacción entre nuestras moléculas propuestas y su blanco biológico.





Referencias:

Barbato, A. Division of Mental Health and Prevention of Substance Abuse (1996).

Miyamoto, S.; et al. Mol. Psychiatry 17, 1206–1227 (2012).

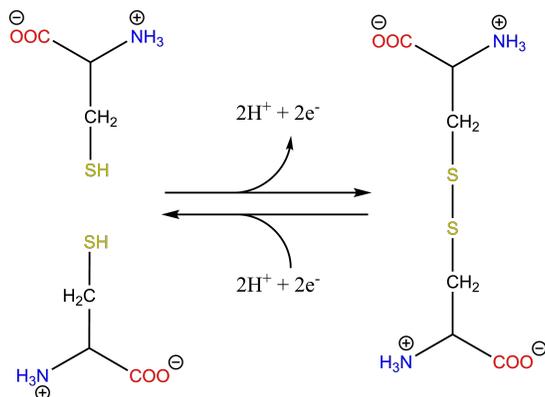


Potencial redox en la formación de enlaces disulfuro.

Paul Jessus Manjarrez Escobar., Dra. Nelly Ma. de la Paz Gonzalez Rivas.

Universidad Autónoma del Estado de México., Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UNAM-UAEMex.

Los enlaces disulfuro presentes en proteínas desempeñan diversas funciones biológicas como la activación y/o inhibición. Los enlaces disulfuro estabilizan la conformación de un péptido, sin embargo, los grupos tiol pueden ser sometidos a la transferencia de uno o dos electrones para generar productos oxidados, ya que la reacción de interconversión tiol-disulfuro se ve influenciada por el potencial RedOx, el estudio se enfoca en la descripción de los potenciales estándar de reducción asociados a la formación del enlace S-S. El cálculo de energías termodinámicas, como la energía de atomización molecular o la entalpia de formación con una precisión química, son un punto de partida para el requerimiento en el análisis de potenciales RedOx, donde se involucran las energías libres. Los funcionales actualmente disponibles en DFT no cuentan con la precisión adecuada. Métodos de alto nivel como; CCSD(T), QCISD(T), CISDTQ y MP96 con bases grandes, pueden hacerlo, pero implican un costo computacional elevado, excepto para moléculas pequeñas. Por lo que el método G3(MP2) es una alternativa para el estudio de sistemas de gran tamaño.





Referencias:

Ragsdale, S. W.; Yi, L. Thiol = Disulfide Redox Switches in the Regulation of Heme Binding to Proteins. 2011, 14 (6).

Groitzl, B.; Jakob, U. Thiol-Based Redox Switches. BBA - Proteins Proteomics 2014.

Curtiss, L. A.; Redfern, P. C.; Raghavachari, K.; Rassolov, V.; Pople, J. A. Gaussian-3 Theory Using Reduced Møller-Plesset Order Gaussian-3 Theory Using Reduced Mo. 1999, 4703, 1–8

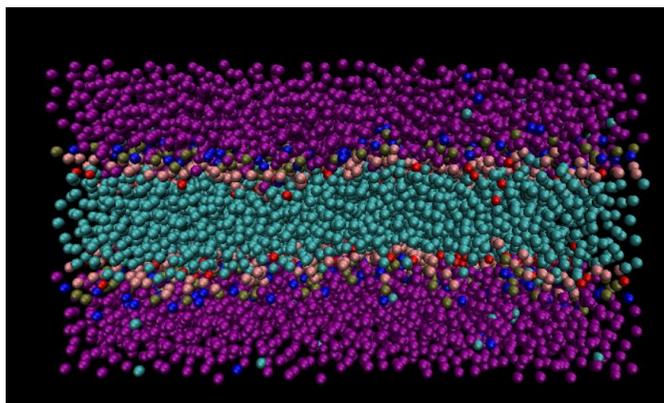


El grado de oxidación de un modelo de membrana celular y la respuesta en sus propiedades

Hugo Aceves-Luna, Daniel Glossman-Mitnik, Norma Flores-Holguín

Laboratorio Virtual NANOCOSMOS, Departamento de Medio Ambiente y Energía, Centro de Investigación en Materiales Avanzados S.C.

El estrés oxidativo juega un papel importante en la regulación de procesos vitales en organismos vivos: por ejemplo, la respuesta inmune. Las especies de oxígeno reactivo pueden reaccionar químicamente con los constituyentes de las células, dando lugar a daños irreversibles. La primera línea de defensa de las células es la membrana celular. [1] [2] Existen señales que manifiestan cuando los componentes de una membrana están sufriendo una oxidación como: un incremento en el área por lípido, disminución en el grosor de la bicapa y el intercambio de los grupos oxidados hacia la superficie de la bicapa. [1-4][5-8] En esta investigación se llevó a cabo la simulación con dinámica molecular de diferentes modelos de membrana de DOPC cada uno con diferente porcentaje de lípidos oxidados (0, 9, 18, 20, 24, 27) con relación a la cantidad de lípidos totales que pueden contener en cada membrana, con el fin de observar el efecto que presenta el grado de oxidación de los lípidos en la estructura de la membrana y evaluar sus propiedades a través del tiempo, los cálculos se realizaron con el programa Gromacs 5.0.7 [9,10] y el campo de fuerza MARTINI [11,12]. Encontrando que a medida que la concentración de lípidos oxidados aumenta propicia daños en la membrana reflejados en el aumento en el área por lípido y la disminución en el grosor de esta al igual que el cambio en el empaquetamiento de la membrana.





Referencias:

- [1] Guo, Y.; Baulin, V. A.; Thalmann, F. *Soft Matter* 2016, 12 (1), 263–271.
- [2] Fabre, G.; Hänchen, A.; Calliste, C. A.; Berka, K.; Banala, S.; Otyepka, M.; Süßmuth, R. D.; Trouillas, P. *Bioorganic Med. Chem.* 2015, 23 (15), 4866–4870.
- [3] Fernández, M.; Marín, R.; Proverbio, F.; Chiarello, D. I.; Ruetter, F. *Int. J. Quantum Chem.* 2017, 117 (21), 1–13.
- [4] Saha, S.; Verma, R. *J. Chem. Phys. Lipids* 2018, 213 (October 2017), 76–87.
- [5] Lee, H. J. *Phys. D. Appl. Phys.* 2018, 51, 1–10.
- [6] Fei, Q.; Kent, D.; Botello-Smith, W. M.; Nur, F.; Nur, S.; Alsamarah, A.; Chatterjee, P.; Lambros, M.; Luo, Y. *Sci. Rep.* 2018, 8 (1), 1–12.
- [7] Lyu, Y.; Xiang, N.; Mondal, J.; Zhu, X.; Narsimhan, G. *J. Phys. Chem. B* 2018, [acs.jpcc.7b10566](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b10566).
- [8] Van der Paal, J.; Neyts, E. C.; Verlaack, C. C. W.; Bogaerts, A. *Chem. Sci.* 2016, 7 (1), 489–498.
- [9] Abraham, M. J.; Murtola, T.; Schulz, R.; Páll, S.; Smith, J. C.; Hess, B.; Lindahl, E. *SoftwareX* 2015, 1–2, 19–25.
- [10] Páll, S.; Abraham, M. J.; Kutzner, C.; Hess, B.; Lindahl, E. In *Solving Software Challenges for Exascale*; Markidis, S., Laure, E., Eds.; Springer International Publishing: Cham, 2015; pp 3–27.
- [11] Marrink, S. J.; Risselada, H. J.; Yefimov, S.; Tieleman, D. P.; De Vries, A. H. *J. Phys. Chem. B* 2007, 111 (27), 7812–7824.
- [12] Marrink, S. J.; de Vries, A. H.; Mark, A. E. *J. Phys. Chem. B* 2004, 108 (2), 750–760.



Átomo de He ($1s^2 1S$) confinado por un plasma

C. Martínez-Flores*, Michael-Adán Martínez-Sánchez*, R. Hernández-Esparza** y J. Garza*

*Departamento de Química, División de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, Iztapalapa C. P. 09340, Ciudad de México, México., **Department of Chemistry and Chemical Biology, McMaster University, Ontario, Canada.

En este trabajo exploramos como se modifica el estado base del átomo de He ($1s^2 1S$) y su secuencia isoelectrónica (Li^+ y Be^{2+}) cuando se encuentra confinado por un plasma. Se implementa el método numérico de diferencias finitas y elemento finito para resolver la ecuación de Hartree-Fock asociada bajo el enfoque de campo auto-consistente (SCF) para obtener los eigenvalores y eigenfunciones. El ambiente de plasma se describe a través de un potencial de apantallamiento de Debye-Hückel (DHS) –débil– y un potencial modificado de apantallamiento (Exponential-Cosine-Screened-Coulomb, ECSC) –fuerte–, como función de longitud de Debye, λ_D . Se encuentra la deslocalización del estado base del He para valores de $\lambda_D < 0.5$ y $\lambda_D < 0.8$ a.u., en el caso de los potenciales de DHS y ECSC, respectivamente. De forma similar se encuentra la deslocalización para los átomos de Li^+ y Be^{2+} como función de la longitud de Debye. Finalmente, se observa que a medida que disminuye λ_D , la entropía de Shannon aumenta debido al efecto del confinamiento del plasma para todos los átomos considerados en este trabajo. Agradecimientos CMF agradece a CONACYT la beca posdoctoral a través del proyecto FC-2016/2412 y la hospitalidad del departamento de Química de la UAMI.



Referencias:

R. Janev, S. Zhang, J. Wang, Review of quantum collision dynamics in debye plasmas, *Matter and Radiation at Extremes* 1, 5, 237-248, 2016.

S. Kar, Y. K. Ho, Unnatural parity states of helium with screened coulomb potentials, *International Journal of Quantum Chemistry* 108,9, 1491-1504, 2008.

K. Sen, J. Katriel, H. Montgomery, A comparative study of two-electron systems with screened coulomb potentials, *Annals of Physics* 397, 192-212, 2018.

C. Martínez-Flores, R. Cabrera-Trujillo, Dipole and generalized oscillator strength derived electronic properties of an endohedral hydrogen atom embedded in a Debye-Hückel plasma, *Matter and Radiation at Extremes* 3, 5, 227-242, 2018.

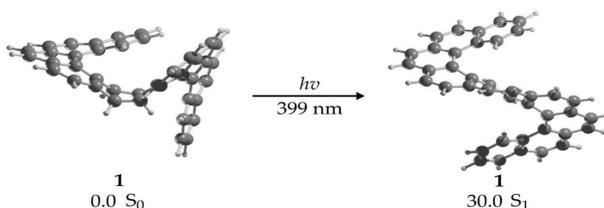


Helicenos fusionados con ciclooctatetraeno: racemización fotoinducida.

Jorge Barroso, Gabriel Merino

Departamento de Física Aplicada, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Unidad Mérida, km. 6 Antigua carr. a Progreso. Apdo. Postal 73, Cordemex, 97310 Mérida, Yuc., México.

Los sistemas π -conjugados son componentes esenciales de máquinas moleculares, sondas fluorescentes, auto-ensamblaje supramolecular y materiales porosos. Las propiedades de estos sistemas se basan, en gran medida, en su rigidez estructural. Sin embargo, la fusión con moléculas flexibles puede conducir a materiales con propiedades dinámicas derivadas tanto de la rigidez estructural, así como de una flexibilidad conformacional [1]. En este trabajo proponemos una hélice molecular de nueve anillos constituida por dos [4]helicenos fusionados a un ciclooctatetraeno (COT) central. Particularmente el COT, en estado basal, adopta una conformación de bote mientras que en el primer estado excitados es plana. En este trabajo, estudiamos mediante la teoría de los funcionales de la densidad dependientes del tiempo (TD-DFT) a un nivel PBE0-D3/def2-TZVP, el cambio fotoinducido en la configuración de **1** (Figura 1) así como del conformero asociado. Los resultados sugieren que, para el caso de **1**, la transición a S_1 ocurre en el umbral de luz visible del espectro electromagnético (399 nm), mientras que la hélice resultante de fusionar dos helicenos de conformación distinta, (M y P), necesita 366 nm. La diferencia energética entre ambos estados es de 30.0 kcal/mol (32.4 kcal/mol el triplete), en contraste, la racemización del carboheliceno del [9]heliceno requiere ~44 kcal/mol [2].





Referencias:

Yamakado, T.; Takahashi, S.; Watanabe, K.; Matsumoto, Y.; Osuka, A.; Saito, S. Conformational Isomerization versus Singlet Fission: Distinct Excited-State Dynamics of Cyclooctatetraene-Fused Acene Dimers. *Angew. Chem. Int. Ed Engl.* 2018, 57, 5438–5443.

Barroso, J.; Cabellos, J. L.; Pan, S.; Murillo, F.; Zarate, X.; Fernandez-Herrera, M. A.; Merino, G. Revisiting the Racemization Mechanism of Helicenes. *Chem. Commun.* 2018, 54, 188–191.

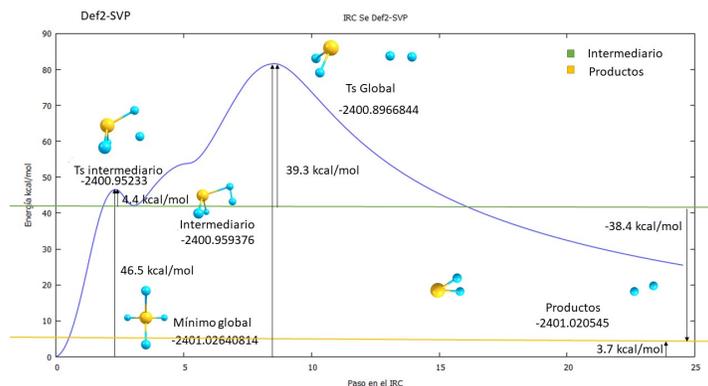


Estabilidad de las especies doblemente protonadas XH_2^{2+} ($X=O, S, \dots, Po$)

Alonso Daniel Jacobo Hernández, Ramón Hernández-Lamoneda, Maciej Gutowski

Centro de Investigaciones Químicas. Universidad Autónoma del Estado de Morelos; México, Departamento de Química, Universidad Heriot-Watt; Reino Unido

El problema de almacenamiento de hidrógeno es de gran interés en la actualidad por su importancia como posible combustible limpio. Debido a su baja densidad y muy baja temperatura de licuefacción no es práctico considerar su almacenamiento directo en forma de gas o líquido. Por ello se ha considerado su almacenamiento indirecto en forma de materiales sólidos que contienen hidrógeno formando enlaces químicos con otros elementos pero que pueden liberarlo en forma de H_2 . Un ejemplo es el caso del borohidruro de amonio: $[NH_4]^+[BH_4]^-$ que puede liberar hasta un 21% de hidrógeno por peso a temperaturas menores a $160^\circ C$. En este sentido es natural considerar materiales que contengan otras especies como H_3O^+ y $H_4O_2^{2+}$. Esta última especie fue propuesta como posible intermediario en medios superácidos en un estudio pionero del grupo de Olah apoyado por cálculos del grupo de Pople. En este trabajo analizamos la estabilidad de $H_4X_2^+(X=O, S, Se, Te)$ ante diferentes procesos disociativos que requieren diferentes metodologías teóricas. Concluimos que en forma aislada todos son estables con respecto a la pérdida de un protón tanto geométrica como cinéticamente y la estabilidad aumenta al descender en la tabla periódica. Hemos iniciado el análisis de otros canales disociativos más complejos al presentarse intermediarios e intersecciones cónicas en el camino de reacción, presentaremos nuestros avances.





Referencias:

Karkamkar A, Kathmann SM, Schenter GK, et al. Thermodynamic and structural investigations of ammonium borohydride, a solid with a highest content of thermodynamically and kinetically accessible hydrogen. Chem Mater. 2009;21(19):4356-4358. doi:10.1021/cm902385c

Olah GA, Prakash GK, Barzagli M, Lammertsma K, Schlyer PVR, Pople JA. Considered as onium ions. 31. Protonated hydronium dication, $H_4O_2^+$. Hydrogen-deuterium exchange of $D_2H_17O^+$ in $HF-SbF_5$ and DH_217O^+ in $DF-SbF_5$ and theoretical calculations. J Am Chem Soc. 1986;108(5):1032-1035. doi:10.1021/ja00265a031

ox B. School of Engineering and Physical Sciences MSc in Materials for Sustainable and Renewable Energies Dissertation Supervisor?: 2012;(September).

B. Cox, S. Ling, R. Hernández-Lamonedá MG. Trabajo En Proceso.

Boldyrev AI, Simons J. Ab initio study of geometrically metastable multiprotonated species: MH_{k+n}^+ . J Chem Phys. 1992;97(6):4272-4281. doi:10.1063/1.463929



Predicción de familias de productos naturales usando machine learning y ^{13}C NMR

Saul H. Martínez-Treviño, Gabriel Merino, María A. Fernández-Herrera, Víctor Uc-Cetina

Cinvestav-Merida, Facultad de Matemáticas UADY

Para asignar la estructura molecular correcta de un determinado compuesto, la Resonancia Magnética Nuclear (RMN) es una de las técnicas más utilizadas debido a su amplia gama de información estructural. De esta manera, las posibilidades exhaustivas dentro del espacio químico se reducen y restringen dados los datos espectroscópicos. Para el caso de los Productos Naturales (PN), la caracterización parcial de las moléculas contenidas en el producto puede obtenerse a partir de un conocimiento a priori.[1] Es decir, es bien sabido que ciertas especies pueden contener moléculas con estructuras muy cercanas a las que se encontraban anteriormente en especies relacionadas. Así, haciendo uso de los datos de RMN ^{13}C disponibles, entrenamos a un clasificador XGBoost para predecir la presencia o ausencia de algunas familias de productos naturales. Se compararon diferentes metodologías y se probaron muestras de fuera del conjunto de datos. Con los resultados en mano, proponemos una herramienta de apoyo a los investigadores de PN para predecir la presencia o ausencia de familias de PN comunes a partir de los datos espectroscópicos de RMN ^{13}C . Investigamos la capacidad de predicción de 8 familias de productos naturales comunes: Sesquiterpenoides, diterpenoides, triterpenoides, lignanos, esteroides, cromanos, flavonoides y alcaloides. Además, se proporciona la predicción de un glucósido, que se encuentra comúnmente en varias familias.



Referencias:

- (1) Breton, R.C.; Reynolds, W.F., Nat. Prod. Rep., 2013, 30, 501.

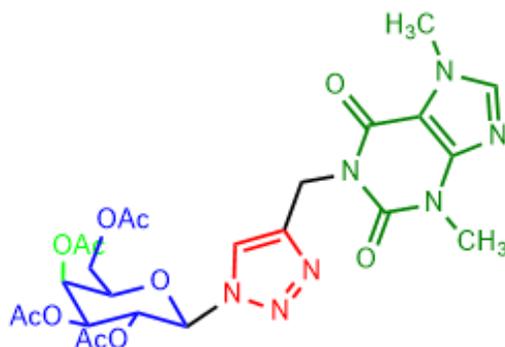


Determinación de los índices de reactividad de la Galactosa-Triazol-Teobromina.

Carlos Mendoza Merlos, Alejandra M. Navarrete López

Universidad Autónoma Metropolitana unidad Azcapotzalco, Universidad Autónoma Metropolitana unidad Azcapotzalco

Los triazoles son sistemas heterociclos que han atraído la atención en las últimas dos décadas debido a su presencia en muchos compuestos bioactivos tales como antitumorales, antiinflamatorios, antivirales o antimicrobianos [1]. Estos heterociclos son estables a la degradación metabólica y su incorporación en las moléculas puede mejorar la solubilidad y la biodisponibilidad, lo que refuerza aún más su interés como unidades farmacológicas. Mediante un sistema de reacción de cicloadición (3+2) regioselectiva, ha sido posible unir mediante una estructura principal de triazol a los grupos tipo carbohidrato – galactosa- y a los grupos derivados de la familia xantina - teobromina- para obtener la síntesis del producto Galactosa-Triazol-Teobromina (GTT). Se espera que este tipo de moléculas presenten acciones neuromoduladoras y neuroprotectoras en el organismo. Para su estudio y caracterización hemos usado los índices de reactividad teóricos basados en la Teoría de Funcionales de la Densidad (TFD) que han llegado a ser una poderosa herramienta para el estudio de la reactividad de compuestos orgánicos. En particular se estudiaron los índices de reactividad globales tales como el potencial químico electrónico χ , la dureza química η , la electrofilicidad ω y el índice de nucleofilicidad N . Los cálculos de dichos índices se llevaron a cabo usando el funcional híbrido B3LYP [2] implementado en el programa Gaussian 09 [3], empleando el conjunto de base 6-311++G.





Referencias:

- [1] Xavier, N. M., & Lucas, S. D. (2014). Triazole-Containing Carbohydrate Mimetics: Synthesis and Biological Applications. *Targets in Heterocyclic Systems: Chemistry and Properties*, vol. 18, 214-235.
- [2] (a) Becke, A. D. (1993). *Phys. Re V. A* (1988), 38, 3098. (b) Becke. *J. Chem. Phys*, vol. 98, 5648.
- [3] Frisch, M. J., & Clemente, F. R. Gaussian 09, Revision A. 01, MJ Frisch, GW Trucks, HB Schlegel, GE Scuseria, MA Robb, JR Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, GA Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, HP Hratchian, AF Izmaylov, J. Bloino, G. Zhe.



ESTUDIO TEÓRICO DE LAS RUTAS DE DISOCIACIÓN DEL ACRILATO DE METILO

David Ochoa-Resendiz. 1,2, Alfredo Quinto-Hernández. 2, Ramón Hernández-Lamonedá. 2

Instituto Tecnológico de Zacatepec. Zacatepec de Hidalgo, Morelos; Mexico., Centro de Investigaciones Químicas.
Universidad Autónoma del Estado de Morelos; México.

El acrilato de metilo es comúnmente utilizado en la industria de productos poliméricos y como materia prima en la síntesis química. En el aire, la presencia de acrilato de metilo en la atmósfera terrestre se atribuye a su uso y eliminación en la industria, a la degradación de los polímeros endógenos [1] y potencialmente como producto de la oxidación del biodiesel. [2] No obstante, el conocimiento de la subsecuente disociación de estas unidades poliméricas a especies de más bajo peso molecular ha sido objeto de muy pocos estudios [3,4]. Recientemente se desarrolló un estudio experimental utilizando un aparato de haz molecular, excitación por medio de láser y detección de los fragmentos empleando radiación sincrotrón en el que se detectó una mayor cantidad de fragmentos comparado con trabajos anteriores. [5] Nuestro estudio implementa cálculos basados en función de onda (CASSCF/VDZ) para explorar la SEP en el estado fundamental y estados excitados en el código MolPro. Hemos caracterizado una intersección cónica que permite un paso ultrarápido del estado excitado al fundamental, proponemos nuevas rutas de isomerización del acrilato de metilo hacia γ -butirolactona, así como también rupturas sincrónicas y asincrónicas de 3 cuerpos, brindando una descripción amplia y detallada de los mecanismos de fragmentación que dan lugar al nacimiento de diversas especies detectadas en el experimento.



Referencias:

Schroder, D., Soldi-Lose, H., Semialjac, M., Loos, J., Schwarz, H., Eerdeken, G., Arnold, F, Int. J, Mass Spectrom. 2003, 228, 35-47.

Pedersen, J. R., Ingemarsson, A.; Olsson, J. O., Chemosphere, 1999, 38, 2467-2474.

Forman R., H. M. Mackinnon, P. D. Ritchie, J. Chem. Soc. C. 1968, 16, 2013.

Pola J., Tetrahedron, 1989, 45, 5065-5072.

Cardozo.Q.O, Tesis de licenciatura, Instituto Tecnológico de Zacatepec, 2015.



Estructuras planas contra estructuras tridimensionales en cúmulos pequeños de carbono.

J. César Cruz., Juan José García., Jorge Garza.

Universidad Autónoma Metropolitana.

Debido a la gran versatilidad que tiene el átomo de carbono, existe una enorme variedad de estructuras que puede formar. Sin duda los nanotubos de carbono, el grafeno y los fullerenos son estructuras de carbono llamativas, tanto por sus grandes aplicaciones prácticas y por sus peculiaridades estructurales. Los estudios teóricos y experimentales sobre los mecanismos de formación de dichas estructuras indican que la participación de cúmulos de carbono de tamaño pequeño tiene relevancia. Por tanto, el estudio estructural de los cúmulos de carbono de bajo peso molecular tiene importancia para entender y relacionar las interacciones intramoleculares que favorezcan la formación de estructuras de mayor tamaño, sobre todo si muestran estructuras planas o tridimensionales. En este trabajo se realizó la búsqueda estocástica de posibles estructuras planas para cúmulos neutros de carbono: C₁₀, C₁₁, C₁₂ y C₂₀. Se usó un algoritmo de recocido simulado implementado en el código RISSA. De las estructuras optimizadas se hizo el análisis de conectividad por medio de la teoría de AIM usando el código GPUAM.



Referencias:

J. César Cruz, Raymundo Hernández-Esparza, Álvaro Vázquez-Mayagoitia, Rubicelia Vargas and Jorge Garza. Implementation of the Molecular Electrostatic Potential over Graphics Processing Units. *J. Chem. Inf. Model.* 2019 59 (7), 3120-3127.

Juan-José García, Raymundo Hernández-Esparza, Rubicelia Vargas, William Tiznado y Jorge Garza. Formation of small clusters of NaCl dihydrate in the gas phase. *New J. Chem.*, 2019, 43 (11), 4342-4348.

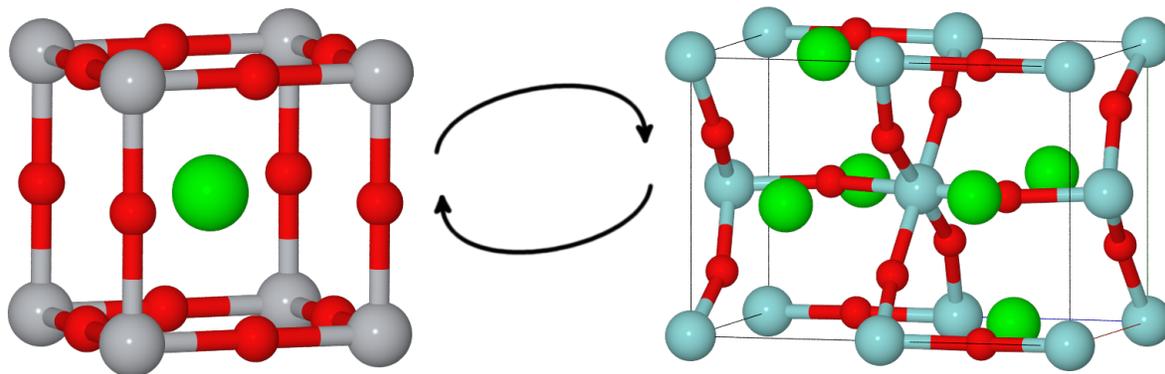


Efecto del intercambio exacto sobre sistemas de composición variable entre SrTiO₃ y SrZrO₃

Marcos Rivera-Almazo(1), Federico González(2), Rubicelia Vargas(1), Jorge Garza(1)

(1)Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa, (2)Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica, Universidad Autónoma Metropolitana – Iztapalapa

Los óxido de metales de transición han sido estudiados de forma extensa mediante técnicas experimentales y computacionales dado que exhiben propiedades únicas[1], principalmente ligadas a la fuerte correlación de sus electrones de valencia. En el caso de los estudios computacionales, esta correlación electrónica dificulta la reproducción de propiedades estructurales y electrónicas. Por medio de Teoría de Funcionales de la Densidad en la formulación de Kohn-Sham, funcionales de intercambio y correlación con una contribución de intercambio exacto, tales como PBE0 o B3LYP, mejoran la descripción de los óxidos de metales de transición. Sin embargo, en múltiples casos estas aproximaciones no brindan una correcta descripción de estos sistemas[2]. En este trabajo estudiamos la descripción de los sistemas SrTiO₃, SrZrO₃ y variaciones intermedias de ambos, utilizando funcionales de intercambio y correlación híbridos de un solo parámetro. Ambos sistemas han sido estudiados como posibles fotocatalizadores para la producción de hidrógeno[3]. Los cálculos fueron realizados utilizando un código ab initio periódico basado en funciones de base Gaussianas localizadas para la expansión de funciones de Bloch por combinación lineal de orbitales atómicos[4]. Los resultados de estos cálculos son contrastados con los obtenidos previamente para TiO₂, ZrO₂ y sus sistema intermedios.





Referencias:

- [1] Goodenough, J. (2014) Perspective on Engineering Transition-Metal Oxides. *Chemistry of materials* 26,1, 820-829
- [2] Navarrete-López A. M., Rivera-Almazo M., Garza J., Vargas R. (2018) Importance of one-parameter hybrid exchange- correlation functionals in band gaps of transition metal and metalloid oxides. *Theor. Chem. Acc.* 137, 36
- [3] Huerta-Flores, A. M., Torres-Martínez, L. M., Sánchez-Martínez, D., & Zarazúa-Morín, M. E. (2015). SrZrO₃ powders: Alternative synthesis, characterization and application as photocatalysts for hydrogen evolution from water splitting. *Fuel*, 158, 66–71.
- [4] Dovesi R., Orlando R., Erba A., Zicovich-Wilson C. M. et al (2014) Crystal14: a program for the ab initio investigation of crystalline solids. *Int J Quantum Chem* 114:1287–1317

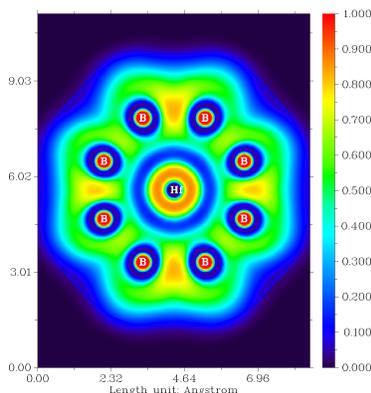


Estudio teórico de las propiedades electrónicas de los borosferanos endoédricos M@B₂₈

Christian A. Celaya, Alan Miralrio, Luis Enrique Sansores

Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México., Departamento de Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Campus Toluca., Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México.

En este trabajo, empleamos cálculos desde la teoría de los funcionales de la densidad (DFT) para verificar la estabilidad estructural, las propiedades electrónicas y aromaticidad de dos isómeros de borosferanos (B₂₈-C₂ y B₂₈-D₂) y su estructura endoédricos (M@B₂₈) con los metales de transición M (M=Ti, Zr, Hf) fueron analizados. Tomando en cuenta la diferencia de tamaño y forma entre ambos isómeros B₂₈-C₂ y B₂₈-D₂, el ultimo reportado recientemente[1] son moléculas muy interesantes por la alta aromaticidad, tal como lo indican los valores negativos del desplazamiento químico independiente del núcleo (NICS)[2] en los anillos y centro de las jaulas. Los compuestos M@B₂₈ forman sitios favorables de reactividad química, además de un incremento en su brecha de energía (DE_{HOMO-LUMO}) respecto a las jaulas vacías. Por otra parte, examinamos la capacidad de absorber moléculas nCO (n=1-2) en el compuesto Hf@B₂₈-C₂. Encontramos energías favorables de enlaces en los sistemas CO-Hf@B₂₈ y 2CO-Hf@B₂₈ son de 4.5 y 6.7 eV respectivamente. Nuestros resultados indican que el complejo Hf@B₂₈-C₂ puede se empleado como un novedoso material para absorber moléculas de CO. Todas las estructuras fueron optimizados con el siguiente nivel de teoría PBE-D3(BJ)/def2-TZVP[3].





Referencias:

A. J. Juárez et al. in *J Mol Model* 25:21 (2019)

P.v.R. Schleyer et al., *J. Am. Chem. Soc.* 118(26) (1996), 6317–6318.

TURBOMOLE, V7.2 2017, a development of the University of Karlsruhe and Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, 1989–2007; TURBOMOLE GmbH: Karlsruhe, Germany, since 2007. <http://www.turbomole.com/> (accessed Aug 2, 2018).

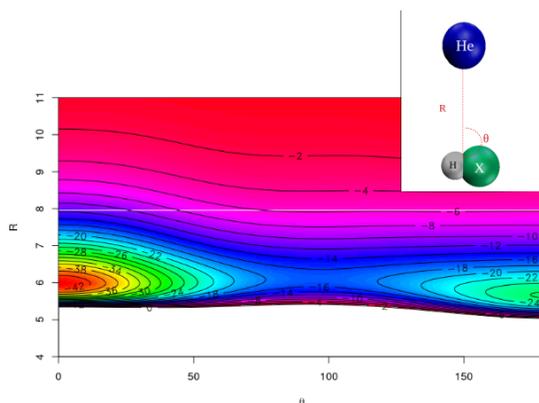


Estudio Dinámico de nanogotas de 4He a temperaturas ultrafrías

Sedano Ortega Lesley Mariana, Gamboa Suárez Antonio

Centro de Investigaciones Química, Universidad Autónoma del Estado de Morelos

El 4He presenta un comportamiento sorprendente a bajas temperaturas y presiones, tales como la superfluidez y una capacidad calorífica extremadamente grande. Bajo estas condiciones resulta posible dopar al 4He con diferentes moléculas, formando nanogotas en donde los átomos de 4He envuelven a la misma, solvatándola. Cuando éstas son estudiadas espectroscópicamente, muestran espectros rotacionales extremadamente bien resueltos[1], lo cual es completamente inusual para sistemas en fase líquida convirtiéndose estas gotas en una matriz espectroscópica muy interesante. Existen diferentes aspectos dinámicos que dan lugar a este comportamiento los cuales aún no han sido explicados por completo. El primero de ellos es el valor de la constante rotacional de la molécula dopante, ya que si se tiene un rotor rápido o lento, el mecanismo de solvatación será distinto[2]. Sin embargo, existen casos donde no es posible explicar la dinámica de la solvatación solamente a partir del tipo de rotor que se tiene, siendo el grado de anisotropía [3] del potencial otro factor primordial para entender la dinámica de la solvatación. El objetivo primordial de este trabajo es estudiar la influencia este segundo factor. Para ello, se divide la superficie de energía potencial en componentes anisotrópicas e isotrópica, y se explora la influencia de cada una de las partes mediante la resolución de la ecuación de Schrödinger empleando el método de difusión de Montecarlo(DMC).





Referencias:

- [1] J.P. Toennies, A.F. Vilesov, K. B. Whaley, Superfluid helium droplets : an ultracold nanolaboratory (2001). [2] A. Gamboa , J.A. Ramilowski, R.M. Benito, D. Farrelly, Renormalization of the rotational constants of an ammonia molecule seeded into a 4He droplet (2011). [3] S. Paolini, S. Fantoni, S. Moroni, S. Baroni, Computational spectroscopy of helium-solvated molecules: Effective inertia, from small He clusters toward the nanodroplet regime (2005).



ESTUDIO DE POTENCIALES EFECTIVOS EN 3D MEDIANTE EL GRUPO UNITARIO U(4)

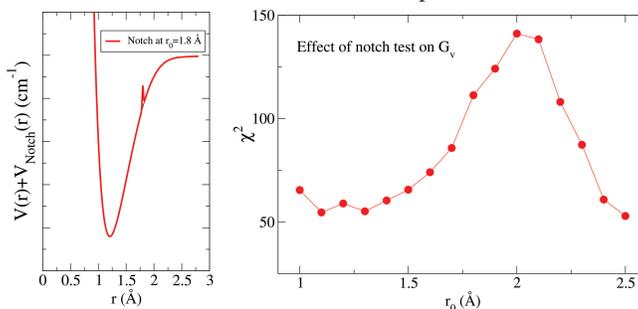
M. Rodríguez-Arcos, R. Lemus, J.M. Arias, J. Gómez-Camacho

Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear, Facultad de Física, Universidad de Sevilla

Se propone un enfoque basado en el álgebra unitaria U(4) para describir sistemas 3D con potenciales efectivos. Nuestro método consiste en la adición de un bosón escalar al espacio del oscilador armónico en 3D. Se utiliza un procedimiento de minimización para determinar los coeficientes involucrados en la expansión algebraica de las coordenadas y los momentos en términos de los generadores del grupo U(4), el cual permite que los vectores propios asociados con las diferentes cadenas de subgrupos se vinculen a representaciones de energía, coordenadas y momento [1]. Esta identificación permite obtener la representación matricial de hamiltonianos en 3D asociados a cualquier potencial en una forma simple a través del uso de los paréntesis de transformación que conectan las diferentes bases. Como aplicación del método, se analiza el sistema asociado al potencial de Morse en 3D, cuyas funciones de onda contrastan con las soluciones analíticas aproximadas para momento angular cero. También se incluye el análisis de los momentos de inercia y las intensidades de transición dipolares. Como una aplicación real, se presenta la comparación de nuestro método con un cálculo a primeros principios para los niveles de vibración y rotación de la molécula de O₂. Además, se realiza una prueba prueba tipo “notch test” para mostrar cómo el formalismo permite verificar la sensibilidad de los resultados en función de la superficie de energía potencial (PES) [2].

Algebraic approach

Solutions of 3D effective potentials





Referencias:

1. Santiago, R.D.; Arias, J.M.; Gómez-Camacho J.; Lemus, R. An approach to establish the connection between configuration and $su(n + 1)$ algebraic spaces in molecular physics: application to ammonia. Mol. Phys. 2017, 115, 3206-3223.
2. Rodríguez-Arcos, M.; Lemus, R.; Arias, J.M.; Gómez-Camacho J. Unitary group approach for effective potentials in 3D systems. J., Mol. Phys., submitted.

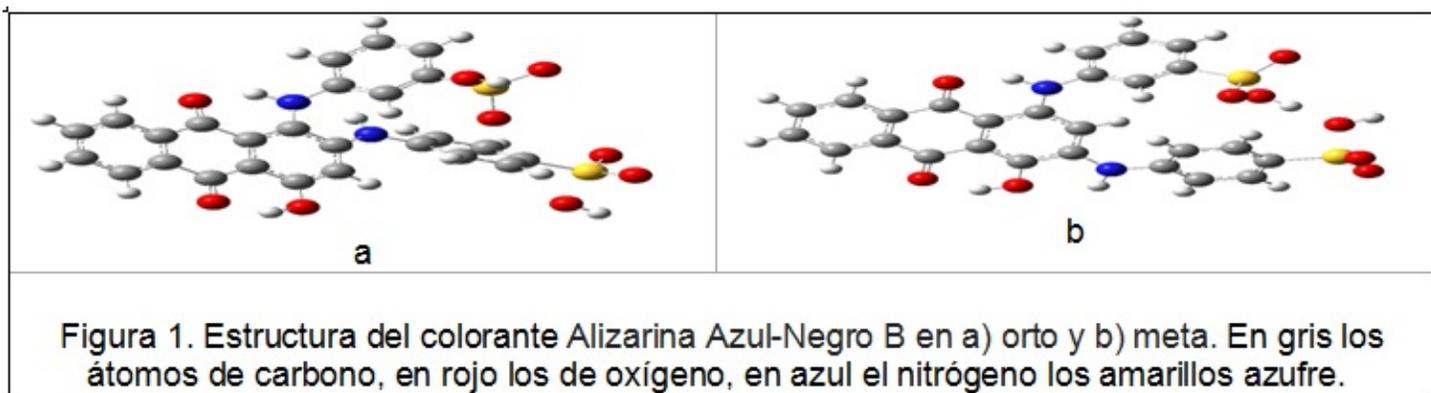


Estudio topológico de la densidad electrónica respecto a la degradación del colorante AANB

Marisela Cruz Rivera., Alejandra M. Navarrete López

Universidad Autónoma Metropolitana.

Más de diez mil diferentes tipos de pigmentos y colorantes sintéticos son usados en diferentes industrias como la textil, papelería, cosmética y farmacéutica, entre otras. Dichas actividades industriales liberan grandes cantidades de efluentes, contaminadas con colorantes, al ambiente¹. Los colorantes se diseñan para ser altamente resistentes, incluso a la degradación microbiana, esto hace que sean difíciles de eliminar, por lo que es necesario encontrar estrategias eficientes para la remediación de los daños. Algunos métodos químicos, llamados procesos de oxidación avanzada (POAs)², permiten la degradación de los contaminantes mediante la generación de especies oxidantes que destruyen los compuestos orgánicos e inorgánicos en compuestos menos tóxicos, en algunos casos se alcanza la mineralización. La degradación de colorantes por radicales hidroxilo ($\text{OH}\cdot$) generados por medio de los POAs ha mostrado alta eficiencia en la remoción de estos contaminantes. En este trabajo mostramos la degradación oxidativa del colorante Alizarina Azul Negro B (Figura 1) mediante la formación de aductos del radical hidroxilo en ambos isómeros del colorante. Se presenta el análisis topológico de la densidad electrónica³ de los estados de transición confirmando los mecanismos energéticamente más favorables. El nivel de teoría empleado en la optimización de las especies presentes es B3LYP/6-311++G, empleando la suite de Gaussian 09⁴.





Referencias:

1. Mantzavinos, D., & Psillakis, E. (2004). Enhancement of biodegradability of industrial wastewaters by chemical oxidation pre-treatment. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, 79(5), 431-454.
2. Anjaneyulu Y., Sreedhara-Chary N. y Suman-Raj S., 2005. Decolourization of industrial effluents – available methods and emerging technologies – a review. *Rev. Environ. Sci. Technol.*, 4, 245–273.
3. Bader, R. F. W. *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*. International Series of Monographs on Chemistry; Clarendon Press: Oxford, 1995; Vol. 22, pp 1-438.
4. Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J. R., & Nakatsuji, H. (2009). *Gaussian 09*, revision D. 01.

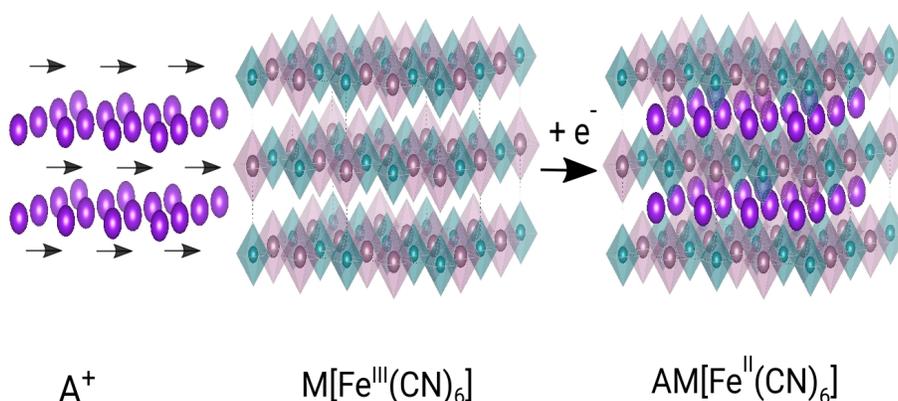


Efecto de la dispersión en el voltaje de cátodos tipo $AM[Fe(CN)_6]$ con $M=In,Bi$; $A=Li,Na,K$

Claudia Islas-Vargas - 1, Alfredo Guevara-García - 2, Miguel Oliver-Tolentino - 2, Guadalupe Ramos-Sánchez - 2, I. González - 1, Marcelo Galván - 1

Afiliaciones: 1 - División de Ciencias Básicas e Ingeniería, Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa; México., 2 - CONACYT - Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Departamento de Química, Iztapalapa, México, D.F.; México.

La generación de energía eléctrica a partir de fuentes de energía renovable es una alternativa para disminuir el consumo de combustibles fósiles. No obstante, este tipo de fuentes son intermitentes por lo que se requiere de nuevos materiales para hacer más eficiente el almacenamiento de energía. Entre éstos se encuentran los análogos del Azul de Prusia que pueden emplearse como materiales catódicos en baterías de ion Na y ion K. En este trabajo se realizó un estudio comparativo de diferentes análogos del Azul de Prusia realizando cálculos de estructura electrónica empleando DFT con condiciones periódicas en la implementación del código VASP y contrastando con la caracterización experimental realizada en el grupo. Se empleó una base de ondas planas para describir los orbitales de Kohn-Sham y el método PAW para tratar los cores atómicos. Se analizó el proceso de oxidación reducción que genera la intercalación de los iones alcalinos A^+ , utilizando el método propuesto por Aydinol et al.(1), de acuerdo a la reacción $AM[Fe^{II}(CN)_6] + A^+ \rightarrow A_0 + M[Fe^{III}(CN)_6]$ donde $M = Bi, In$ y $A = Li, Na, K$. Se incluyeron interacciones de van der Waals con dos diferentes esquemas: el método de Tkatchenko-Sheffler(2) con partición iterativa de Hirshfeld(3) y con el funcional optB86b-vdW(4), dado que en un trabajo previo(5) se mostró que la inclusión de efectos de dispersión en este tipo de sistemas es importante para obtener voltajes acordes con el experimento.





Referencias:

M. K. Aydinol, A. F. Kohan, G. Ceder, K. Cho y J. Joannopoulos, *Physical Review B* 56, 1354 (1997).

A. Tkatchenko y M. Scheffler, *Physical Review Letters* 102, 073005 (2009).

P. Bultinck, C. V. Alsenoy, P. W. Ayers y R. Carbó-Dorca, *The Journal of Chemical Physics* 126, 144111 (2007).

J. Klimeš, D. R. Bowler y A. Michaelides, *Physical Review B* 83, 195131 (2011).

C. Islas-Vargas, A. Guevara-García, M. Oliver-Tolentino, G. Ramos-Sánchez, I. González y M. Galván, *Journal of The Electrochemical Society* 166, A5139 (2019).



Búsqueda De Estructuras De Mínima Energía En Cúmulos de Cu_n ($n=3-10$) Usando GUGLOSAC

Jorge Isaac Díaz Hernández, J. Oscar C. Jimenez-Halla, José Luis Cabellos, Álvaro Posada-Amarillas

Departamento de Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad de Guanajuato, Noria Alta s/n 36050, Guanajuato, Gto., Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora, Blvd. Luis Encinas & Rosales, 83000, Hermosillo, Son.

Encontrar la configuración de mínima energía para un sistema molecular es un problema que ha atraído gran atención en las áreas de química, física y biología. A pesar de su complejidad, se han propuesto y aplicado diversos métodos y algoritmos, sin embargo, esta línea de investigación sigue en desarrollo. En este trabajo, presentamos la exploración de la superficie de energía potencial (PES) de cúmulos [1] de Cu_n ($n=3-10$) usando nuestra metodología llamada Guanajuato Global Search Algorithm of atomic Clusters (GUGLOSAC). La cual está escrita en Python, y en combinación con el paquete computacional Gaussian 09, es capaz de usar cualquier método de estructura electrónica, como DFT, para calcular la energía total de un arreglo atómico dado. GUGLOSAC esta automatizado y funciona en una computadora paralela, es simple de usar y eficientemente busca la estructura de mínima energía de cualquier conjunto de átomos. Aquí presentamos las conformaciones encontradas de los isómeros de mínima energía de Cu_n ($n=3-10$) dentro del marco de la Teoría de los Funcionales de la Densidad (DFT) utilizando el funcional PBE en conjunto con la base SDD, así como la metodología para obtenerlos.



Referencias:

Posada-Amarillas A. Ab initio molecular electrostatic potential of hexanuclear Cu, Ag, and Au clusters. In: APS March Meeting Abstracts. 2016. p. T1.023.



ESTUDIO DE PROPIEDADES ÓPTICAS Y ELECTRÓNICAS DE COLORANTES BASADOS EN CARBAZOL PARA DSSC

Tomás Delgado-Montiel, Rody Soto-Rojo, Daniel Glossman-Mitnik, Jesús Baldenebro-López

Facultad de Ingeniería Mochis, Universidad Autónoma de Sinaloa; México, Centro de Investigación en Materiales Avanzados; México

En la actualidad existe un amplio interés sobre los sensibilizadores orgánicos del tipo donador-aceptor (D-?-A), que al ser utilizados en las celdas solares sensibilizadas por colorante (DSSC) se ha alcanzado una eficiencia de conversión de 14.8%, con ventajas tales como: bajo costo, fácil fabricación, grandes coeficientes de absorción y un diseño molecular factible, demostrando que son un componente clave que modula la eficiencia. Este estudio presenta ocho estructuras moleculares como potenciales sensibilizadores, analizando la inclusión de diferentes sistemas ? conjugados como puentes y considerando en la fracción donadora la unidad de carbazol, el cual ha sido ampliamente utilizado en DSSC, así como al ácido cianoacrílico en la fracción aceptora debido a que éste proporciona un fuerte anclaje a la superficie del óxido semiconductor nanoestructurado. El estudio se llevó a cabo mediante la teoría de funcionales de la densidad obteniendo las estructuras de mínima energía, así como los orbitales moleculares que intervienen en las principales transiciones y sus niveles de energía. Los espectros de absorción presentan bandas con desplazamiento batocrómico y contribuciones dominantes en la transición HOMO-LUMO. A través de la predicción de parámetros de reactividad química como dureza química, índice de electrofilicidad y poder electroaceptor se infiere una importante mejora de propiedades relacionadas con la eficiencia de conversión.



Referencias:

K. Kakiage, Y. Aoyama, T. Yano, K. Oya, J. Fujisawa, M. Hanaya, Highly-efficient dye-sensitized solar cells with collaborative sensitization by silyl-anchor and carboxy-anchor dyes, *Chem. Commun.* 51 (2015) 15894–15897.

F. Zanjanchi, J. Beheshtian, Natural pigments in dye-sensitized solar cell (DSSC): a DFT-TDDFT study, *J. Iran. Chem. Soc.* 16 (2018) 795–805.

C. Sun, Y. Li, J. Han, B. Cao, H. Yin, Y. Shi, Enhanced photoelectrical properties of alizarin-based natural dye via structure modulation, *Sol. Energy.* 185 (2019) 315–323.

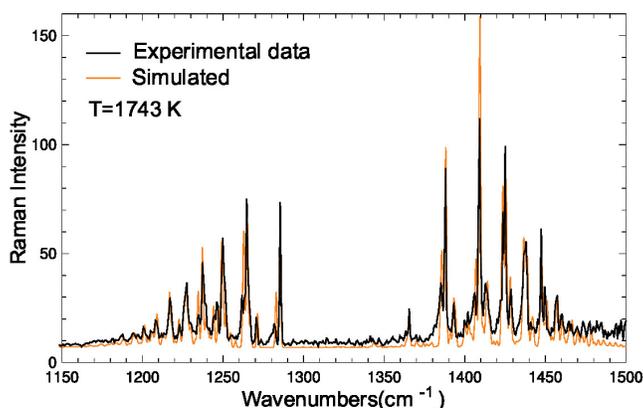


SIMULACIÓN DEL ESPECTRO RAMAN DEL CO₂ A TRAVÉS DE MÉTODOS ALGEBRAICOS

Marisol Bermúdez-Montaña, Renato Lemus-Casillas, Miguel Carvajal, Francisco Pérez-Bernal

Facultad de Química, UNAM, Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, Dpto. Ciencias Integradas, Universidad de Huelva, España., Dpto. Ciencias Integradas, Universidad de Huelva, España.

El uso de métodos algebraicos ha mostrado ser una herramienta bastante eficiente en la descripción de los modos vibracionales de moléculas triatómicas^{1 2}. Para el estudio de los modos vibracionales del dióxido de carbono se propone un modelo de dos osciladores con potencial de Morse en una dimensión para describir los modos de tensión simétrico y antisimétrico, y un oscilador con potencial de Morse en dos dimensiones para el modo de flexión que es degenerado. Este modelo algebraico permite identificar las interacciones relevantes establecidas por las resonancias entre los modos fundamentales de manera directa y sencilla, que para el caso particular del dióxido de carbono da origen a tres polidas posibles. En este trabajo se estudian tres Hamiltonianos vibracionales del dióxido de carbono producto de tres polidas diferentes. Las funciones de onda se evalúan a través de la simulación del espectro Raman calculando el momento de transición de la polarizabilidad en el rango de 1150 cm⁻¹ a 1500 cm⁻¹.





Referencias:

- 1 M. Bermúdez-Montaña, R Lemus, F Pérez-Bernal, M Carvajal. “Comprehensive vibrational analysis of CO₂ based on a polyad-preserving model” The European Physical Journal D 71 (6), 147
- 2 M Bermúdez-Montaña, R Lemus. “A study of vibrational excitations of ozone in the framework of a polyad preserving model of interacting Morse oscillators” Journal of Molecular Spectroscopy 331, 89-105.



AUTOMATIZACIÓN DEL CÁLCULO DE LA FUERZA DE REACCIÓN EN EYRINGPY

Alan Quintal-Flores, Eugenia Dzib, Gabriel Merino

Departamento de Física Aplicada, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Unidad Mérida, Km. 6 Antigua carretera a Progreso, Apdo. postal 73, Cordemex, 97310, Mérida, Yuc., México.

Eyringpy es un programa para el cálculo de propiedades termoquímicas y constantes de velocidad de reacciones en fase gaseosa y en disolución para sistemas unimoleculares o biomoleculares. Este código escrito en Python con interfaz de usuario amigable y formato de entrada sencillo emplea la partición canónica para estimar las propiedades termoquímicas y la teoría de estado de transición para el cálculo de las constantes de velocidad.¹ El curso de una reacción química se puede describir por medio de la variación de la energía potencial del sistema a lo largo de la coordenada de reacción. La fuerza de reacción $F(R)$ es la derivada negativa de la energía potencial del sistema $V(R)$ con respecto de la coordenada de reacción. Las características de $F(R)$, su mínimo, máximo y ceros, dividen el proceso en etapas bien definidas que, en general, pueden caracterizarse en términos de cambios en las propiedades estructurales y/o electrónicas del sistema². En este trabajo se presenta la implementación del módulo de Eyringpy que calcula la fuerza y la constante de la fuerza de reacción, lo que nos permite realizar el análisis e interpolación del IRC, así como la obtención de la energía de reacción y activación con base en el modelo desarrollado por ToroLabbé et al³⁻⁴. Para mostrar el funcionamiento de la implementación del módulo de Eyringpy se han utilizado varios ejemplos, como en el caso de la transferencia de protón: $\text{HO-N=S} \rightleftharpoons \text{O=N-SH}$ ⁵.



Referencias:

1. Dzib, E.; Cabellos, J. L.; Ortíz-Chi, F.; Pan, S.; Galano, A.; Merino, G., Eyringpy: a program for computing rate constants in the gas phase and in solution. *International Journal of Quantum Chemistry* 2019, 119 (2), e25686.
2. Politzer, P.; Toro-Labbé, A.; Gutiérrez-Oliva, S.; Herrera, B.; Jaque, P.; Concha, M. C.; Murray, J. S., The reaction force: three key points along an intrinsic reaction coordinate. *Journal of Chemical Sciences* 2005, 117 (5), 467-472.
3. Toro-Labbé, A.; Gutiérrez-Oliva, S.; Murray, J. S.; Politzer, P., The reaction force and the transition region of a reaction. *Journal of molecular modeling* 2009, 15 (6), 707-710.
4. Toro-Labbé, A.; Gutiérrez-Oliva, S.; Murray, J.; Politzer, P., A new perspective on chemical and physical processes: the reaction force. *Molecular Physics* 2007, 105 (19-22), 2619-2625.
5. Jaque, P.; Toro-Labbé, A.; Politzer, P.; Geerlings, P., Reaction force constant and projected force constants of vibrational modes along the path of an intramolecular proton transfer reaction. *Chemical Physics Letters* 2008, 456 (4-6), 135-140.



Enlace de halógeno y efectos cooperativos en el clatrato de cloro.

Cristina Cuaulli, Ramón Hernández-Lamóneda

Centro de Investigaciones Químicas CIQ-IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos

La posibilidad de formar enlaces de halógeno dentro de las cajas de clatratos (estructuras formadas por poliedros -llamados cajas- que se constituyen de moléculas de agua y que hospedan moléculas gaseosas) es un tema complejo. Por medio de un análisis de rayos X se ha propuesto la existencia de un “enlace de halógeno multidireccional”[1] y, subsecuentemente, estudios ab-initio de correlación local para cloruro dentro de una caja dodecaédrica aislada muestra evidencia de su presencia[2,3]. En este trabajo, la estructura y energética del clatrato de cloro en su estructura cúbica (sI) es analizada por medio de cálculos periódicos ab-initio basados en la Teoría de los Funcionales de la Densidad. La comparación con cálculos de una caja aislada, muestra que un efecto importante al tratar el cristal completo es una reducción de las regiones con valores de potencial electrostático negativo, lo cual se refleja en un debilitamiento de energías de inclusión del halógeno. Aplicando una variedad de métodos para caracterizar la densidad electrónica analizamos la interacción cloro-caja en detalle confirmando la presencia de enlaces de halógeno en la caja dodecaédrica. El caso de la caja tetradecaédrica, la más grande de la estructura, es más sutil y su tratamiento cuantitativo depende de permitir la ocupación de varias cajas en la celda unitaria dando lugar a un reforzamiento del enlace de halógeno a través de efectos cooperativos.



Referencias:

1Udachin, K. A.; Alavi, S.; Ripmeester, J. A. Water-Halogen Interactions in Chlorine and Bromine Clathrate Hydrates: An Example of Multidirectional Halogen Bonding. *J. Phys. Chem. C* 2013, 117, 14176-14182.

2Ochoa-Resendiz, D.; Batista-Romero, F. A.; Hernández-Lamoneda, R. Communication: Evidence of halogen bonds in clathrate cages. *J. Chem. Phys.* 2016, 145, 161104.

3Guevara-Vela, J. M.; Ochoa-Resendiz, D.; Costales, A.; Hernández-Lamoneda, R.; Martín-Pendás, Á. Halogen Bonds in Clathrate Cages: A Real Space Perspective. *ChemPhysChem* 2018, 19, 2512-2517.



Reactividad catalítica de silicatos en el proceso de obtención de biodiesel.

Cristina Cuautli, Issis Romero-Ibarra

Unidad Profesional Interdisciplinaria en Ingenierías y Tecnologías Avanzadas, Instituto Politécnico Nacional.

Según la Agencia Internacional de Energía[1], en 2015, 81.47% de la energía total consumida a nivel mundial provino de fuentes no renovables de energía cuya combustión produjo 32 104 millones de toneladas de CO_2 -principal gas de efecto invernadero- como subproducto. El reto es claro: emigrar al uso de fuentes sustentables de energía. Los biocombustibles son una opción prometedora. Como parte del esfuerzo, en nuestro grupo de trabajo se busca hacer más eficiente el proceso de obtención de biodiesel a partir de materias primas no comestibles. Un paso importante en el proceso es la transformación de triglicéridos y metanol en ésteres metílicos -biodiesel- a través de la reacción de transesterificación en presencia de un catalizador. La elección correcta del catalizador es imprescindible. En este trabajo analizamos la actividad catalítica de silicatos de sodio y litio como catalizadores heterogéneos frente a la molécula de triacetina (como modelo de triglicérido) y metanol, partiendo de resultados experimentales obtenidos en el grupo de trabajo[2,3]. Con cálculos periódicos basados en la Teoría de Funcionales de la Densidad, analizamos la estructura electrónica y la energética de las superficies expuestas limpias -determinadas por difracción de rayos X- y con las especies moleculares envueltas en la reacción con el fin de aclarar algunos aspectos del mecanismo y contribuir a un diseño inteligente de catalizadores.



Referencias:

- 1 International energy agency. <https://www.iea.org/>
- 2 Martínez A.; Mijangos G. E.; Romero-Ibarra I. C.; Hernández-Altamirano R.; Mena-Cervantes V. Y. Fuel 235 (2019), 277-287.
- 3 Martínez, A.; Mijangos, G. E.; Romero-Ibarra, I. C.; Hernández-Altamirano, R.; Mena-Cervantes, V. Y.; Gutiérrez S. J. Clean. Prod. 196 (2018) 340-349.

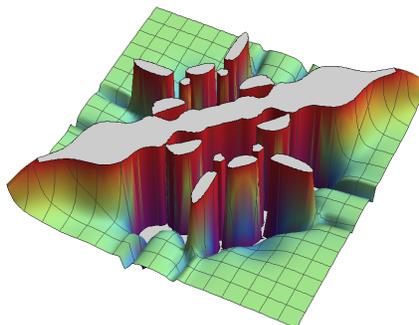


El integrando de intercambio e interacción química

Cipriano Ariel González Trejo, Minhuy Hô

Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos.

El método Hartree-Fock es una herramienta utilizada en la química computacional y es el punto de partida para la medición de la correlación electrónica en la formación de enlaces [1]; de éste se origina la integral de intercambio, que se presenta en la interacción entre electrones del mismo espín. El integrando de intercambio (K_{ij}) no cuenta con una interpretación física clásica [2], debido a la densidad de intercambio $\rho_{ij}(r)$. $K_{ij}(r;r') = \rho_i(r)\rho_j(r)(1/r r')\rho_i(r')\rho_j(r') = \rho_{ij}(r)(1/r r')\rho_{ij}(r')$. K_{ij} tiene un efecto atractivo de corto alcance [3] y a pesar de tener una contribución energética pequeña, es relevante en varios campos de la química computacional, por ejemplo, en los funcionales de la densidad de tipo híbrido [4]. En este trabajo se presenta a $K_{ij}(r;r')$ en sistemas de interés: H_2 , LiH , N_2 , F_2 , a nivel MP2/6-31G, cada uno de estos representa diferente tipo de enlace químico. Encontramos que la topología de los mapas de este integrando es representativa de la naturaleza del sistema; así, hemos empleado a $K_{ij}(r;r')$ para caracterizar dichas interacciones.





Referencias:

1. Jensen, F., Introduction to Computational Chemistry, Second Edition, Wiley, England, 2007.
2. Szabo, A. y Ostlund, N., Advanced Quantum Chemistry, First Edition, Dover Publications, Mineola, New York, 1996.
3. Stone, A., The theory of intermolecular forces, Second Edition, Oxford University Press, United Kingdom, 2013.
4. Becke, A. (1993). A new mixing of Hartree-Fock and local density-functional theories. Journal of Chemical Physics, 98 (2), 1372-1377.



Descripción precisa de sistemas con alta correlación mediante ocupaciones fraccionales

José Alberto Cabrera Jaime, José Roberto Ríos Rivero, José Marco Antonio Franco Pérez

Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química, UNAM.

En este trabajo presentamos un método para determinar la energía de correlación electrónica de sistemas conocidos por estar altamente correlacionados, dentro de la aproximación de la termo-correlación electrónica. Los sistemas que tratamos son el perfil de rotación del etileno, los compuestos de níquel NiSi, NiGe, NiO, NiS y los perfiles de disociación de las moléculas H_2^+ , H_2 , N_2 , He_2 y C_2 . Para cada sistema se realizaron cálculos de estructura electrónica a nivel HF y CISD(T). Con la energía CI es posible calcular los números de ocupación fraccionales, mientras que de la energía HF es posible extraer la energía cinética, la energía de intercambio y las energías orbitales individuales. Utilizamos una red neuronal secuencial programada ad hoc en el seno del grupo de investigación: los nodos de entrada toman los valores de energía cinética por electrón, energía de intercambio por electrón, energía del HOMO y energía del LUMO; el nodo de salida proporciona los valores de los números de ocupación fraccionales para cada orbital, que pueden ser usados para calcular posteriormente la energía de correlación electrónica correspondiente. Los valores de la red neuronal son confrontados con cálculos CISD(T). Nuestros resultados preliminares indican que de una red entrenada satisfactoriamente ($R^2 = 0.97$) es posible obtener valores numéricos precisos de las ocupaciones fraccionales y, como consecuencia, de la energía de correlación electrónica.



Referencias:

J. Chai (2012). Density functional theory with fractional orbital occupations. *J. Chem. Phys.*, 136, 154104.

W. Jiang, N. J. DeYonker, A. K. Wilson (2011). Multireference character for 3d transition-metal-containing molecules. *J. Chem. Theory Comput.*, 8, 460 – 468.



Estudio de las interacciones en la mezcla de sulfuro de hidrógeno y cuatro hidrocarburos.

Edgar Sulca Fonseca, Juan José García Miranda, Jorge Garza Olguín

Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

El sulfuro de hidrógeno (H_2S) es un contaminante gaseoso altamente tóxico y en varios depósitos de petróleo se ha encontrado que cuando la concentración de este gas sobrepasa las 10 ppmv (partes por millón por volumen) el pozo es considerado ácido y es imprescindible tomar medidas de seguridad debido a su alto efecto corrosivo. Esta inevitable presencia de sulfuro de hidrógeno en las tuberías de producción hace necesario el uso de costosos recolectores químicos para eliminarlo y prevenir la corrosión causada por este gas. En este trabajo se estudiaron las interacciones en fase gas entre el sulfuro de hidrógeno y cuatro hidrocarburos: Xileno, Tolueno, 2,3-Dimetilbutano y 2,4-Dimetilhexano con la finalidad de proponer una nueva manera para capturar H_2S . [1] La búsqueda de interacciones se llevó a cabo de manera estocástica con el código RISSA[2]. Inicialmente se estudiaron los posibles isómeros entre el sulfuro de hidrógeno y cada uno de los hidrocarburos mencionados anteriormente, manteniendo la proporción 1:1. Los candidatos proporcionados por RISSA fueron optimizados con el método MP2 y siete funcionales de intercambio y correlación (PBE, PBE-D3, PBE0, PBE0-D3, B3LYP, B3LYP-D3, M062X), todos ellos con las bases 6-311++G(3df,3pd) y 6-311++G**. A partir de este procedimiento se seleccionó el funcional de intercambio y correlación con el cual se obtuvieron los isómeros de más baja energía de la mezcla H_2S y los cuatro hidrocarburos.



Referencias:

H. A. Elmawgoud, T. M. Elshiekh, S. A. Khalil, A. M. Alsabagh, Mamoun Tawfik. Egyptian Journal of Petroleum (2015) 24, 131-137

J. .J. García, R. Hernández-Esparza, R. Vargas, W. Tiznado, J. Garza. New. J. Chem., 2019, 43, 4342



EXPLORACIÓN EXHAUSTIVA DE SISTEMAS CON FÓRMULA (C₅H₅)₂E₂(E= Be, Mg, Ca, Sr y Ba)

Gerardo Hernández-Juárez, Jorge Barroso, Gabriel Merino.

Departamento de Física Aplicada, Cinvestav-Mérida; México.

En 2004, el grupo de Carmona y colaboradores logró la síntesis del primer dimetaloceno, siendo la primera molécula estable con un enlace Zn-Zn.¹ A la par se reportó teóricamente la viabilidad de análogos con metales del grupo 2 y 12, pero hasta la fecha no se han sintetizado o detectado experimentalmente. En este trabajo exploramos sistemáticamente la superficie de energía potencial para complejos con fórmula (C₅H₅)₂E₂(E= Be, Mg, Ca, Sr y Ba) mediante el programa GLOMOS, el cual consiste en una serie de algoritmos automatizados y orientados a la búsqueda del mínimo global de cierta estequiometría. Los resultados obtenidos son tres isómeros predominantes en donde (C₅H₅)₂E₂(E=Be, Ca, Sr y Ba) adoptan una estructura tipo A, y (C₅H₅)₂Mg₂ adopta una estructura tipo sándwich, B?, similar a la reportada para los sistemas dimetalocenos, el isómero C solo es un mínimo sobre la superficie para todos los casos y es relativamente más estable que B en el sistema con Ba donde A es el mínimo global. Este trabajo muestra que esta combinación de átomos puede adoptar estructuras que no se han considerado.

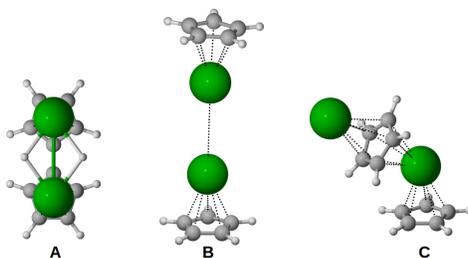


Figura 1. Isómeros para compuestos con fórmula general (C₅H₅)₂E₂(E= Be, Mg, Ca, Sr y Ba)



Referencias:

I. Resa, E. Carmona, E. Gutierrez-Puebla and A. Monge, Science, 2004, 305, 1136–1138.



CORRELACIONES DE ÓRDENES ALTOS EN UN SISTEMA DE TRES OSCILADORES ARMÓNICOS ACOPLADOS

Saúl Juan Carlos Salazar Samaniego, Humberto Laguna Galindo, Robin Preenja Sagar

Universidad Autónoma Metropolitana

Los modelos propuestos en este trabajo son el de tres osciladores no interactuantes y el de tres osciladores interactuantes con y sin espín. El objetivo de este estudio es examinar las interacciones debidas a la simetría de la función de onda, el espín y el potencial de interacción entre pares. Para esto presentamos un análisis de las entropías de Shannon para la localización y la información mutua para la correlación entre pares y de órdenes más altos, tanto en el espacio de posición como en el espacio de momentos. En el caso del modelo con interacción tenemos que el potencial armónico entre pares es atractivo o repulsivo y variamos la intensidad del potencial para estudiar la respuesta de éste parámetro. El comportamiento referente a la información mutua de pares y la información mutua de tercer orden que captura las correlaciones de órdenes más altos en las tres partículas son estudiados para analizar las diferencias o semejanzas. También se discute el comportamiento de la suma entrópica en los tres modelos.



Referencias:

Átomo de Moshinsky

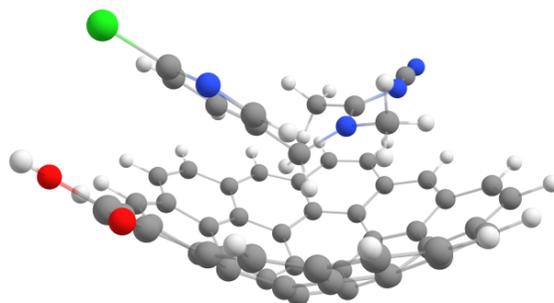


Análisis de la adsorción de acetamiprid sobre estructuras de grafeno curvadas

Erwin García-Hernández, Luz Palomino-Asencio, Rafael Catarino-Centeno, Alfredo Ramírez-Torres.

Departamento de Posgrado e Investigación, Instituto Tecnológico Superior de Zacapoaxtla.

El acetamiprid, es uno de los insecticidas neonicotinoides más usados a nivel mundial. Estos compuestos, han llamado la atención en los últimos años por su propensión a convertirse en enemigos ambientales. Por un lado, se les ha asociado un impacto negativo en el curso de la polinización, ya que afectan a organismos polinizadores [1] y por el otro, su alta solubilidad y persistencia en suelos, los hace idóneos como contaminantes de aguas subterráneas [2]. Por tal motivo, en el presente trabajo, se muestra un estudio de primeros principios de la adsorción de acetamiprid, con modelos de grafeno curvados mediante defectos en su anillo central para su posible uso como adsorbentes. Un modelo tipo armchair $C_{50}H_{15}$ se utilizó y funcionalizó con grupos -OH y -COOH en la corona interna y externa. Se hizo una búsqueda de conformaciones estables usando el programa RISSA[3] y una optimización inicial con MOPAC[4]. Las estructuras de mínima energía, se reoptimizaron con DFT usando la metodología PBE/6-31G*. Se encontraron más de 5000 modos de interacción para los modelos propuestos. En las estructuras más estables, el acetamiprid se sitúa sobre la sección cóncava del grafeno curvado, siendo las interacciones de vdW las principales en la adsorción y no los puentes de hidrógeno.





Referencias:

- [1] PR Whitehorn, S O'Connor, FL Wackers, D Goulson (2012) Science 336, 351–352.
- [2] DA Haith (2010) Environ Sci and Technol 44, 6496–6502.
- [3] JJ García, R Hernández-Esparza, R Vargas, W Tiznado, J Garza (2019) New J Chem 43:4342–4348
- [4] JJP Stewart (2012) MOPAC2012. Stewart Computational Chemistry, Colorado Springs



Revisión del mecanismo de hidroborcación de alquenos

Jorge J. Pedrozo Romero, Gabriel Merino

Departamento de Física Aplicada, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados Unidad Mérida

Revisión del mecanismo de hidroborcación de alquenos Jorge J. Pedrozo Romero,¹ Gabriel Merino.¹ ¹Departamento de Física Aplicada, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados Unidad Mérida km 6 Antigua carretera a Progreso. Apdo. Postal 73, Cordemex 97310 Mérida, Yuc. MÉXICO e-mail: jorge0289@hotmail.com La hidroborcación es una de las reacciones de adición de alquenos más utilizada en el laboratorio. Esta reacción se utiliza para la obtención de alcoholes y haluros con regioquímica opuesta (anti-Markovnikov) de aquellas que proceden mediante intermediarios catiónicos.¹ En los libros de texto se describe la reacción como un ataque electrofílico concertado, en donde la adición procede a través de un estado de transición (TS) de cuatro centros (Figura 1. estructura A) Los detalles del mecanismo aún se desconocen, ya que hay reportes que sugieren que el TS es de tres centros en lugar de cuatro (Figura 1. estructura B) ² En este trabajo se evaluaron las estructuras obtenidas con diferentes DFT de alquenos simétricos y asimétricos (por ejemplo etileno y propeno), descubriendo una tendencia de los sistemas simétricos a favorecer el TS de tres centros y los asimétricos el de cuatro centros.

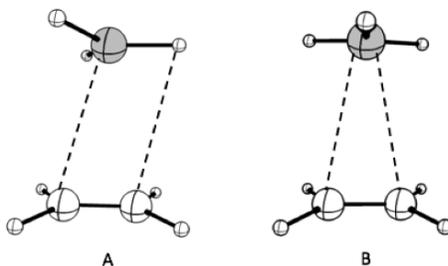


Figura 1. La estructura A corresponde a la descrita en la literatura, mientras que la estructura B es la que se obtiene en los cálculos.



Referencias:

F. A. Carey and R. J. Sundberg, *Advanced Organic Chemistry*, 473 - 577.

Nicolaas J. R. Van Eikema Hommes and Paul v. R. Schleyer *J. Org. Chem.* 1991 56 (12), 4074-4076



Revisión estructural de sistemas con fórmula general B_n^+ con $n=7-20$

Gabriela Castillo-Toraya, Gabriel Merino

Departamento de Física Aplicada, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Unidad Mérida, km 6 Antigua carretera a Progreso. Apdo. Postal 73, Cordemex, 97310 Mérida, Yucatán México

Durante los últimos años, los cúmulos de boro han sido objeto de estudios tanto teóricos como experimentales.¹ Las estructuras catiónicas de boro presentan discrepancias en la identificación del mínimo global debido a la implementación de diferentes métodos computacionales, los cuales han dado como resultado el reporte de diferentes estructuras. Ejemplo de ello es la estructura del mínimo global del B_{13}^+ , que fue reportada inicialmente por Anderson et al.² en el año 1988 y Kawai y Weare³ en el año 1991 como una estructura 3-D y en los años posteriores Kato et al.⁴ reportaron por primera vez una estructura cuasi-planar. Estas mismas irregularidades se presentan en sistemas análogos de boro de otros tamaños. Con el objeto de definir el mínimo global, se exploró sistemáticamente la superficie de energía potencial de sistemas con fórmula B_n^+ donde $n=7-20$, utilizando el programa GLOMOS, el cual implementa una serie de algoritmos automatizados cuya finalidad es la búsqueda del mínimo global. Las optimizaciones de estos sistemas de boro se llevaron a un nivel PBE0-D3/def2-TZVP. Nuestros resultados muestran que para las estructuras de boros desnudos los mínimos globales presentan una tendencia a la formación de estructuras planares en comparación con las estructuras 3-D.



Referencias:

- T. B. Tai, N. M. Tam and M. T. Nguyen, *Theor. Chem. Acc*, 2012, 131.
- L. Hanley, J. L. Whitten and S. L. Anderson, *J. Chem. Phys.*, 1990, 94, 2218–2218.
- R. Kawai and J. H. Weare, *J. Chem. Phys.*, 1991, 95, 1151–1159.
- H. Kato, K. Yamashita and K. Morokuma, *Bull. Chem. Soc. Jpn*, 1993, 66, 3358–3361.



Escalamiento empírico para el cálculo de los desplazamientos químicos de ^1H y ^{13}C

Silvana Silva-Aguirre, Gabriel Merino

Departamento de Física Aplicada, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Km. 6 Antigua carretera a Progreso
Apdo. Postal 73, Cordemex 97310, Mérida, México.

El escalamiento empírico es una de las muchas técnicas utilizadas para lograr alta precisión en cálculos de desplazamiento químico (?) de RMN. Dicha técnica trata de disminuir el error sistemático generado por efectos de solvatación, efectos rovibracionales y otras limitantes del método. Para lograr lo anterior se realiza un análisis vía regresión lineal de los valores isotrópicos (?) para los núcleos y los corrimientos químicos experimentales, de un conjunto fijo de moléculas de prueba. Esta regresión lineal nos proporciona los factores de escalamiento (intersección, pendiente), con los cuales se puede determinar el desplazamiento químico de otras moléculas correspondientes al mismo nivel de teorías (eq 1).
$$\delta_{\text{teoría}} = (\text{intersección} - \delta_{\text{exp}}) / (-\text{pendiente})$$
 (1) Este trabajo busca automatizar el proceso de cálculo para el método de escalamiento reduciendo el error humano y posibilita revisar varios niveles de teoría de forma sencilla y eficiente. El programa se codificó en Python, verificando los cálculos de factores de escalamiento para ^1H y ^{13}C con una base de aproximadamente 100 moléculas² y alrededor de 25 niveles de teoría (B3LYP/6-31G(d), B3LYP/6-31+G(d,p), MP2/6-31+G(d,p), etc) y varios solventes (acetona, cloroformo, benceno, etc) previamente probadas por el grupo de Tantillo. En el cálculo se cambió la dispersión y con ella la estructura molecular, y los desplazamientos isotrópicos, por lo que se esperan cambios en la correlación de los datos.



Referencias:

- [1] Lodewyk, M. W.; Siebert, M. R.; Tantillo, D. J. *Chem. Rev.* 2012, 112 (3), 1839–1862.
- [2] Rablen, P. R.; Pearlman, S. A.; Finkbiner, J. A. *J. Phys. Chem.* 1999, 103 (36), 7357–7363.



ESTUDIO TEÓRICO-EXPERIMENTAL DE LA SÍNTESIS DE ENDOPERÓXIDOS ESTEROIDALES

María Gpe. De los Santos López, María Antonieta Fernández Herrera, Gabriel Merino

Departamento de Física Aplicada, Cinvestav Mérida, 97310, Mérida, Yucatán; México

En síntesis orgánica, el oxígeno singulete (1O_2) se usa frecuentemente debido a su reacción de cicloadición altamente selectiva con olefinas.[1,2] Generalmente, se forma mediante el proceso de fotosensibilización,[2] donde participa una entidad molecular denominada fotosensibilizador,[3] de los cuales, los más empleados son el rosa de bengala, azul de metileno, fenalenona y compuestos coordinados como los complejos de rutenio II.[1,4] En este estudio se investigó el mecanismo de reacción de endoperóxidos esteroidales empleando el C60, 1O_2 como dienófilo, y dienos como el antraceno, los esteroides 7,8-didehidrodiosgenina y benzoato de ergosterilo. Las reacciones se llevaron a cabo en tolueno a temperatura ambiente, en una atmósfera de oxígeno. Los productos de reacción se purificaron por cromatografía en columna flash y se caracterizaron por RMN y IR. Para la parte teórica, las geometrías se optimizaron al nivel PBE0-D3/def2-TZVP y se caracterizaron a través del análisis de frecuencias. Con el cálculo de la coordenada intrínseca de reacción se verificó que las estructuras de transición conectan con los reactivos adecuados. Los efectos de los disolventes se consideraron a través del modelo de solvatación implícita SMD. Los resultados muestran un mecanismo concertado con la fotosensibilización del oxígeno al estado singulete por parte del C60, dando como producto de reacción único el aducto tipo endoperóxido.

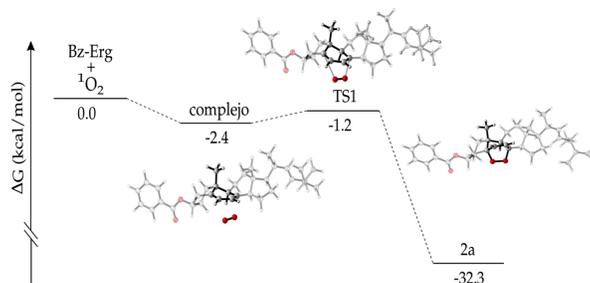


Figura 1. Mecanismo de reacción del Benzoato de ergosterilo y 1O_2 (PBE0-D3/def2TZVP)



Referencias:

Panagiotou, G. D.; Tzirakis, M. D.; Vakros, J.; Loukatzikou, L.; Orfanopoulos, M.; Kordulis, C.; Lycourghiotis. *Appl. Catal. A* 2010, 372 (1), 16–25.

Barton, D. H. R.; Leclerc, G.; Magnus, P. D.; Menzies, I. D. *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 1972, p 447.

Orfanopoulos, M.; Kambourakis, S. *Tetrahedron Lett.* 2010. p 435– 438.

Juzeniene, A.; Moan, J. *Photodiag. Photodyn. Ther.* 2007, 4 (1), 3–11.



Propiedades mecánicas y electrónicas de la monocapa de H₂Be

Armando A. Morín, M.E. Cifuentes-Quintal, Gabriel Merino

Departamento de Física Aplicada, CInvestav Unidad Mérida

Los descubrimientos más recientes en materiales bidimensionales (2D) arrojan propiedades exóticas y ventajosas no vistas regularmente en los materiales en bulto, como un coeficiente de Poisson (?) negativo, el cuál puede conducir a nuevos dispositivos con aplicaciones interesantes.[1,2] Entre los materiales que se han predicho, analizaremos el caso de dos polimorfos del hidruro de berilio (H₂Be) en monocapa, α -H₂Be y β -H₂Be, en donde α es negativo para el primero. Li y colaboradores[3], evaluaron a estos sistemas en el dominio elástico, sin embargo, no profundizaron en la región plástica. En este trabajo presentamos un estudio basado en DFT acerca de las propiedades mecánicas y electrónicas para ambos polimorfos en el dominio de las deformaciones finitas. Nuestros cálculos se basan en el método PAW y el funcional GGA-PBE como está implementado en el software VASP.[4,5,6,7] Partiendo de esto, reproducimos deformaciones estructurales de tensión a las celdas en los ejes cartesianos x, y, y biaxial; y presentamos las curvas de esfuerzo-deformación para cada orientación hasta sus respectivos puntos de fractura. Nuestros resultados reflejan que, para α -H₂Be, $\nu < 0$ hasta la ruptura y cuya tensión crítica se encuentra después del 30% de deformación; en tanto que para β -H₂Be el máximo ocurre en el 9% para todas sus direcciones. Consecuentemente, realizamos el análisis de estructura electrónica con el objetivo de comprender mejor la interacción química entre sus componentes.

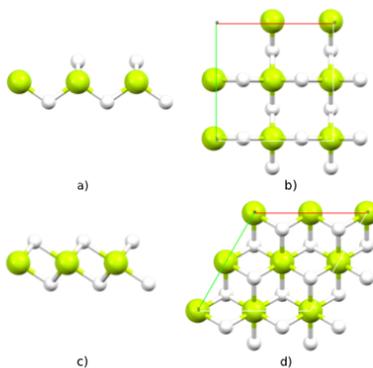


Figura 1. Superceldas de α -H₂Be a) vista lateral, b) vista perpendicular al plano y de β -H₂Be c) vista lateral, d) vista perpendicular al plano



Referencias:

Greaves, G.N.; Greer, A.L.; Lakes, R.S; Rouxel, T. *Nat. Mater.* 2011, 10, 823-837

Park, H.S.; Kim, S.Y.; *Nano Converg.* 2017, 4, 10.

Li, F.; Aeberhard, U.; Wu, H.; Qiao, M.; Li, Y. *RSC Adv.*, 2018, 8, 19432-19436

Kresse, G.; Hafner, J. *Phys. Rev. B*, 1993, 47, 558

Kresse, G.; Hafner, J. *Phys. Rev. B*, 1994, 49 (14), 251

Kresse, G.; Furthmüller, J. *Comput. Mater. Sci.*, 1996, 6 (1), 15-50

Kresse, G.; Furthmüller, J. *Phys. Rev. B*, 1996, 54 (11), 169



El rol del contraíón en complejos SCO de Hierro (II)

Muñoz Macías Jessica Jazmín., Soriano Agueda Luis Antonio., Vela Amieva Alberto.

Departamento de Química, Universidad de Guanajuato., Departamento de Química, Cinvestav-Zacatenco; Av. IPN 2508; Colonia San Pedro Zacatenco; 07360 CDMX

El fenómeno de cruzamiento de espín (SCO, por sus siglas en inglés) consiste en el cambio del estado de espín que va entre una configuración electrónica de bajo-espín (LS) y otra de alto-espín (HS) en complejos de metales de transición [1], este ocurre por aplicación de perturbaciones externas como cambios de temperatura, presión, irradiación de la luz, entre otros. Los materiales que muestran SCO tienen aplicaciones potenciales en nanotecnología [2] y se observa en compuestos octaédricos de Fe(II), Fe(III), Co(II) y otros metales [3]. Existen diversos reportes en donde se estudia cruzamiento de espín desde el punto de vista de la estructura electrónica de los compuestos, en particular por medio de la Teoría de Funcionales de la Densidad. Una encrucijada es seleccionar el funcional de intercambio y correlación a utilizar pues existen una amplia variedad [4,5]. El dilema es que incluso con funcionales del mismo tipo se obtienen predicciones muy distintas para la diferencia de energías entre las configuraciones de bajo y alto espín. Estudios experimentales [6] reportan que el contraíón juega un rol importante en la aparición del SCO. En el presente trabajo mostramos que se puede lograr una predicción correcta de la existencia del SCO en complejos cargados con un metal de transición cuando se toma en consideración explícitamente al contraíón. Ilustramos el protocolo en complejos de Fe (II) con ligantes heterocíclicos de nitrógeno y con tres contraíones de naturaleza diferente.



Referencias:

- [1] Takahashi, K. (2018). Spin-Crossover Complexes. *Inorganics*, 32(6), 1-4. doi:10.3390/inorganics6010032
- [2] Olguín, J., Brook, S. (2013). Spin-Crossover in Discrete Polynuclear Complexes. En M. A. Halcrow, *Spin-Crossover Materials: Properties and Applications* (págs. 77-120). United Kingdom: John Wiley & Sons.
- [3] Gütlich P.; Goodwin, H. A. *Topics in Current Chemistry, Spin Crossover in Transition Metal Compounds I-III*; Springer-Verlag: BERLIN, 2004.
- [4] Kaneko, M.; Tokinobu, S.; Nakashima, S. *Chem. Lett.* 2013, 42, 1432-1434.
- [5] Selmi, W.; Abdelhak, J.; Zid, M. F. *Polyhedron*, 2017, 123, 441-452.
- [6] Zhu, Y.-Y., Li, H.-Q., Ding, Z.-Y., Lu, X.-J., Zhao, L., Meng, Y.-S., Gao, S. (2016). Spin transitions in a series of [Fe(pybox)₂]²⁺ complexes modulated by ligand structures, counter anions, and solvents. *Inorganic Chemistry Frontiers*, 3(12), 1624-1636. doi: 10.1039/C6QI00417B

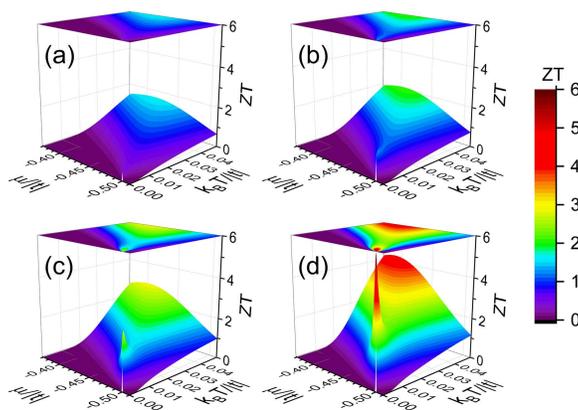


Termoelectricidad en Nanoalambres con Ramificaciones Cuasiperiódicas

Fernando Sánchez (1), Carlos Amador-Bedolla (1), Vicenta Sánchez (2), Chumin Wang (3)

(1) Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México., (2) Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México., (3) Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México

Las ramificaciones en un nanoalambre pueden modificar el transporte de las excitaciones a lo largo del mismo debido a la interferencia de las ondas. En este trabajo estudiamos las propiedades termoeléctricas de un alambre delgado con ramificaciones colocadas cuasiperiódicamente mediante el método de renormalización más convolución en espacio real desarrollado para la fórmula de Kubo-Greenwood [1], en la cual los modelos de amarre fuerte y de Born fueron usados respectivamente para el cálculo de la conductividad eléctrica y térmica [2,3]. Los resultados muestran un crecimiento substancial en la figura de mérito termoeléctrica (ZT) inducido por el desorden cuasiperiódico, debido a que este disminuye la conductividad térmica de los fonones acústicos de longitud de onda larga [4]. Dichos fonones no son alterados usualmente por defectos locales ni por impurezas. Una notable reducción de la conductividad térmica puede ser lograda usando materiales con velocidades de sonido bajas.





Referencias:

- [1] V. Sánchez and C. Wang, Phys. Rev. B 70, 144207 (2004).
- [2] J.K. Flicker and P.L. Leath, Phys. Rev. B 7, 2296 (1973).
- [3] R.J. Elliott, J.A. Krumhansl, and P.L. Leath, Rev. Mod. Phys. 46, 465 (1974).
- [4] F. Sánchez, V. Sánchez, and C. Wang, J. Electron. Mater. 48, 2724 (2019).



Implementación de los Métodos Segmentados de Ayala-Schlegel y Clásico de Referencia

Eugenia Dzib, Filiberto Ortíz Chi, Gabriel Merino

Departamento de Física Aplicada, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Unidad Mérida, Km. 6 Antigua carretera a Progreso, Apdo. postal 73, Cordemex, 97310, Mérida, Yuc., México, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Centro de Investigación de Ciencia y Tecnología Aplicada de Tabasco, C.P. 86690, Tabasco, México

Eyringpy es un programa para calcular constantes de velocidad de reacciones en fase gaseosa y en disolución. Las energías de activación, y otras propiedades termoquímicas, se estiman por medio del ensamble canónico y las constantes de velocidad se calculan con base en la teoría del estado de transición.¹⁻² Las propiedades termoquímicas se calculan usando la aproximación del rotor rígido-oscilador armónico. No obstante, para temperaturas elevadas y moléculas con rotaciones impedidas se emplea la aproximación del rotor impedido con el modelo de Ayala y Schlegel.³ En éste se asume que el potencial de rotación impedida es de la forma $V=(1-\cos Mx)/2$. Sin embargo, para sistemas en los que no tiene esta forma es necesario descomponer la función de partición en una suma de contribuciones para ajustar el potencial entre cada máximo y mínimo a una forma cosenoidal. Así, en este trabajo se presenta la implementación de los métodos segmentados de Ayala-Schlegel y Clásico de Referencia, los cuales permiten calcular la función de partición con mayor precisión para sistemas que poseen un potencial de rotación interna con más de un tipo de mínimo.⁴ Para validar la implementación de estos métodos y ejemplificar la importancia de las rotaciones impedidas en el cálculo de las propiedades termoquímicas y las constantes de velocidad se usa la reacción $\text{HCHO} + \bullet\text{OH}$.⁵



Referencias:

1. Dzib, E.; Cabellos, J. L.; Ortíz-Chi, F.; Pan, S.; Galano, A.; Merino, G. *Int. J. Quantum Chem.* 2019, 119, e25686.
2. Dzib, E.; Cabellos, J. L.; Ortíz-Chi, F. *Eyringpy 1.0*, Cinvestav: Mérida, Yucatán, 2018.
3. Ayala, P. Y.; Schlegel, H. B. *J. Chem. Phys.* 1998, 108, 2314.
4. Ellingson, B. A.; Lynch, V. A.; Mielke, S. L.; Truhlar, D. G. *J. Chem. Phys.* 2006, 125, 084305.
5. Galano, A.; Alvarez-Idaboy, J. R.; Ruiz-Santoyo, M. E.; Vivier-Bunge, A. *J. Phys. Chem. A* 2002, 106, 9520.



Estudio de la contribución electrostática a la estabilidad estructural de la subunidad b

Edgar López Pérez, Gerardo Pérez Hernández, Salomón de Jesús Alas Guardado, Felipe Aparicio Platas

UAM Cuajimalpa

La ATP-sintasa es una enzima de suma importancia en el metabolismo celular, ya que se encarga de sintetizar adenosín trifosfato (ATP). Diversos estudios han demostrado que la subunidad b aislada, en particular la que proviene de la bacteria termófila *Bacillus PS3* (Tb), mantiene su naturaleza estructural idéntica a la que se encuentra en el complejo de la ATP-sintasa[1], dicha característica la hace un modelo efectivo para diversos estudios tanto de flexibilidad como de estabilidad. El mecanismo cooperativo de cambio de unión de ligandos durante el funcionamiento catalítico de la ATP-sintasa involucra pensar el tipo de ligando (ATP o ADP) y el efecto del gradiente de protones o pH entre dos compartimientos celulares. Por lo tanto, el comportamiento conformacional y de la estabilidad de Tb deben estar correlacionados mediante ajustes sutiles de la distribución de carga. En este trabajo se estudia la contribución electrostática de residuos titulables que son sensibles a los cambios de pH. Para ello se realizó dinámica molecular clásica de Tb a diferentes temperaturas con estados de protonación fijos para toda la simulación y manteniendo un ensamble NPT. Se extrajeron diferentes estados conformacionales de Tb y se reevaluó el estado de protonación para dicha conformación. Los resultados muestran una correlación del cambio de conformación de Tb con cambios de pKa de algunos residuos y por lo tanto con la distribución de carga total.



Referencias:

Harada, M. et al. Small-angle x-ray scattering studies of Mg·AT(D)P-induced hexamer to dimer dissociation in the reconstituted γ -complex of ATP synthase from thermophilic bacterium PS3. *J. Biol. Chem.* 266, 11455–11460 (1991).



Modifications of the molecular structure of Aurantinidin dyes for DSSCs

Obasuyi Aanuoluwapo Raphael, Daniel Glossman-Mitnik, Norma Flores-Holguin

Laboratorio Virtual NANOCOSMOS, Centro de Investigación en Materiales Avanzados SC (CIMAV), Chihuahua, México

Two modifications for Aurantinidin dye were done, a design of D- π -A structure of Aurantinidin was done by the additions of triphenylamine as donor moiety and cyanoacrylic acid as acceptor moiety. This Aurantinidin modified molecule will be labelled D- π -A(1). Secondly, a design of D- π -A structure of Aurantinidin was done by the additions of triphenylamine as donor moiety and phenyl-cyanoacrylic acid as acceptor moiety. This Aurantinidin modified molecule will be labelled D- π -A(2), the optical and electrical properties were calculated by using density functional theory (DFT) and time-dependent DFT (TD-DFT). The modifications produce high light harvesting efficiency (LHE) of 0.5894 and 0.6079 for D- π -A(1) and D- π -A(2) respectively, driving force of electron injection ($-G_{\text{inject}}$) of 2.22 eV and 2.30 eV for D- π -A(1) and D- π -A(2) respectively, both modifications have reorganization energy (G_{reg}) in the negative value and which is an indication that the redox level of the electrolyte is lower than the ground states of the dyes. These particular attributes make the electron recombination to be reduced. V_{OC} values of 1.45 eV and 1.46 eV for D- π -A(1) and D- π -A(2) respectively was recorded. These critical parameters have a close relationship with the short-circuit current density (J_{SC}) and open-circuit photovoltage (V_{OC}), and this makes the dyes to exhibit higher efficiency.



Referencias:

- [1] B.O. Regan, M. Gratzelt, in *The Study of Fast Processes and Transient Species by Electron Pulse Radiolysis*, 353 (1991) 737–740. doi:10.1038/353737a0.
- [2] Z. Chen, F. Li, C. Huang, *Organic Dyes for Dye-Sensitized Solar Cell*, (2007) 1241–1258.
- [3] D. Liu, P. V. Kamat, *Dye-Capped Semiconductor Nanoclusters. One-Electron Reduction and Oxidation of Thionine and Cresyl Violet H-Aggregates Electrostatically Bound to SnO₂ Colloids*, *Langmuir*. 12 (2002) 2190–2195. doi:10.1021/la9510994.
- [4] J. Preat, D. Jacquemin, C. Michaux, E.A. Perpete, *Improvement of the efficiency of thiophene-bridged compounds for dye-sensitized solar cells*, *Chem. Phys.* 376 (2010) 56–68. doi:10.1016/j.chemphys.2010.08.001.
- [5] A.R. Obasuyi, D. Glossman-Mitnik, N. Flores-Holguín, *Electron injection in anthocyanidin and betalain dyes for dye-sensitized solar cells: a DFT approach*, *J. Comput. Electron.* 18 (2019) 396–406. doi:10.1007/s10825-019-01331-5.



ESTUDIO TEÓRICO DEL PROCESO REDOX EN EL SITIO ACTIVO DE UNA FAMILIA DE TIORREDOXINAS

Felipe Aparicio

Departamento de Ciencias Naturales, División de Ciencias Naturales e Ingeniería, Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Cuajimalpa; México.

En 2013 se reportaron las estructuras de rayos-X de siete tiorredoxinas (Trx), obtenidas a partir de un estudio evolutivo, consideradas como los ancestros directos de las tiorredoxinas de *E. Coli* y de humano¹. Estas proteínas son enzimas antioxidantes que se encuentran en diversos organismos vivos y se caracterizan porque presentan una región altamente conservada (sitio activo) en su secuencia de aminoácidos, formada por los residuos: cisteína-glicina-prolina-cisteína (CGPC). Las cisteínas son la clave para explicar la capacidad reactiva que tienen las Trx para reducir a otras proteínas. En este trabajo presentamos un estudio teórico de la reactividad química de una familia de tiorredoxinas (7 ancestrales y 2 actuales). Mediante cálculos de estructura electrónica, usando el código ORCA2, evaluamos las propiedades nucleofílicas de las cisteínas del sitio activo de estas enzimas, en estado oxidado y reducido. Los resultados muestran un cambio de la naturaleza nucleofílica de las cisteínas del sitio activo de las enzimas, lo que correlaciona con la línea evolutiva de estas proteínas.



Referencias:

Ingles-Prieto, A.; Ibarra-Molero, B.; Delgado-Delgado, A.; Perez-Jimenez, R.; Fernandez, J.; Gaucher, E.; Sanchez-Ruiz, J.; Gavira, J. Conservation of Protein Structure Over Four Billion Years. *Structure* 2013, 21, 1690-1697.

Neese F. The ORCA program system. *Wiley Interdiscip. Rev.: Comput. Mol. Sci.* 2012, 2, 73-78.



Función de enlaces de H entre monómeros para estabilizar dímeros floroglucinosos acilados

Liliana Mammino

School of Mathematical and Natural Sciences, University of Venda, SudAfrica

Los floroglucinosos acilados diméricos (D-ACPL) constituyen una subclase de los floroglucinosos acilados (ACPL). Sus moléculas son formadas por dos unidades conectadas por un puente metilénico. Cada unidad es un derivado estructural del 1,3,5-trihidroxibenzeno incluyendo un grupo CRO. Los D-ACPL frecuentemente tienen actividades biológicas mejores de los ACPL monoméricos. En los conformeros estables, se instaura un puente de hidrógeno intramolecular (PHI) entre el O sp^2 del grupo CRO y un OH fenólico cercano. Además, dos PHI se establecen entre los dos monómeros, uno a cada lado del puente metilénico. Estos puentes intermonoméricos (PHIM) involucran donadores y aceptores diferentes, según la geometría y la orientación de los dos monómeros. Se ha estudiado un conjunto representativo de moléculas modelos y naturales de D-ACPLs, incluyendo las características estructurales que aparecen más frecuentemente: R o sustituyentes diferentes, casos en que unos OH fenólicos son substituidos por grupos COCH₃ o por un O cetónico, etc. Los cálculos utilizaron los niveles HF/6-31G(d,p) y DFT/B3LYP/6-31G(d,p). Los resultados indican que los PHIM tienen una función importante para la estabilización de los conformeros. Se presentan y comparan las características de los varios tipos de PHIM, incluso con referencia a sus contextos moleculares en los varios tipos de conformeros.



Referencias:

I.P. Singh, S.B. Bharate, Nat. Prod. Rep. 23, 558?591, 2006.

L. Mammino, J. Molec. Struct. 1176, 488?500, 2019.

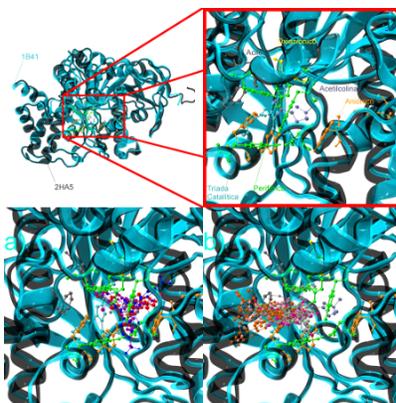


EVALUACIÓN DE LA INTERACCIÓN DE DERIVADOS ORGANOFOSFORADOS CON LA ENZIMA AChE

Uriel J. Rangel, Emma H. Acosta, Luis Á. Zárate, Rosa L. Camacho, Julián Cruz, Carlos Z. Gómez, José M. Vásquez

Área Académica de Química, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Área Académica de Química, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Área Académica de Química, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Área Académica de Química, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Área Académica de Química, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Investigador de CONACyT, Investigador de CONACyT

Los compuestos organofosforados (OP) son sustancias comúnmente empleados en la agricultura como pesticidas. Los OP estudiados son derivados de organotiofosfatos, con estructura $S=P(OR)_2(SR)$ (R =alquilo o arilo) [1]. Se ha encontrado evidencia de que el envenenamiento por OP es causado por la interacción e inhibición con la enzima acetilcolinesterasa (AChE). El sitio activo de la AChE está comprendido por una cavidad de 20 Å de profundidad [2]. Se realizó la simulación de acomplamiento molecular de 33 moléculas de OP empelando el programa AutoDock, utilizando una caja de 70x74x70 puntos con un espaciado de 0.375 Å en el sitio activo y con el algoritmo genético Lamarckiano. Las moléculas aisladas fueron optimizadas con la metodología PBE/6-311++G** para determinar sus parámetros de reactividad. Posteriormente se realizó un análisis de los clústers de cada sistema ligante-proteína, ocupando como referencia del sitio de unión una estructura cristalográfica de AChE complejada con acetilcolina (PDB=2HA5), a fin de establecer una correlación entre la energía del clúster, LD50 y el modo de unión del ligante. Por lo que del análisis realizado se concluye que las moléculas tienden a formar dos grupos interaccionantes. Uno de los grupos forma puentes de hidrógeno preferentemente con la región aniónica (fig 1a), mientras que el otro grupo forma interacciones con la zona periférica y el sitio de unión de acilos (fig 1b).





Referencias:

[1] Sahub, C; Tuntulani, T.; Nhujak, T.; Tomapatnaget, B Effective biosensor based on graphene quantum dots via enzymatic reaction for directly photoluminescence detection of organophosphate pesticide. *Sens. Actuators, B* 2018, 258, 88–97.

[2] Balbuena, P. B.; Derosa, P. A.; Seminario, J. M. Density Functional Theory Study of Copper Clusters. *J. Phys. Chem. B* 1999, 103 (15), 2830–2840.



La suma entrópica en átomos hidrogenoides confinados

Saúl J.C. Salazar, Humberto G. Laguna, Vinod Prasad, Robin P. Sagar

UAM-I, México, University of Dheli, India

En este trabajo estudiamos la localización electrónica en los espacios de posición y momento de átomos hidrogenoides confinados, medida a través de las entropías de Shannon correspondientes. Asimismo, estudiamos la suma entrópica, la versión informacional del principio de incertidumbre, y que puede interpretarse como una medida de la localización del sistema en un espacio-fase separable. En dicha suma, encontramos máximos y mínimos en diferentes estados como función del radio de confinamiento, r_c . Interpretamos esta estructura como una consecuencia del predominio del potencial coulombico o del pozo infinito. Para dicha interpretación nos valemos de estudiar distancias estadísticas tipo Kullback-Leibler entre el átomo confinado, el átomo libre y la partícula en una caja esférica. Utilizamos la serie isoelectrónica del hidrógeno para modular la magnitud del potencial.



Referencias:

I. Białyński-Birula, J. Mycielski, *Comm. Math. Phys.*, 44, 129 (1975).



Exploración teórica de derivados del diquat para baterías de flujo orgánicas

Mariano Sánchez-Castellanos, Eduardo Martínez-González, Sergio S. Rozenel, Martha M. Flores-Leonar, Zaahel Mata-Pinzón, Rodrigo Zepeda-Tello, Víctor M. Ugalde-Saldívar, Rafael Moreno-Esparza, Joep J.H. Pijpers, Carlos Amador-Bedolla, Humberto G. Laguna

FQ-UNAM, México, UAM-I, México, INEEL, México, University of Toronto, Canada

Cada vez hay mayor interés en desarrollar baterías de flujo (RFB) debido a su capacidad de almacenar gran cantidad de energía a bajo costo. Estamos interesados en encontrar moléculas orgánicas para RFB acuosas. Con anterioridad hemos estudiado 156 biperidinas con diferentes sustituyentes y seleccionado algunas moléculas, dada la predicción de su potencial de reducción y su solubilidad. El diquat es una 2,2-biperidina que presenta una reversibilidad adecuada. Una diferencia notable es que en las biperidinas puede haber fenómenos de transferencia de protón, lo que vuelve el pH una variable relevante, que puede influir en el costo y la ingeniería de la batería, mientras que el diquat no involucra reacciones ácido-base y la actividad redox es independiente del pH. En este trabajo presentamos los cálculos del potencial de reducción y de la solubilidad de las 156 moléculas análogas de diquat y comparamos sus propiedades con las 2,2-biperidinas previamente estudiadas. Las propiedades termodinámicas y cinéticas se calculan utilizando DFT y B3LYP/6-311+G(d,p). Los cálculos de solubilidad se realizan con software propio empleando modelos de aprendizaje de máquina, cuyos detalles se presentan en otro póster.



Referencias:

Mariano Sánchez-Castellanos, Martha M. Flores-Leonar, Zaahel Mata-Pinzón, Humberto G. Laguna, Karl M. García-Ruiz, Sergio S. Rozenel, Víctor M. Ugalde-Saldívar, Rafael Moreno-Esparza, Joep J. H. Pijpers, Carlos Amador-Bedolla, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 21, 15823 (2019).

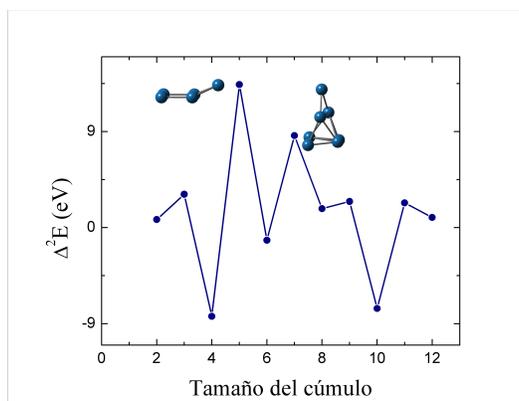


Efecto catalítico de pequeños cúmulos de Platino en la disociación de hidrocarburos

Aldo Gabriel Maya Cruz, Julián Cruz Borbolla, Rosa Luz Camacho Mendoza, Simplicio González Montiel, Leticia Feria, José Manuel Vásquez Pérez

Área Académica de Química, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Unidad Universitaria, km 4.5 Carretera Pachuca-Tulancingo, C.P. 42184, Pachuca-Hidalgo, México

Los compuestos orgánicos volátiles (COV) contribuyen directamente a la formación de ozono y partículas finas, comúnmente conocidas como smog, las principales fuentes antropogénicas de COV incluyen procesos de combustión, emisiones de la industria textil, plantas químicas y plantas generadoras de energía. Debido a su toxicidad y riesgo para la salud, se han desarrollado diferentes métodos para la reducción de COV [1], por ejemplo, la oxidación catalítica, en la cual se requieren temperaturas moderadas entre 200 °C y 500 °C, y el uso de un catalizador heterogéneo. Los principales catalizadores empleados son metales de transición como Pd, Pt, Ir, entre otros [2]. Por lo anterior, en este trabajo se realizó un estudio teórico de la estructura y estabilidad de los cúmulos de Pt_n ($n=3-13$) mediante dinámicas moleculares de Born-Oppenheimer, obteniendo diferentes estructuras conformacionales de cada cúmulo. Las geometrías encontradas fueron optimizadas con el funcional híbrido de intercambio y correlación B3LYP, así mismo se utilizó el potencial efectivo del core LANL2DZ, de acuerdo al código del programa Gaussian 09. Los resultados obtenidos (Δ^2E , BE y Gap) indican que el cúmulo de Pt_4 es el más estable mientras que los cúmulos impares son los de mayor reactividad. Además, se realizó la interacción de estos cúmulos impares con pequeños hidrocarburos a fin de elucidar los posibles mecanismos de disociación.





Referencias:

Ojala, S., Koivikko, N., Laitinen, T., Mouammine, A., Seelam, P., Laassiri, S., ... Keiski, R. (2015). Utilization of Volatile Organic Compounds as an Alternative for Destructive Abatement. *Catalysts*, 5(3), 1092–1151. <https://doi.org/10.3390/catal5031092>

Mingqi, Z., & Richard, M. C. (1999). Homogeneous Hydrogenation Catalysis with Monodisperse, Dendrimer-Encapsulated Pd and Pt Nanoparticles. *Angewandte Chemie International Edition*, 38(3), 364–366. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1521-3773\(19990201\)38:3<364::AID-ANIE364>3.0.CO;2-L](https://doi.org/10.1002/(SICI)1521-3773(19990201)38:3<364::AID-ANIE364>3.0.CO;2-L)



Aprendizaje de máquina para la predicción de las solubilidades de moléculas orgánicas

Rodrigo Zepeda-Tello, Karl M. García Ruiz, Humberto G. Laguna, Mariano Sánchez-Castellanos, Rafael Moreno-Esparza, Joep J.H. Pijpers, Carlos Amador-Bedolla

Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM). Avenida Universidad 3000. 04510, Coyoacán CDMX, México., Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM). Avenida Universidad 3000. 04510, Coyoacán CDMX, México., Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM). Avenida Universidad 3000. 04510, Coyoacán CDMX, México., Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM). Avenida Universidad 3000. 04510, Coyoacán CDMX, México., Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM). Avenida Universidad 3000. 04510, Coyoacán CDMX, México., Instituto Nacional de Electricidad y Energías Limpias (INEEL), Reforma 113, 62490, Cuernavaca, MORELOS, México. , Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM). Avenida Universidad 3000. 04510, Coyoacán CDMX, México.

La estimación teórica de solubilidades es un reto muy complejo en química. La determinación teórica del umbral de solubilidad es muy importante para la síntesis de nuevos compuestos que puedan ser utilizados en distintas aplicaciones. En particular, estamos interesados en estimar la solubilidad de moléculas orgánicas para su aplicación como electrolitos activos en baterías de flujo acuosas. En este trabajo se presenta una librería de Python que utiliza distintas herramientas de aprendizaje de máquina para la predicción de valores de solubilidad. Específicamente, se incluyen distintos métodos para codificar moléculas (fingerprints) así como diferentes algoritmos de predicción. Los resultados se comparan contra los obtenidos vía algoritmos preexistentes, disponibles en otras librerías especializadas, así como contra resultados experimentales. Se presentan predicciones para distintas familias de moléculas que se estudian actualmente en el grupo de trabajo.



Referencias:

WU, Zhenqin, et al. MoleculeNet: a benchmark for molecular machine learning. Chemical science, 2018, vol. 9, no 2, p. 513-530.

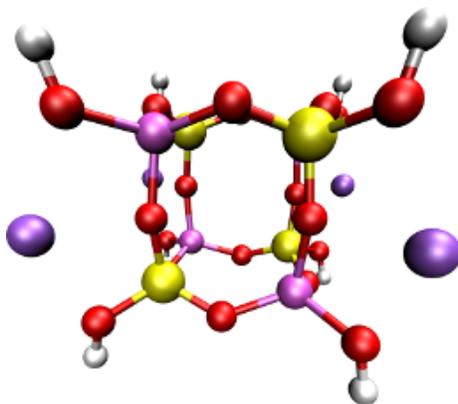


El doble anillo D4R en la prenucleación de zeolitas

José Miguel Mora-Fonz, C. R. A. Catlow

Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, DACB, Department of Chemistry, University College London

En este trabajo presentamos los resultados de la modelación de una de las estructuras clave en la prenucleación de las zeolitas: el doble anillo de ocho silicios (double-four ring, D4R). Dicha estructura, también conocida como una secondary building unit SBU, tiene un papel hasta el momento no claro en el proceso de prenucleación, ya que a pesar de ser predominante su presencia en las soluciones hidrotérmicas[1]? que dan lugar a zeolitas, no es abundante en las zeolitas con una alta relación Si/Al.[2]? Sin embargo, al cambiar las condiciones iniciales de la nucleación del cristal de zeolita, por ejemplo con la sustitución del agente mineralizante OH- por el F-, algunas zeolitas que contienen el D4R son más viables[2]?. Más aun, la inclusión de Ge en lugar del Al en la síntesis permite obtener una gran variedad de zeolitas, por ejemplo las series de germanosilicatos ITQ-n.[3]? La estructura D4R es capaz de contener en su interior un anión F-, (más no uno de OH-), dando lugar a un enlace hipervalente entre el anión y el D4R.[4]? El posible mecanismo de formación del D4R y sus implicaciones en la formación del cristal de zeolitas son explorados utilizando la teoría de los funcionales de la densidad (DFT). En particular el método BLYP/DNP//BLYP/DNP es utilizado, la solución es modelada con el método del dieléctrico continuo, COSMO.[5]





Referencias:

- [1] S. K. Gupta, A. C. Kalita, A. A. Dar, S. Sen, G. N. Patwari, R. Murugavel, *J. Am. Chem. Soc.* 2017, 139, 59–62.
- [2] A. Burton, *Catal. Rev. - Sci. Eng.* 2018, 60, 132–175.
- [3] J. Li, A. Corma, J. Yu, *Chem. Soc. Rev.* 2015, 44, 7112–7127.
- [4] M. G. Goesten, R. Hoffmann, F. M. Bickelhaupt, E. J. M. Hensen, *Proc. Natl. Acad. Sci.* 2017, 114, 828–833.
- [5] M. J. Mora-Fonz, C. R. A. Catlow, D. W. Lewis, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 2005, 44, 3082–3086.



Compuestos nitrogenados como electrolitos activos en baterías de flujo orgánicas

Maurice Klain, Zaahel Mata-Pinzón, Humberto G. Laguna, Martha M. Flores-Leonar, Rodrigo Zepeda-Tello, Sergio S. Rozenel, Eduardo Martínez-González, Víctor M. Ugalde-Saldivar, Rafael Moreno-Esparza, Joep J.H. Pijpers, Carlos Amador-Bedolla, Mariano Sánchez-Castellanos.

Facultad de Química - UNAM, UAM-I, INEEL, University of Toronto

El desarrollo de baterías de flujo ha adquirido cada vez más relevancia, particularmente los dispositivos acuosos con electrolitos activos orgánicos. Por esto, es importante la exploración de nuevas familias de materiales orgánicos. En este trabajo se estudian las propiedades termodinámicas y cinéticas de derivados de la p-fenilendiamina, o-fenilendiamina y la bencidina, esqueletos base de moléculas orgánicas que han sido utilizados como indicadores visuales de procesos de oxidación-reducción. Los compuestos estudiados corresponden a estos núcleos modificados con grupos funcionales electroattractores, electrodonadores que pueden favorecer la solubilidad de estas moléculas en agua. En estas tres familias se estudia la reacción de oxidación a la diimina correspondiente a través del cálculo de potenciales de oxidoreducción y las constantes cinéticas de transferencia electrónica utilizando DFT con B3LYP/6-311+G(d,p) y la teoría de Marcus. Por último, se estima la solubilidad de la especie oxidada y reducida en agua utilizando modelos de aprendizaje de máquina.



Referencias:

Jan Winsberg Tino Hagemann Tobias Janoschka Dr. Martin D. Hager Prof. Dr. Ulrich S. Schubert. (07 November 2016). Redox-Flow Batteries: From Metals to Organic Redox-Active Materials. *Angewandte Chemie*, Volume 56, Issue 3, Pages 686-711. Jan 2018, De Wiley Online Library Base de datos.



Modelo teórico para estimación de la reversibilidad electroquímica de moléculas orgánicas

Zaahel Mata-Pinzón, Mariano Sánchez-Castellanos, Eduardo Martínez-González, Humberto G. Laguna, Víctor M. Ugalde-Saldívar, Rafael Moreno-Esparza, Carlos Amador-Bedolla

FQ-UNAM, FQ-UNAM, FQ-UNAM, UAM-I, FQ-UNAM, FQ-UNAM, FQ-UNAM

Para utilizarse como electrolito en baterías de flujo, una molécula debe presentar una reversibilidad electroquímica adecuada. Actualmente, dicha reversibilidad se estudia teóricamente analizando las modificaciones de las distancias de enlace de la especie oxidada y reducida. En este trabajo, estudiamos lo que podríamos llamar estabilidad intrínseca de la molécula y su relación con la reversibilidad electroquímica. Para estudiar dicha estabilidad, definimos dos parámetros basados en las energías de reorganización (concepto proveniente de la teoría de Marcus) y en los cambios de energía libre de las especies oxidadas y reducidas. Encontramos una correlación entre las magnitudes de dichos parámetros y la reversibilidad electroquímica de compuestos orgánicos en experimentos voltamperometría cíclica. Se analizan también el efecto de distintos grupos funcionales en las constantes cinéticas de transferencia electrónica. Los cálculos se realizan con DFT, B3LYP/6-311+G(d,p).



Referencias:

Omar López-Estrada, Humberto G. Laguna, Cihuapilli Barraeta-Flores, Carlos Amador-Bedolla, ACS Omega, 32, 2130 (2018).

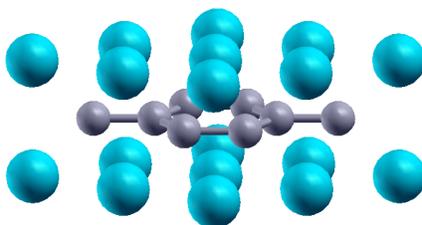


Análisis energético de la estabilidad de capas individuales de MgB₂

Monserrat Horta Salvador, Erwin García Hernández, Alfredo Ramírez Torres

Instituto Tecnológico Superior de Zacapoaxtla, Carretera Acuaco-Zacapoaxtla kilómetro 8, Totoltepec, 73680, Zacapoaxtla, Pue., México.

Se han realizado cálculos de primeros principios para estudiar la estabilidad de unas pocas capas de MgB₂ bajo el criterio de la energía de formación. El MgB₂ es un material intermetálico que se comporta como superconductor a una temperatura crítica relativamente alta de ~39 K, [1] en el volumen éste tiene una estructura tipo AlB₂, es decir, está formado por capas alternadas de Mg y B a lo largo de la dirección [0001]. Para modelar una sola capa del material hemos explorado dos diferentes posibilidades usando estructuras tipo sándwich. En el primer caso una capa de B se encuentra entre dos capas de Mg y para la segunda posibilidad una capa de Mg se encuentre entre 2 capas de B. Una vez definida la estructura de una sola capa, hemos estudiado hasta 3 capas aisladas. Los cálculos se han realizado empleando el código computacional QUANTUM ESPRESSO. En el caso del MgB₂ en el volumen hemos encontrado un valor de 3.08 Å para el parámetro de red *a*, lo cual está en excelente acuerdo con el dato experimental (3.08), en cuanto a la relación *c/a* esta es mayor en menos del 1% del valor reportado experimentalmente. [2] Por lo que corresponde a los modelos de capas aisladas, el espesor de una sola capa es mayor cuando los átomos de B se encuentran entre los átomos de Mg, pero esta característica desaparece a medida que el número de capas aumenta.





Referencias:

J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani, and J. Akimitsu, “Superconductivity at 39°K in magnesium diboride,” *Nature*, vol. 410, no. 6824, pp. 63–64, Mar. 2001.

T. Oguchi, “Cohesion in AlB₂-Type Diborides: A First-Principles Study,” *J. Phys. Soc. Japan*, vol. 71, no. 6, pp. 1495–1500, Jun. 2002.

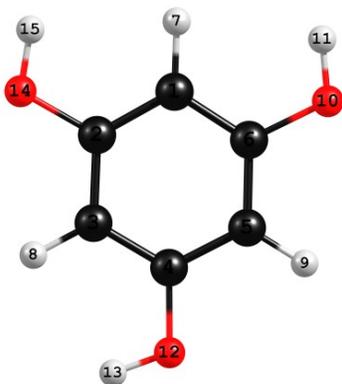


FLOROGLUCINOL: UN ESTUDIO CINÉTICO A NIVEL DFT

Rogelio Alejandro Delgado Alfaro, Zeferino Gómez Sandoval

Universidad de Colima, Facultad de Ciencias Químicas, Coquimatlán, Colima

El floroglucinol (1,3,5-trihidroxibenzeno) es un compuesto miembro del grupo de los polifenoles y uno de los componentes de las florotaninas(1). Se ha mostrado que el floroglucinol está relacionado en eventos de protección biológica tales como actividad bactericida, anti mutagénica, inhibición de anti plasmina y antioxidante(2,3). Se han realizado estudios de su actividad biológica en líneas celulares mostrando que el floroglucinol contribuye a evitar el daño celular por la presencia de radicales tipo ROS, en específico el radical $\cdot\text{OOH}$ (4). En este estudio se muestra un modelo teórico de la cinética química del floroglucinol respecto a la capacidad de neutralizar radicales libres tipo ROS. En estudios sobre antioxidantes tres mecanismos de reacción principales han sido considerados para la reacción radical-molécula: la transferencia de electrón (TE) y transferencia de hidrógeno (TH). Se empleó la Teoría de los Funcionales de la Densidad implementada en Gaussian 09, utilizando el funcional de Thrular M052X y el conjunto de bases 6-311+G (d,p), para elucidar la cinética de reacción del floroglucinol (Figura 1) contra los radicales $\cdot\text{OH}$, y $\cdot\text{OOH}$. Se obtuvo que el mecanismo TE en medio acuoso es el más favorecido mostrando una $k_{\text{ov}}=2.05 \times 10^6$ con el radical $\cdot\text{OOH}$ y $k_{\text{ov}}=1.6 \times 10^5$ con el radical $\cdot\text{OH}$.





Referencias:

Kang KA, Zhang R, Chae S, Lee SJ, Kim J, Kim J, et al. Phloroglucinol (1,3,5-trihydroxybenzene) protects against ionizing radiation- induced cell damage through inhibition of oxidative stress in vitro and in vivo. *Chem Biol Interact.* 2010;185:215–226.

Kang KA, Lee KH, Chae S, Zhang R, Jung MS, Ham YM, et al. Cytoprotective effect of phloroglucinol on oxidative stress induced cell damage via catalase activation. *J Cell Biochem.* 2006;97:609–620.

Fukuyama Y, Kodama M, Miura I, Kinzyo Z, Kido M, Mori H, et al. Structure of an anti-plasmin inhibitor, eckol, isolated from the brown alga *Ecklonia kurome* Okamura and inhibitory activities of its derivatives on plasma plasmin inhibitors. *Chem Pharm Bull (Tokyo).* 1989;37:349–353.

Hee Soo Kim, et al. Phloroglucinol Exerts Protective Effects Against Oxidative Stress–Induced Cell Damage in SH-SY5Y Cells. *J Pharmacol Sci.* 2012; 119, 186 – 192.

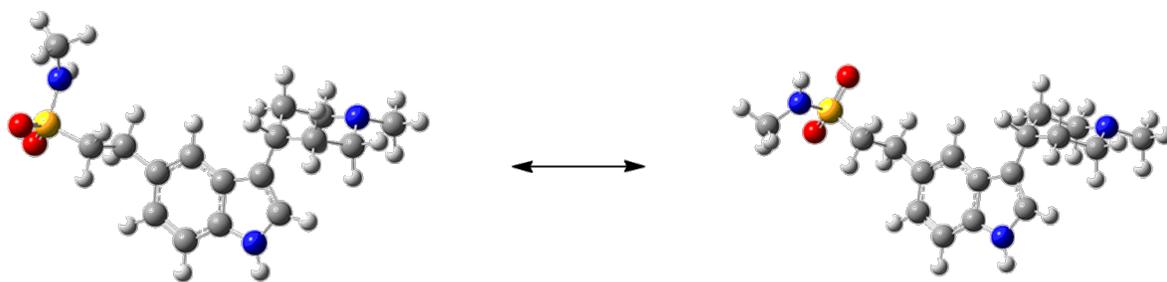


Estudio computacional de los conformeros de naratriptán en fase gaseosa y acuosa

Wendolyne López Orozco, Luis Humberto Mendoza Huizar*

Área Académica de Química, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, carretera Pachuca–Tulancingo, 42183, Mineral de la Reforma, Hidalgo.

El naratriptán (N-metil-3-(1-metil-4-piperidinilo)-1H-indol-5-etano sulfonamida) es un fármaco altamente efectivo en el tratamiento de la migraña. Esto se debe a su acción agonista hacia los sistemas receptores serotoninérgicos $5\text{-HT}_{1B/1D}$ altamente selectiva para el dolor de la migraña y las náuseas [1, 2]. Experimentalmente se ha reportado la estructura de un conformero principal para naratriptán [3]. Sin embargo, en el presente trabajo se realizó la búsqueda conformacional para la molécula empleando métodos semi-empríricos-AM1, y los resultados sugieren que existe un segundo conformero con un valor de energía similar al principal y el cual no se ha reportado. En este trabajo reportamos las interacciones intramoleculares y la reactividad química para ambas conformaciones de naratriptán en fase gaseosa y acuosa con un nivel de teoría X/DGDZVP (donde X=B3LYP, wB97XD, M06 y M06L) y usando el modelo de solvatación PMC.





Referencias:

- [1] G. A. Lambert, «Preclinical Neuropharmacology of Naratriptan,» CNS Drug Reviews, pp. 289-316, 2005.
- [2] N. T. Mathew, «Expert Opinion on Investigational Drugs,» Ashley publications, pp. 1354-3784, 1999.
- [3] «National Center for Biotechnology Information. PubChem Database. Naratriptan, CID=4440,,» 1 Agosto 2019. [En línea]. Available: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Naratriptan>.

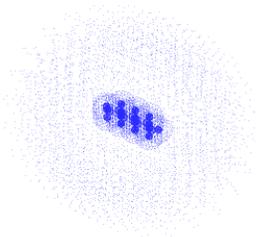


Integración de la Cuenca de Bader con la Malla de Euler-MacLaurin-Lebedev

León Francisco Alday Toledo, Aurora Rodríguez Álvarez, Minhuy Hô

Universidad Autónoma del Estado de Morelos

La Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas de Bader (QTAIM) [1] caracteriza las interacciones químicas a través la topología de la densidad electrónica $\rho(r)$. El paso más intenso de este análisis es la integración de las propiedades en la cuenca envuelta por las superficies de cero flujo del campo de gradiente de $\rho(r)$. Un algoritmo común es colocar los puntos críticos del enlace (PCE) interpolando los puntos de la malla. Luego la superficie de cero flujo se construye de manera explícita usando los PCE. Las propiedades se evalúan por la integración sobre el volumen de las cuencas [2]. Una idea novedosa de Henkelman et al. [3] es generar una malla cúbica y construir las cuencas atómicas según la marcha sobre los puntos de la malla. De esta manera evitamos la construcción de las superficies de cero flujo y la integración en 3D. Sin embargo, la malla cúbica no es sensible a la densidad exponencial de los átomos y puede requerir una finura excesiva para una precisión deseada. En este trabajo presentamos el uso de la malla de Euler-MacLaurin -Lebedev junto el esquema de integración de Becke [4] para generar la densidad molecular. Desde esta malla, la densidad electrónica se particiona en cuencas atómicas. La malla está altamente adaptada a la densidad molecular. Con la ayuda del método de P-RFO [5] para colocar los PCE, las propiedades de las cuencas se evalúan de manera eficiente. Presentamos los resultados preliminares de unas moléculas simples con códigos paralelizados.





Referencias:

R. F. W. Bader, *Atoms in Molecules*, Oxford (1994)

F. W. Biegler-König, R.F.W. Bader and T.H. Tang, *J. Comp. Chem.*, 13, 317-328 (1982); T.A. Keith, Ph.D. Thesis, MacMaster University, Hamilton, ON, Canada (1993)

G. Henkelman, A. Arnaldsson, H. Jónsson, *Comp. Mat. Sc.*, 36, 354 (2006)

Becke, A. D. *J. Chem. Phys.*, 88, 2547-2553 (1988)

A. Banerjee, N. Adams, J. Simons, and R. Shepard, *J. Phys. Chem.*, 89, 52 (1985)

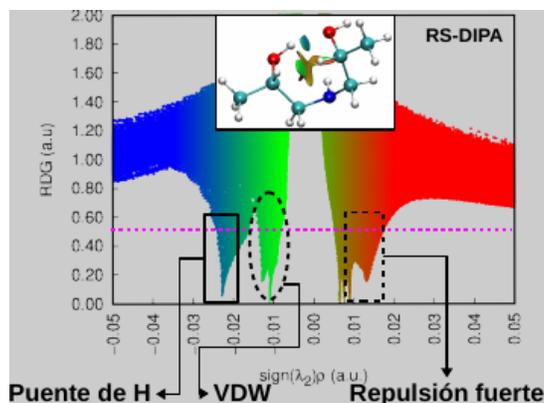


Importancia de las interacciones no covalentes en los isómeros de la Diisopropanolamina

Lourdes Reyes Cervantes, Nelly María de la Paz González Rivas, Jorge López Lemus

Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado México, Instituto Literario No. 100. Cp. 50000; México., Facultad de Química, Universidad Autónoma del Estado México, Instituto Literario No. 100. Cp. 50000; México.

En el proceso de purificación del gas natural, la industria del petróleo utiliza la diisopropanolamina (DIPA: 1-(2-Hydroxypropylamino) propan-2-ol) en solución acuosa para remover impurezas como el dióxido de carbono y sulfuro de hidrógeno. La DIPA es una alcanolamina secundaria que presenta centros quirales que son responsables de algunas de sus propiedades físicas y químicas, las cuales queremos elucidar al considerar los aspectos estructurales de la mencionada molécula. Por tanto, en este trabajo se presenta un análisis de índice de interacciones no covalentes (NCI) en los isómeros RR, RS y SS de la DIPA para identificar enlaces de hidrógeno entre otras interacciones no covalentes que se manifiestan entre los grupos alquilo de la DIPA, los cuales favorecen las interacciones hidrofóbicas. Para determinar el NCI se calculó la densidad electrónica partiendo de las coordenadas de los isómeros optimizados con la aproximación M06-2X/6-311++G**. Los resultados muestran que el isómero RS es el más estable debido a la presencia de un puente de hidrógeno intramolecular más fuerte que en RR y SS.





Referencias:

Erdmann E., Ale R. L., Martínez J., Gutiérrez J. P. and Tarifa E., Endulzamiento de gas natural con aminas. Simulación del proceso y análisis de sensibilidad paramétrico. Av. Cien. Ing. 2012, 3, 89-101.

Al-Ghawas H. A., Hagewiesche P. D., G. Ruiz I. G. and Sandall O. C., Physicochemical properties important for carbon dioxide absorption in aqueous methyldiethanolamine, J. Chem. Eng., 1989, 34, 385-391.

E. R. Johnson, S. Keinan, P. Mori-Sanchez, J. Contreras-Garcia, A. J. Cohen, and W. Yang. Revealing noncovalent interactions. J. Am. Soc., 132, (2010), 6498.

J. R. Lane, J. Contreras-García, J. P. Piquemal, B. J. Miller, and H. G. Kjaergaard. Are bond critical points really critical for hydrogen bonding? J. Chem. Theory Comput., 9, (2013), 3263.

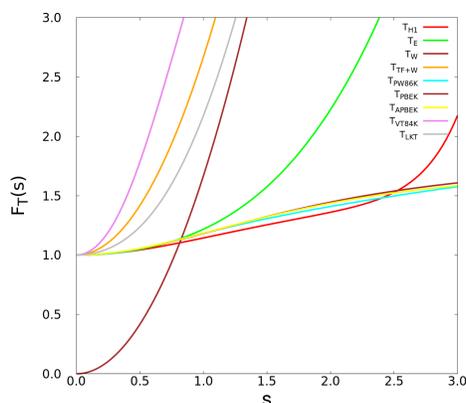


Análisis del funcional de energía cinética en la aproximación de gradiente generalizado

Héctor Francisco, Javier Carmona-Espíndola, José L. Gazquez

Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Departamento de Química, Av. San Rafael Atlixco 186, Cd. de México, 09340, México. , Conacyt-Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Departamento de Química, Av. San Rafael Atlixco 186, Cd. de México, 09340, México.

La expresión para el factor de exacerbamiento que caracteriza la aproximación de gradiente generalizado (GGA) se construye para cumplir con las diferentes restricciones que satisface el funcional exacto de energía cinética. En el presente trabajo se realiza una comparación entre los aspectos que caracterizan al funcional de intercambio y el funcional de energía cinética de tipo GGA para concluir que el desarrollo conjunto en gradientes puede considerarse como un criterio para establecer la forma general del factor de exacerbamiento de energía cinética. Sin embargo, es importante incorporar en esta forma general los límites correctos de s que correspondan a la energía cinética. Para esto último, utilizamos el escalamiento no uniforme en coordenadas espaciales, para mostrar que el factor de exacerbamiento de la energía cinética debe divergir como s^2 . Utilizamos parcialmente la expresión matemática del factor de exacerbamiento del intercambio PBE y hacemos una interpolación basada en los dos límites para valores pequeños y grandes de s en la energía cinética y con ello derivamos un funcional de energía cinética no empírico que conduce a una descripción razonable de las energías cinéticas, cuando éstas se determinan empleando densidades de Hartree-Fock. También se incorpora el laplaciano reducido de la densidad como una alternativa para mejorar localmente el funcional de energía cinética total y, particularmente, el funcional de energía cinética de Pauli.





Referencias:

Hohenberg, P.; Kohn, W. Phys. Rev. 1964, 136, B864-B871.

Kohn, W; Sham, L. J. Phys. Rev. 1965, 140, A1133-1138.

J. P. Perdew, W. Yue, Phys. Rev. B. 1986, 33, 8800-8802.

C. H. Hodges, Canadian J. Phys. 1973, 51, 1428-1437.

Weizsacker, C. F. Z. Physik. 1935, 96, 341-458.

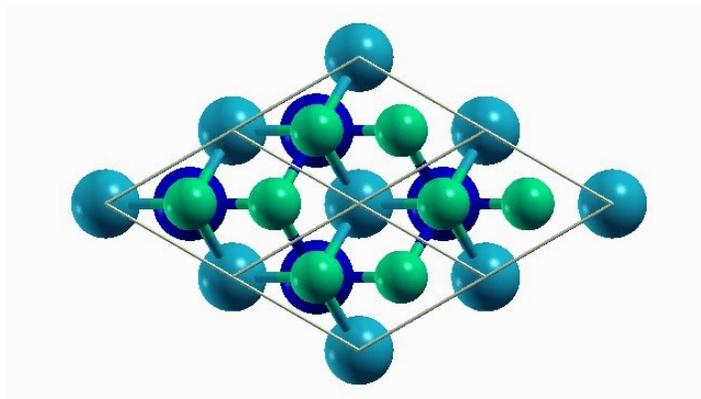


Heteroestructuras de dicalcogenuros de metales de transición

Alfredo Ramírez Torres

Instituto Tecnológico Superior de Zacapoaxtla, Carretera Acuaco-Zacapoaxtla kilómetro 8, Totoltepec, 73680, Zacapoaxtla, Pue., México.

A través de cálculos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad ("DFT") [1] se han estudiado las propiedades estructurales de monocapas, bicapas, y tricapas, formadas a partir de los compuestos MX_2 , donde $\text{M} = \text{Mo}, \text{W}$ y $\text{X} = \text{S}, \text{Se}$. Se han investigado las energías relativas del acoplamiento entre capas (heteroestructuras), empleando la periodicidad 1×1 y los sitios de alta simetría. Cuando se emplean compuestos con diferente calcogenuro el desacoplo en el parámetro de red es de más del 4%, mientras que en compuestos con el mismo calcogenuro se presenta un desacoplo menor al 1%, hablando en valores absolutos. Esta situación ha conducido a modelos en los cuales una capa funciona como sustrato y la otra como adsorbato. Para los cálculos computacionales se ha empleado la parametrización PBE para la energía de correlación e intercambio, y la corrección DFT-D [2] para tomar en cuenta las fuerzas de van der Waals. Se ha encontrado que en caso de no tomar en cuenta la corrección DFT-D las propiedades estructurales muestran variaciones despreciables respecto a aquellas hechas con la corrección, pero en cuanto a los valores de energía estos indican que las monocapas son más estables que el volumen, este escenario es incongruente, mientras que al aplicar la corrección el volumen es más estable que las monocapas. Se presentan los modelos atómicos de las heteroestructuras óptimas.





Referencias:

P. Hohenberg and W. Kohn, “Inhomogeneous Electron Gas,” *Phys. Rev.*, 136 (1964) B864-B71. W. Kohn and L. J. Sham, “Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects,” *Phys. Rev.*, 140 (1965) A1133-A38.

S. Grimme, “Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction”, *J. Comp. Chem.*, 27 (2006), 1787.



Entrenando redes neuronales para predecir la energía de correlación electrónica.

José Roberto Ríos Rivero, José Alberto Cabrera Jaime, José Marco Antonio Franco Pérez

Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química, UNAM.

La determinación de la energía de correlación electrónica de especies químicas constituye una de las principales tareas en química cuántica y computacional, para realizar esta tarea se utilizan herramientas computacionales que son eficientes para sistemas con pocos átomos, sin embargo, resultan ser insuficientes para realizar tareas que involucran sistemas con más de 100 electrones. Una forma prometedora para abordar este problema es el aprendizaje profundo; una estrategia de aprendizaje automático basada en algoritmos de inteligencia artificial. Esta estrategia ha proporcionado excelentes resultados en la predicción de diversas propiedades de moléculas y materiales. Hacer uso de esta herramienta proporciona grandes ventajas, como minimizar el poder de cómputo necesario y aumentar la velocidad de cálculo, manteniendo una precisión confiable. En este trabajo realizamos la construcción de una red neuronal bajo el lenguaje Python 3.6, utilizando la librería Tensorflow y la API Keras, con el objetivo de obtener predicciones de la correlación electrónica para diversos sistemas químicos. Dicha red fue entrenada con 150 especies químicas haciendo uso de un método de mallado implementando en la librería scikit-learn, la cual nos permitió realizar una búsqueda automatizada de los hiperparámetros, tales como las funciones de activación y el optimizador. Mediante esta estrategia recuperamos en promedio el 90% de la energía de correlación del conjunto de las especies utilizadas.



Referencias:

Rupp, M., et al. (2012) Fast and Accurate Modeling of Molecular Atomization Energies with Machine Learning, Physical review letters, 108 (5), 058301.

Garrett B. Goh, et al. (2017) Deep Learning for Computational Chemistry, Journal of Computational Chemistry, 38, 1291– 1307.

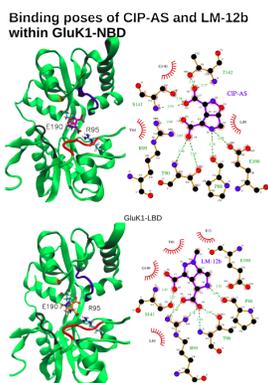


Computer Simulation Studies of a Kainate (GluK1) Receptor with Two Glutamate Analogues

Pavel Andrei Montero-Domínguez, Ramón Garduño-Juárez, Sergio Mares-Sámamo

Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, CONACYT – Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México

Unprecedented advancements have been achieved to understand the underlying mechanisms that sustain life. The modulation of these mechanisms, especially in disease conditions, could lead to the development of new medical applications. However, to attain this goal, we need to characterize life processes at the molecular level. Unfortunately, the majority of current experimental techniques used in life sciences lack this resolution. In this work, we have used molecular dynamics, a computational “microscopy”, to gain insight into the mechanism of interaction, at the atomic level, between two bicyclic glutamate analogues with the ligand-binding domain (LBD) of a kainate receptor 1 (GluK1). This protein receptor plays a crucial role in the development of various central nervous system (CNS) disorders such as Alzheimer’s disease, epilepsy and depression. Here we report the outcome of Molecular Dynamics (MD) simulations to calculate the affinity of binding of two ligands, the glutamate analogues LM-12b and CIP-AS, toward the LBD of GluK1 (GluK1-LBD) and to unravel, at the atomic level, the structural dynamics of such interactions. Our computational approach not only was capable of ranking correctly the binding affinity of analyzed ligands toward the protein receptor, but also to reveal, at atomic resolution, the dynamic nature of such ligand-LBD interaction.





Referencias:

1. Paoletti, P. & Pin, J. (2015). Editorial overview: Neurosciences: Targeting glutamatergic signaling in CNS diseases: new hopes?. *Current Opinion in Pharmacology*, 20, iv-vi.
2. Hayashi, T. (1954). Effects of sodium glutamate on the nervous system. *The Keio Journal of Medicine*, 3(4), 183-192.
3. Maren, S. & Baudry, M. (1995). Properties and Mechanisms of Long-Term Synaptic Plasticity in the Mammalian Brain: Relationships to Learning and Memory. *Neurobiology of Learning and Memory*, 63(1), 1-18.
4. Rikkert, M., Dekkers, W., Scheltens, P. & Verhey, F. (2004). Memantine in Moderate-to-Severe Alzheimer Disease Evidence and Ethics Based?. *Alzheimer Disease & Associated Disorders*, 18(1), 47-48.



Constantes de Complejación entre los iones Zn(II) y Acetato, en disolución de Etanol.

Julieta Reyna Luna, Rodolfo Gómez Balderas, Christiaan Jardinez, Marco A. Franco Pérez

Facultad de Química, UNAM, Cd. Universitaria, Ciudad de México, 04510, México., FES Cuautitlán, UNAM, Av. 1 de mayo, 54714 Cuautitlán Izcalli, Estado de México, México., Escuela Superior de Apah, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo. Unidad Universitaria, carretera Chimalpa Km 8, 43920, Apan Hidalgo, México.

Se presenta un protocolo teórico basado en ciclos termodinámicos que permite la determinación precisa de la energía libre de complejación entre el ion Zn^{2+} con ligantes carboxilato en disolución de etanol. Utilizamos el ion acetato (OAc^-) como especie representativa formando los complejos $[Zn(Acetato)]^+$ y $[Zn(Acetato)_2]$. La problemática evaluación de la energía libre de solvatación de especies cargadas, se realizó mediante una metodología híbrida, solvatando explícitamente al soluto, utilizando un modelo continuo de solvatación. La energía libre de solvatación así obtenida se introdujo en nuestros ciclos termodinámicos para el cálculo de la energía libre de complejación y, se evaluó la calidad en la predicción por confrontación directa con el valor experimental. Nuestros resultados numéricos, se obtuvieron usando los funcionales: BH&HLYP, M062X, B97XD, PBE0 y M052X con el conjunto base 6-311+G(d,p) para las energías libres de reacción en fase gas y el conjunto base 6-31+G(d) con el modelo continuo de solvatación SMD para las energías libres de solvatación. Obtuvimos las mejores predicciones con el funcional B97XD, con una desviación de 4 kcal/mol con respecto al valor experimental para ambas estequiometrías. Finalmente, mediante esta estrategia determinamos la energía libre de complejación para los complejos $[Zn(Dic)]^+$ y $[Zn(Dic)_2]$ (Dic=diclofenaco), obteniendo un error de 3kcal/mol respecto al valor experimental.



Referencias:

Bryantsev, V. S.; Diallo, M. S.; Goddard III, W. A., Calculation of solvation free energies of charged solutes using mixed cluster/continuum models. *The Journal of Physical Chemistry B* 2008, 112 (32), 9709-9719.

Rodríguez-Laguna, N.; Reyes-García, L. I.; Pacheco-Gómez, R.; Flores, R.; Rojas-Hernández, A.; Gómez-Balderas, R., Thermodynamic study of complexation of Zn (II)/L (L = acetate, indomethacin and diclofenac anions) by isothermal titration calorimetry. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry* 2019, 136 (4), 1701-1709.

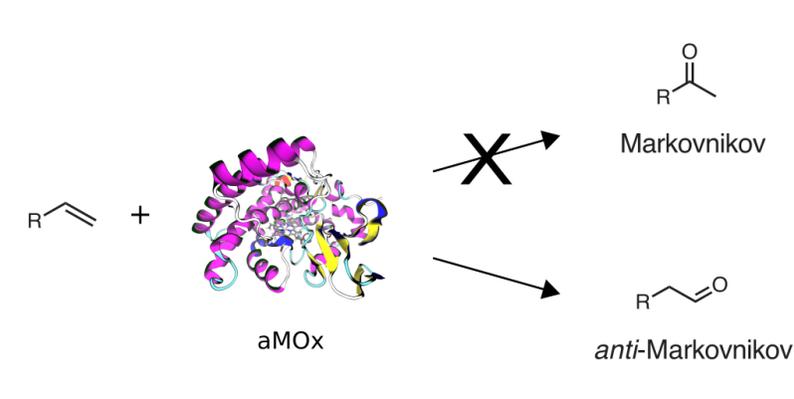


Análisis Computacional de Variantes de la Enzima CYP Aplicadas a Catálisis Orgánica

Carlos Zepactonal Gómez Castro, Luis Angel Zárate Hernández, Rosa Luz Camacho Mendoza, Verónica Salazar Pereda, Julián Cruz Borbolla

Área Académica de Química, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Ciudad del Conocimiento, km 4.5 Carretera Pachuca-Tulancingo, C.P. 42184 Mineral de la Reforma, Hidalgo, México

La enzima citocromo p450 (CYP) presenta dos funciones principales, uno es el metabolismo xenobiótico el cual cataliza la oxidación de moléculas exógenas para aumentar su polaridad y solubilidad para facilitar el proceso de excreción y un segundo rol importante es en la biosíntesis de moléculas señalizadoras [1]. Este tipo de catalizadores biológicos pueden ser aprovechados para sintetizar moléculas de interés en el laboratorio, un ejemplo de esto se observa en el trabajo de Hammer y colaboradores [2] en donde se favoreció la selectividad un producto anti-Markovnikov optimizando la reacción por medio de una enzima mutante obtenida a partir de evolución dirigida (aMOx). El presente trabajo tiene como objetivo proponer un mecanismo molecular que explique las diferencias en la actividad catalítica entre las variantes nativa (CYP) y mutante (aMOx). Los modelos moleculares de las enzimas se generaron a partir de las secuencias reportadas en la literatura [2] para el dominio CYP empleando un servidor de modelado por homología (Phyre2). Estos modelos se equilibraron estructuralmente mediante simulaciones de dinámica molecular. Se observó que, a pesar del número reducido de variaciones en la secuencia de las dos enzimas, existen diferencias estructurales importantes tanto a nivel global como en el sitio activo, los cuales se analizan a detalle en el presente trabajo.





Referencias:

1. Denisov, I. G.; Makris, T. M.; Sligar, S. G. y Schlichting, I. (2005), 'Structure and Chemistry of Cytochrome P450', *Chemical Reviews* 105(6), 2253--2278.
2. Hammer, S. C.; Kubik, G.; Watkins, E.; Huang, S.; Mingos, D. M. P. y Arnold, F. H. (2017), 'Anti-Markovnikov alkene oxidation by metal-oxo-mediated enzyme catalysis', *Science* 358(6360), 215--218.



Dinámica del dominio RBD de la proteína NS1 del virus de influenza

Mayra Lozano,, Arturo Rojo,, Nina Pastor

Cátedra CONACYT-Universidad Autónoma Metropolitana unidad Cuajimalpa, Universidad Autónoma Metropolitana unidad Cuajimalpa, Centro De Investigación en Dinámica Celular, IICBA – UAEM; Cuernavaca, Morelos

La proteína viral NS1 es una proteína homodimérica no estructural codificada por los segmentos del gen NS del virus de influenza tipo A, B y C. Esta proteína es capaz de inhibir la poliadenilación de ARNm celulares para evitar la respuesta antiviral del huésped; así mismo es capaz de suprimir la respuesta del interferón en la célula infectada por el virus, lo que conlleva a la producción de un virus intacto[1]. Debido a que la tasa de mortalidad en los individuos afectados con este virus es mayor de 50% es necesario establecer la relación entre estructura y dinámica de RBDs de NS1 de las cepas del virus de influenza prevalentes en 2016-2018 en el mundo, con su capacidad de interactuar con ARN de doble cadena y con proteínas de la célula infectada. Utilizando los resultados de un trabajo previo se analiza la estructura y dinámica molecular a temperatura ambiente con solvente explícito utilizando el programa NAMD[2] y el potencial CHARMM36[3], así como las interacciones que presenta con la proteína CARD2 que ya han sido descritas experimentalmente



Referencias:

- 1 Krug, R.M. Current Opinion in Virology 2015, 12, 1.
- 2 Phillips, J.P. Braun, R.; Wang, W.; Gumbart, J.; Taikhorshid, E.; Villa, E.; Chipot, C.; Skeel, R.D.; Kale, L.; Schulten, K. J. Comput. Chem. 2005, 26, 1781
- 3 Huang, J.; MacKerell Jr. A. D. J. Comput. Chem. 2013, 34, 2135



Termodinámica de las reacciones de hidroconversión del ácido palmítico para obtener diésel

Isidoro García-Cruz, Víctor Hugo Uc

Gerencia de Transformación de Biomasa, Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas Norte 152, Col. San Bartolo Atepehuacán, 07730, México City, MÉXICO, , Área de Física Atómica Molecula Aplicada (FAMA), CBI, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, Av. San Pablo 180, Col. Reynosa Tamaulipas, México City, 02200, MÉXICO

La emisión de gases de efecto invernadero como CO₂ y CH₄ por el uso de combustibles fósiles afecta al medio ambiente, por lo que actualmente se buscan fuentes renovables de energía, como el uso de la biomasa. Así, el aceite palmítico de origen vegetal está orientado hacia la producción de biocombustibles. Estudios experimentales y teóricos, muestran que es factible estudiar la descomposición del ácidos palmítico para formar hidrocarburos pesados, mediante reacciones de hidrodeshidrogenación (HDO), descarboxilación (DCx), y descarbonilación (DC).[1,2] En este trabajo se ha aplicado la teoría de funcionales de la densidad (TFD) para estudiar la hidroconversión de ácido palmítico, considerando las reacciones antes descritas. Los resultados obtenidos involucran las reacciones de hidroconversión del ácido palmítico, esteárico, oleico y linoleico, que son los componentes principales de los ácidos grasos. Los valores obtenidos de ΔG y ΔH muestran que es posible obtener parafinas de alto peso molecular, como n-pentadecano (n-C₁₅H₃₂), n-hexadecano (n-C₁₆H₃₄), n-heptadecano (n-C₁₇H₃₆) y n-octadecano (n-C₁₈H₃₈), hidrocarburos mayores que son la base para obtener diésel verde.[3]



Referencias:

1. D. Kubicka, J. Horáček. Appl. Catal. A 2011, 394, 9-17.
2. L. X. Li, E. Coppola, J. Rine, J. L. Miller, D. Walker. Energy Fuels 2010, 24, 1305 –1315.
3. D. Valencia, I. García-Cruz, V. H. Uc, L. F. Ramírez-Verduzco, M. A. Amezcua-Allieri, J. Aburto. Biomass and Bioenergy 2018, 112, 37-44

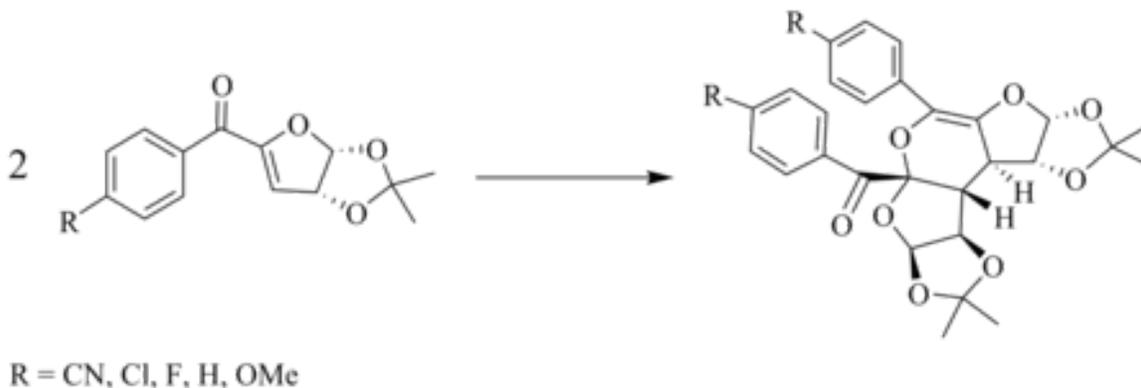


Estudio teórico de la dimerización espontánea de olefinas captodativas.

Isaías Morales-Salazar, Jacinto Sandoval-Lira, Victoria Rodríguez-Tzompantzi, Silvano Cruz-Gregorio, Fernando Sartillo-Piscil, Julio M. Hernández-Pérez

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Posgrado en Cs. Químicas

En la naturaleza existen compuestos con un carácter captodativo y en algunos casos les permite dimerizar de manera espontánea. Un ejemplo de estos son las cetonas α,β -insaturadas aril sustituidas, al hacer un estudio cinético de algunos de estos compuestos ($R = \text{CN}, \text{Cl}, \text{F}, \text{H}, \text{OMe}$, Figura) se observó que la velocidad de reacción para el CN era mayor que los otros sustituyentes. Utilizando la teoría del estado de transición se puede hacer una relación entre los datos experimentales y los cálculos teóricos, por medio de la energía libre de activación (ΔG^\ddagger). Con base en el experimento se propusieron los estados de transición para cada una de las reacciones, que se caracterizaron en el contexto de la teoría de funcionales de la densidad (DFT) a nivel B97XD/6-311G+(d,p) [1], usando el programa Gaussian 09 [2]. Posteriormente con las geometrías obtenidas de la coordenada intrínseca de reacción (IRC) se optimizaron las estructuras de reactivos y productos para obtener los perfiles de energía de cada sistema y su correspondiente energía libre de activación, logrando reproducir la tendencia de la cinética química: $\Delta G^\ddagger_{\text{OMe}} > \Delta G^\ddagger_{\text{H}} > \Delta G^\ddagger_{\text{F}} > \Delta G^\ddagger_{\text{Cl}} > \Delta G^\ddagger_{\text{CN}}$. Para explicar el comportamiento de esta tendencia se realizaron diversos estudios. El análisis de NCI [3,4], reveló que existen interacciones de tipo $\pi-\pi$ entre los reactivos. Gracias al seguimiento del IRC con orbitales intrínsecos de enlace [5,6] se logró proponer un mecanismo de reacción y explicar la diferencia entre velocidades.





Referencias:

J.-D., C.; Head-Gordon, M. Phys. Chem. Chem. Phys. 2008, 10, 6615-20.

Gaussian 09, Revision B.01, Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; et al., Wallingford CT, 2016.

Contreras-García, J.; R. Johnson, E.; Keinan, S.; Chaudret, R.; Piquemal J.-P.; N. Beratan, D.; Yang, W. J. Chem. Theory Comput. 2011, 7 (3), 625-632.

Solano-Altamirano, J. M.; Hernández-Pérez J. M. Comput. Phys. Commun. 2015, 196, 362-371.

Knizia, G. J. Chem. Theory Comput. 2013, 9, 4834.

Knizia, G.; Klein, J.E.M.N. Angew. Chem. Int. 2015, 54, 5518.



En búsqueda de los mecanismos de acción del carbono negro en el forzamiento radiativo

Xochitl Cruz Núñez, Carlos Amador Bedolla

Centro de Ciencias de la Atmósfera UNAM, Facultad de Química UNAM

El carbono negro es un conglomerado particulado que contiene un núcleo de carbono, la mayoría de las veces en forma de placas aunque hay tipo globular, como fulerenos, que tiene la particularidad de capturar la radiación infrarroja que emite la tierra y la radiación incidente solar, y emitir en el infrarrojo, aumentando la temperatura de la atmósfera baja. Además, el carbono negro tiene propiedades de interacción con las nubes, con el hielo y por ello es un potente forzante climático. Algunos autores han estimado la potencia del carbono negro en el calentamiento global en el segundo lugar, justo atrás del CO₂, y delante del metano (Bond et al. 2013). La determinación del forzamiento radiativo del carbono negro se puede realizar mediante métodos híbridos (con datos de satélite y modelos de aerosoles y transferencia radiativa) y por modelos de circulación global. Sin embargo, está vigente la búsqueda de los mecanismos de la transferencia radiativa en estas partículas. En este trabajo reportamos el uso de un método de teoría de funcionales de la densidad dependiente del tiempo (TDFDT) a través del programa Qchemp (Shao et al. 2015) para indagar acerca de la estructura mínima del carbono negro por tres modelos de carbono negro, uno de tipo fullereno y dos de tipo grafito.



Referencias:

Bond, T. C., Doherty, S. J., Fahey, D. W., Forster, P. M., Berntsen, T., DeAngelo, B. J., Flanner, M. G., Ghan, S., Kärcher, B., Koch, D., Kinne, S., Kondo, Y., Quinn, P. K., Sarofim, M. C., Schultz, M. G., Schulz, M., Venkataraman, C., Zhang, H., Zhang, S., Bellouin, N., Guttikunda, S. K., Hopke, P. K., Jacobson, M. Z., Kaiser, J. W., Klimont, Z., Lohmann, U., Schwarz, J. P., Shindell, D., Storelvmo, T., Warren, S.G., Zender, C.S. (2013) Bounding the role of black carbon in the climate system: A scientific assessment. *J Geophys. Res.* 118, 5380-5552, doi: 10.1002/jgrd.50171.

Shao, Y., Z. Gan, E. Epifanovsky, A. T. B. Gilbert, M. Wormit, J. Kussmann, A. W. Lange, A. Behn, J. Deng, X. Feng, D. Ghosh, M. Goldey P. R. Horn, L. D. Jacobson, I. Kaliman, R. Z. Khaliullin, T. Kús, A. Landau, J. Liu, E. I. Proynov, Y. M. Rhee, R. M. Richard, M. A. Rohrdanz, R. P. Steele, E. J. Sundstrom, H. L. Woodcock III, P. M. Zimmerman, D. Zuev, B. Albrecht, E. Alguire, B. Austin, G. J. O. Beran, Y. A. Bernard, E. Berquist, K. Brandhorst, K. B. Bravaya, S. T. Brown, D. Casanova, C.-M. Chang, Y. Chen, S. H. Chien, K. D. Closser, D. L. Crittenden, M. Diedenhofen, R. A. DiStasio Jr., H. Dop, A. D. Dutoi, R. G. Edgar, S. Fatehi, L. Fusti-Molnar, A. Ghysels, A. Golubeva-Zadorozhnaya, J. Gomes, M. W. D. Hanson-Heine, P. H. P. Harbach, A. W. Hauser, E. G. Hohenstein, Z. C. Holden, T.-C. Jagau, H. Ji, B. Kaduk, K. Khistyayev, J. Kim, J. Kim, R. A. King, P. Klunzinger, D. Kosenkov, T. Kowalczyk, C. M. Krauter, K. U. Lao, A. Laurent, K. V. Lawler, S. V. Levchenko, C. Y. Lin, F. Liu, E. Livshits, R. C. Lochan, A. Luenser, P. Manohar, S. F. Manzer, S.-P. Mao, N. Mardirossian, A. V. Marenich, S. A. Maurer, N. J. Mayhall, C. M. Oana, R. Olivares-Amaya, D. P. O'Neill, J. A. Parkhill, T. M. Perrine, R. Peverati, P. A. Pieniazek, A. Prociuk, D. R. Rehn, E. Rosta, N. J. Russ, N. Sergueev, S. M. Sharada, S. Sharma, D. W. Small, A. Sodt, T. Stein, D. Stück, Y.-C. Su, A. J. W. Thom, T. Tsuchimochi, L. Vogt, O. Vydrov, T. Wang, M. A. Watson, J. Wenzel, A. White, C. F. Williams, V. Vanovschi, S. Yeganeh, S. R. Yost, Z.-Q. You, I. Y. Zhang, X. Zhang, Y. Zhou, B. R. Brooks, G. K. L. Chan, D. M. Chipman, C. J. Cramer, W. A. Goddard III, M. S. Gordon, W. J. Hehre, A. Klamt, H. F. Schaefer III, M. W. Schmidt, C. D. Sherrill, D. G. Truhlar, A. Warshel, X. Xua, A. Aspuru-Guzik, R. Baer, A. T. Bell, N. A. Besley, J.-D. Chai, A. Dreuw, B. D. Dunietz, T. R. Furlani, S. R. Gwaltney, C.-P. Hsu, Y. Jung, J. Kong, D. S. Lambrecht, W. Liang, C. Ochsenfeld, V. A. Rassolov, L. V. Slipchenko, J. E. Subotnik, T. Van Voorhis, J. M. Herbert, A. I. Krylov, P. M. W. Gill, and M. Head-Gordon (2015). Advances in molecular quantum chemistry contained in the Q-Chem 4 program package. *J Molec Physics* 113, 2, 184-215, doi: 10.1080/00268976.2014.952696



Origen del red-shifting de las absorciones energéticas de complejos antena fotosintéticos.

Gustavo Israel Mondragón Solórzano, Jacinto Sandoval Lira, Joaquín Barroso Flores

Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM, Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM, Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM

Un complejo antena, o complejo recolector de luz (LHC) es una estructura compuesta por pigmentos, entre los que se encuentran las bacterioclorofilas y los carotenoides como los más abundantes. Los LHC de los fotosistemas presentes en las bacterias *R. calzenholzii* (5YQ7)[1] y *B. viridis* (6ET5)[2] contienen bacterioclorofilas-a (Bchl-a) y -b (Bchl-b), respectivamente, e interactúan con carotenoides: 4-ceto-gamma-caroteno (5YQ7) y dihidroneurosporeno (6ET5). El LHC 5YQ7 tiene su absorción máxima en 880 nm, mientras que el LHC 6ET5 en 1000 nm. Al compararlos contra las absorciones de sus pigmentos más abundantes (Bchl-a: 770 nm y Bchl-b: 795 nm)[3] el red-shifting es considerable. En el presente trabajo se aborda el origen del red-shift de las absorciones de dichos LHC. Mediante cálculos TD-DFT (CAM-B3LYP/cc-pVDZ) con disolvente implícito (metanol bajo el modelo SMD) se logró establecer que los carotenoides presentes en cada LHC originan las absorciones máximas.



Referencias:

Xin, Y.; Shi, Y.; Niu, T.; Wang, Q.; Niu, W.; Huang, X.; Ding, W.; Yang, L.; Blankenship, R. E.; Xu, X.; et al. Cryo-EM Structure of the RC-LH Core Complex from an Early Branching Photosynthetic Prokaryote. *Nat. Commun.* 2018, 9 (1), 1568. <https://doi.org/10.1038/s41467-018-03881-x>.

Qian, P.; Siebert, C. A.; Wang, P.; Canniffe, D. P.; Hunter, C. N. Cryo-EM Structure of the Blastochloris Viridis LH1–RC Complex at 2.9 Å. *Nature* 2018, 556 (7700), 203–208. <https://doi.org/10.1038/s41586-018-0014-5>.

Grimm, B.; Porra, R. J.; Rüdiger, W.; Scheer, H. Chlorophylls and Bacteriochlorophylls (*Advances in Photosynthesis and Respiration*); 2006.

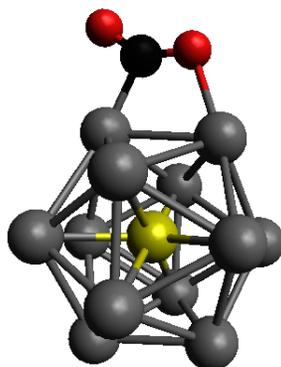


Estudio teórico de la activación de CO₂ sobre cúmulos soportados en grafeno modificado

Elvia Patricia Sánchez Rodríguez, Jesús Alberto Martínez Espinosa, Heriberto Cruz Martínez, Dora Iliana Medina Medina

Tecnológico de Monterrey

La continua explosión demográfica aunada al incesante desarrollo industrial ha provocado el uso excesivo de combustibles fósiles, relacionado directamente con las emisiones de CO₂ a la atmósfera, gas conocido por su efecto invernadero. Una solución a este problema es la transformación del CO₂ a productos de valor industrial [1-3]. En este contexto, se han realizado diversos estudios teóricos y experimentales, relacionados con la activación de CO₂ en diferentes sistemas, tales como los catalizadores metálicos soportados en grafeno [4-6]. En este trabajo se presenta un estudio teórico basado en la teoría de funcionales de densidad para investigar la adsorción y activación de CO₂ sobre cúmulos bimetálicos tipo núcleo-coraza MPd₁₂ (M= Pd, Fe, Co, Ni, Cu) con geometría icosaédrica, soportados en grafeno N₃-dopado. Los cúmulos metálicos fueron estabilizados en el grafeno dopado y al adsorber la molécula de CO₂ en la superficie metálica se observó la deformación del enlace lineal y la elongación de los enlaces C-O. Con estos resultados se concluye que el uso de cúmulos bimetálicos núcleo-coraza favorece la adsorción y la activación de la molécula de CO₂.





Referencias:

S. Lee and S. Park, *J. Ind. Eng. Chem.*, 2015, 23, 1–11.

D. A. Lashof and D. R. Ahuja, *Nature*, 1990, 344, 529–531.

I. S. Thakur, M. Kumar, S. J. Varjani, Y. Wu, E. Gnansounou and S. Ravindran, *Bioresour. Technol.*, 2018, 256, 478–490.

X. Gao, Y. Wang, X. Liu, T. L. Chan, S. Irle, Y. Zhao and S. B. Zhang, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2011, 13, 19449–19453.

L. Rodríguez-Pérez, M. Á. Herranz and N. Martín, *Chem. Commun.*, 2013, 49, 3721–3735.

F. Montejo-Alvaro, H. Rojas-Chávez, R. Roman-Doval, A. I. Mtz-Enriquez, H. Cruz-Martínez and D. I. Medina, *Solid State Sci.*, 2019, 93, 56–61.

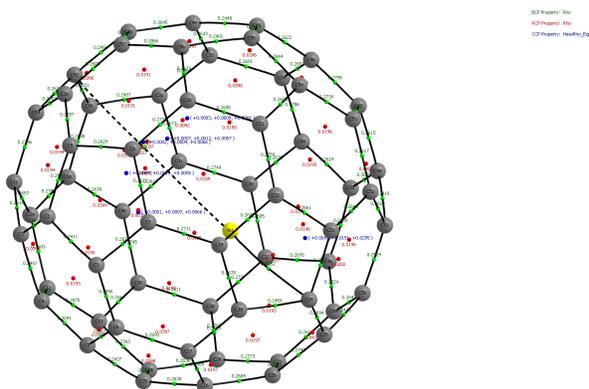


Estudio computacional de endofullerenos con clústeres de vanadio

José Carlos Orozco, María Eugenia Castro, Francisco J. Melendez

Universidad de Guadalajara, Centro Universitario de Tonalá, 45425, Jalisco, México, Centro de Química, ICUAP, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570, Puebla, México, Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570, Puebla, México

La estabilidad de los Endofullerenos con clústeres metálicos depende de la transferencia de carga del clúster a la caja, además de las propiedades electrónicas de la caja vacía y la coordinación entre el metal y el esqueleto de la caja [1]. En este trabajo, se presenta el estudio de Endofullerenos que contienen distintas especies de Vanadio: $V@C_{60}$, $V+4@C_{60}$, $V+5@C_{60}$, $VO+2@C_{60}$ y $VO_4-3@C_{60}$, los cuales fueron seleccionados por su importante actividad farmacológica y su posible afinidad con la estructura interna de fullereno. Usando el funcional APFD con el conjunto base LanL2DZ implementado en Gaussian16 [2] en combinación con la Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas usando el programa AIMAll [3] se analizaron la densidad de carga y las interacciones no covalentes. Los resultados indican que la energía de interacción aumenta con el número de electrones presentes en el clúster. La evaluación del MEP muestra que los iones VO_3-1 y VO_4-3 transfieren la carga negativa hacia el fullereno, lo cual es de importancia, ya que la polaridad de los sistemas influye para que puedan interactuar en el cuerpo humano como transportadores unimoleculares [4]. El V neutro o iónico forma enlaces no covalentes dejando a la estructura del fullereno con carga parcial positiva. Los puntos críticos de anillo tienen valores de 0.0214-0.0218 u.a. para los pentágonos y 0.0375-0.0385 u.a. para los hexágonos y los puntos críticos de caja son de 0.0110-0.0125 u.a.





Referencias:

1. Alegret, N.; Rodríguez-Forteza, A.; Poblet, J.M. An. Quim. 2014, 110:2, 121-130.
2. Gaussian 16, Revision B.01, Frisch, M.J.; Trucks, G.W.; et al. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016.
3. AIMAll (Version 19.02.13), Keith T.A., TK Gristmill Software, Overland Park KS, USA, 2019.
4. Donskyi, I.S.; Achazi, K.; Wycisk, V.; Licha, K., Adeli, M.; Haag, R., Langmuir 2017, 33,6585-6600.

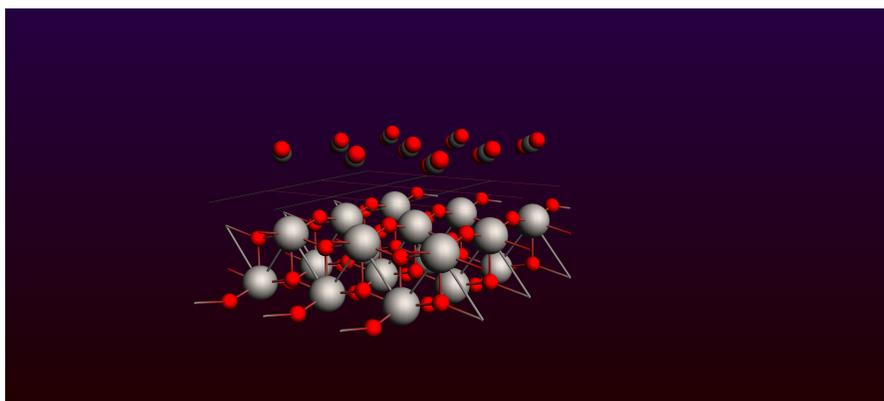


Estudio computacional de la adsorción de CO₂ sobre superficies de TiO₂ (rutilo y anatase)

Rogelio Chávez Rocha, Marco Antonio García Revilla

Departamento de Química. División de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad de Guanajuato.

Resumen. La adsorción del CO₂ sobre la superficie de catalizadores heterogéneos es crucial para la subsecuente reacción de fotorreducción. Los cálculos de la teoría de funcionales de la densidad (DFT) arrojan datos importantes sobre el rol que juegan los diferentes estados de oxidación del metal así como las vacancias y defectos en la superficie del catalizador 1-2. En este trabajo se presentan los resultados obtenidos de los cálculos computacionales realizados de modelos de adsorción de moléculas de dióxido de carbono (CO₂) sobre superficies de dióxido de titanio (TiO₂) en dos de sus fases cristalinas (rutilo y anatase), utilizando ADF y BAND, del paquete computacional “Amsterdam Modeling Suite “ (AMS), ambos bajo el formalismo de la teoría de funcionales de la densidad³. Los resultados sugieren que se trata de un proceso de quimisorción en ambas fases. El análisis de cargas atómicas tipo Hirshfeld muestra una diferencia en la transferencia de carga al realizar la adsorción del gas, siendo el rutilo donde se registró la mayor transferencia de carga a lo largo de la red cristalina. Derivado del análisis de las geometrías tomadas por el adsorbato, se entiende que esta varía respecto a la superficie expuesta y al grado de vacancias de oxígeno presentes. Además se explora el papel desempeñado por el agua y los diferentes estados de oxidación del titanio (Ti) tanto en el proceso de adsorción como en una posible fotorreacción.





Referencias:

- 1.- Shuang Zhu, Lingju Guo, Bin Zhang, Gaofeng Zhao, Tao He, A computational study on linear and bent adsorption of CO₂ on different surfaces for its photoreduction, Catalysis Today 335 (2019) 278-285
- 2.- U. Diebold: In: The Chemical Physics of Solid Surfaces, Vol. 9, ed. by D.P. Woodruff (Elsevier, Amsterdam 2001) p. 443
- 3.- <https://www.scm.com>

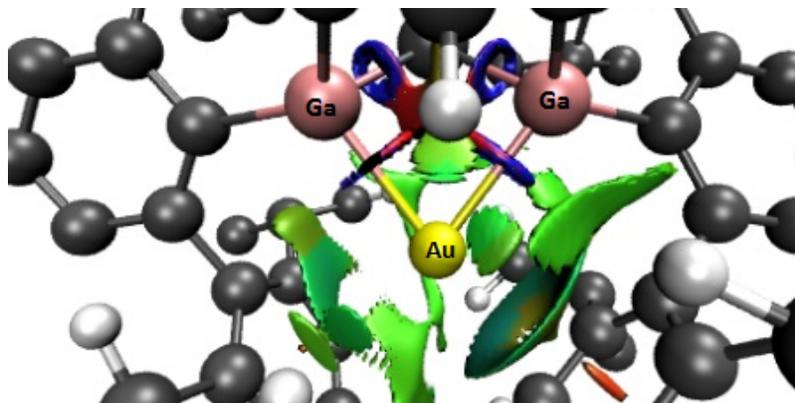


Estabilización del complejo de digalio oro(I) por medio de interacciones no covalentes

Leonardo I. Lugo-Fuentes,(A) J. Oscar C. Jimenez-Halla,(A) Rong Shang,(B) J. Barroso-Flores(C)

(A) Departamento de Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad de Guanajuato, Noria Alta s/n 36050, Guanajuato, Gto. , (B) Department of Organic Chemistry, Graduate School of Science, University of Hiroshima, 1-3-1 Kagamiyama 7398526 Higashi-Hiroshima, Japan. , (C) Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM. Car. Toluca-Atzacomulco, Km 14.5 Unidad San Cayetano, Personal de la UNAM. Toluca 50200, Estado de México, México.

Los complejos de Au(I) tienen un número de coordinación predominante de 2 y, por lo tanto, son especies de 14 electrones con geometrías lineales. La estabilidad de estos depende del ligante que previene la reducción de Au(I) a oro metálico.¹ En el presente trabajo se estudian las interacciones no covalentes (NCI) que estabilizan un complejo de Au(I) de 12 e⁻ (Figura). Se encontró que los sustituyentes dipp (2,6-diisopropil-fenilo) juegan un papel muy importante en la estabilización del complejo por dos razones: 1) dos orbitales vacantes 5p del Au interactúan con los enlaces σ_{C-C} de los anillos aromáticos laterales. Esta interacción es más fuerte que lo que se esperaría entre la nube p electrónica de los fenilos con esos orbitales del Au. 2) Por las interacciones tipo van der Waals entre enlaces σ_{C-H} de los isopropilos y el tercer orbital vacante 5p del Au. Para la caracterización de este tipo de interacciones se utilizó la teoría de Átomos en Moléculas (AIM), el análisis NBO y NCI. Se utilizó la estructura de rayos X del complejo de Au(I) y posteriormente se optimizaron únicamente las posiciones de los hidrógenos utilizando la Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT) con el funcional M05-2X en conjunto con la base LANL2TZ(f) para el átomo de Au y 6-311g(d) para el resto de los átomos.





Referencias:

1. Parish, R. V. Gold Bull. 30, 3–12 (1997).



ESTUDIO TÉORICO-COMPUTACIONAL DE LA GENTAMICINA Y SU POSIBLE RECEPTOR DE LA MEGALINA

Dulce Carolina Ruiz Ramírez, Minerva Martínez Alfaro, Juvencio Robles García

Universidad de Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas, Departamento de Farmacia, Noria Alta S/N, Col. Noria Alta, Guanajuato, Gto., C.P. 36050, México.

La Enfermedad Renal Crónica (ERC) es consecuencia de un grupo de patologías que afectan al riñón de forma crónica e irreversible, entre las que destacan la diabetes mellitus y la hipertensión arterial, además de otros factores, como la contaminación y el uso de antibióticos tóxicos como la gentamicina¹. Este fármaco inhibe la síntesis de proteínas de las bacterias gramnegativas²⁻³. Sin embargo, su uso está restringido, ya que los pacientes tratados por más de 7 días muestran signos de nefrotoxicidad⁴. Se conoce que el daño causado por la gentamicina es debido a la acumulación de este antibiótico en las células tubulares proximales. Esta acumulación es debida al receptor megalina, que es responsable de su absorción en las células tubulares proximales renales⁵. Por esta razón se busca conocer las interacciones de la gentamicina con su receptor celular, para poder así proponer un mecanismo de inhibición y evitar la acumulación del fármaco en las células renales. En este trabajo, se presenta el análisis de los descriptores globales y locales de las estructuras de la gentamicina, empleando Teoría de funcionales de la Densidad (TFD) al nivel M06-2x en fase gas y fase solvente (agua) con SMD, para estimar las variaciones en reactividad y un estudio del posible receptor, mediante el cálculo DOCKING de la gentamicina con la estructura homóloga al receptor de la megalina, obtenida mediante el método de aproximaciones⁶, ya que no se encuentra disponible la estructura cristalizada.



Referencias:

Epidemiology of chronic kidney failure in Mexico, 2010, 31, 1-27.

Gilbert D. N., Mandell G. L., Bennett J. E., Dolin R. Am. Principles and practice of infectious diseases, 2005, 328.

Avent M. L., Rogers B. A., Cheng C. A., Paterson D. L. The current use of aminoglycosides: indications, pharmacokinetics and the validity of toxicity. Int Med, 2011, 41, 441-449.

Matthew T. H. Drug-induced renal disease. Med J. Aust, 1992, 156, 724-728.

Amal A. A., Kennedy M. J., Gerk P. M. The Role of Megalin in the Transport of Gentamicin Across BeWo Cells, an In Vitro Model of the Human Placenta. The AAPS Journal, 2015, 17, 1193-1199.

Krieger, E., Nabuurs, S. B. & Vriend, G. Homology Modeling. Struct. Bioinforma, 2005, 857, 509-523.



Galleta: GPU Accelerated Library for Long ERIs Transformations with Auxiliary Basis

Alfonso Esqueda García, Juan Felipe Huan Lew Yee, Jorge Martín del Campo Ramírez

Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México

Se ha desarrollado una librería para la evaluación de las estructuras vectoriales y matriciales presentes en los códigos de estructura electrónica, que hacen uso de las Integrales de Repulsión Electrónica (ERIs) de tres centros, utilizando Unidades de Procesamiento Gráfico (GPU). Si bien ya existen aportaciones similares, con la presente implementación se pretende crear una librería específica para ERIs con base auxiliar, que sea aplicada a una amplia cantidad de metodologías, con la posibilidad de elegir entre varios métodos de evaluación. El funcionamiento de la librería se divide en tres etapas que se ejecutan dentro de la GPU. En la primer etapa se reciben de la Unidad de Procesamiento Central (CPU) los coeficientes y exponentes pertinentes, posteriormente se evalúan las ERIs en primitivas con kernels diferentes para cada tipo de integral dependiendo de su momento angular desde $(ss|s)$ hasta $(pp|p)$. En la segunda etapa, otro kernel realiza la contracción de ERIs primitivas a ERIs contraídas. En la tercer etapa, un último kernel recolecta las contribuciones de las ERIs contraídas a la estructura final que será entregada a la CPU. Las estructuras que se presentan son las matrices de Coulomb (J) y de Intercambio (K). Éstas tienen contribución en metodologías como Hartree-Fock, la Teoría de los Funcionales de la Densidad y la Teoría de Matrices Reducidas de la Densidad. La librería se incorporó al código Green, validando con cálculos la aceleración obtenida.



Referencias:

- 1 Y. Miao and K.M. Merz, *Journal of Chemical Theory and Computation* 9, 965 (2013).
- 2 Y. Miao and K.M. Merz, *Journal of Chemical Theory and Computation* 11, 1449 (2015).
- 3 J. Kalinowski, F. Wennmohs, and F. Neese, *Journal of Chemical Theory and Computation* 13, 3160 (2017).
- 4 J. Zhang, *Journal of Chemical Theory and Computation* 14, 572 (2018).



Análisis in silico de la actividad insecticida de un grupo de limonoides

Ricardo Enrique Buendía Corona, Ramsés Elías Ramírez Gutiérrez

Licenciatura en Biotecnología, Facultad de Ciencias Biológicas de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla,
Departamento de Físicomatemáticas, Facultad de Ciencias Químicas de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

La confianza en los estudios in silico ha crecido en la medida en la que permite predecir y describir procesos moleculares difícilmente evaluados de forma experimental con mayor precisión sin necesidad de perturbar la integridad de organismos vivos¹. Esta investigación busca desarrollar el modelamiento tridimensional y la simulación de acoplamiento de limonoides del anillo C-seco (LACS) como inhibidores de la ecdisona 20-monooxigenasa (E20MO) ejerciendo una acción insecticida con el objetivo de encontrar compuestos naturales específicos que logren competir contra actuales pesticidas². Para lograrlo se han optimizado 9 LACS mediante el método/conjunto base B3LYP/6-311** para encontrar el estado fundamental y la densidad de carga de los limonoides³; por otro lado, se ha utilizado la metodología de modelado por homología con búsqueda manual de plantillas y modelado en la plataforma SWISS-MODEL para predecir la estructura terciaria de la E20MO; finalmente, se realizó la simulación de acoplamiento entre biomoléculas⁴ cuyos resultados sugieren que los LACS presentan energías de afinidad (entre -6.2 a -10.8 kcal/mol) cercanas a la ecdisona (ligando natural de la E20MO), además la presencia de anillos de arilo en los sustituyentes de los limonoides mejoró la afinidad para los limonoides V y VII. Conocer la reactividad de estos limonoides y su actividad a nivel molecular permite comprender los efectos con mayor eficacia que pueden presentar nuevos productos biotecnológicos.

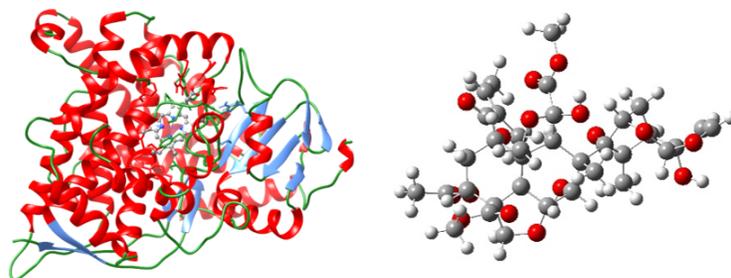


Figura1. Estructuras tridimensionales del modelado de la E20MO (izquierda) y la optimización del limonoide azadiractina (derecha).



Referencias:

1. Colquitt RB, Colquhoun DA, Thiele RH. In silico modelling of physiologic systems. *Best Pract Res Clin Anaesthesiol.* 2011;25(4):499–510.
2. Morgan ED. Azadirachtin, a scientific gold mine. *Bioorganic Med Chem.* 2009;17(12):4096–105.
3. Szabo A, Ostlund NS. *Modern Quantum Chemistry.* First ed. Vol. 35, American Journal of Physics. Mineola, N.Y.: DOVER Publications; 1996. 1097 p.
4. Scior T, Wahab HA. Structure Prediction of Proteins with Very Low Homology?: A Comprehensive Introduction and a Case Study on Aminopeptidase. In: Kaplan SP, editor. *Drug Design Research Perspectives.* 2007. p. 1–31.



Superficies de Hirshfeld y átomos en moléculas de contraiones orgánicos de decavanadato

Valeria E. Iniesta 1,2,, María Eugenia Castro 2,, Jose Manuel Perez-Aguilar 3,, Norma A. Caballero 1,, Enrique González-Vergara 2, Francisco J. Melendez 3

1 Facultad de Ciencias Biológicas. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570, Puebla, México., 2 Centro de Química, ICUAP, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570, Puebla, México , 3 Lab. de Química Teórica, Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570, Puebla, México

Los complejos que contienen al anión decavanadato $[V_{10}O_{28}]^{6-}$ y moléculas orgánicas como sus contraiones son de gran interés debido a sus propiedades moleculares como metalofármacos [1]. Muchos de estos contraiones interactúan con el ion $[V_{10}O_{28}]^{6-}$ a través de interacciones del tipo D-H...A (D: donador, A: aceptor), $\pi-\pi$ y π -stacking [1]. Por otra parte, las purinas y sus derivados son sistemas heterocíclicos con interesantes propiedades farmacológicas con actividad relevante en el proceso de proliferación celular en la progresión de cáncer [2]. En este trabajo se realiza un análisis de las superficies de Hirshfeld [3] y de los parámetros topológicos usando la teoría AIM [4] de un conjunto de purinas y sus derivados como: guanina, adenina, xantina, hipoxantina, cafeína, oxipurinol, alopurinol y ácido úrico, las cuales pueden actuar como contraiones del ion decavanadato en el diseño de nuevos metalofármacos. Hasta el momento, los resultados muestran que las interacciones H...H (10-35%), H...N (3-18%) y H...O (12%) son las más relevantes en los sistemas adenina, cafeína y ácido úrico. Una interacción no covalente de puente de hidrógeno de 0.0197 u.a. es observada en la cafeína.

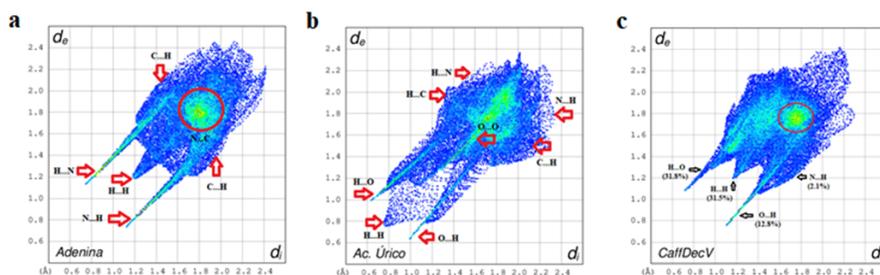


Figura 1. Gráfico fingerprint 2D; Se muestran las contribuciones más relevantes (en %) de las moléculas de adenina (a), ácido úrico (b) y cafeína (c). la distribución del gráfico está dado por la contribución de las interacciones hacia el exterior de la superficie (d_e) y hacia el interior de la superficie (d_i).



Referencias:

Sánchez-Lara E., Treviño S., Sánchez-Gaytán B.L., Sánchez-Mora E., Castro M.E., Meléndez-Bustamante F.J., González-Vergara E. (2018). *Frontiers in Chemistry*, 6:402, 1-18.

Yin J., Ren W., Huang X., Deng J., Li T., Yin Y. (2018). *Frontiers in immunology*, 9.

Spackman M A., Jayatilak, D. (2009). *CrystEngComm*, 11(1), 19-32.

Bader R.F.W. (1990). *Atoms in Molecules: A Quantum Theory* Oxford University Press, Oxford.

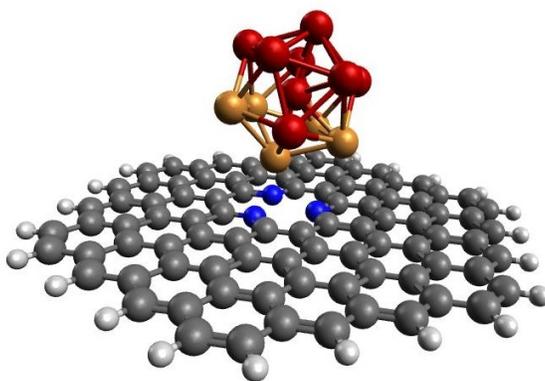


Estudio teórico de la estabilidad de cúmulos bimetálicos soportados sobre grafeno dopado

J.A. Martínez-Espinosa, H. Cruz-Martínez, E.P. Sánchez-Rodríguez, D.I. Medina

Tecnológico de Monterrey, Escuela de ingeniería y ciencias, Atizapán de Zaragoza,, Estado de México, C.P. 52926, México

Las nanopartículas bimetálicas de metales de transición 3d han mostrado desempeños promisorios para diferentes aplicaciones catalíticas [1, 2]?. Sin embargo, presentan el inconveniente que tienden a aglomerarse y por consiguiente se ve afectada su actividad catalítica [3]?. Con el fin de evitar su aglomeración es necesario el uso de materiales de soporte [4]?. Uno de los materiales que más importancia ha cobrado como soporte es el grafeno, ya que presenta alta área superficial. Sin embargo, se ha reportado que presenta una baja reactividad [5, 6]?. Por tanto, es necesario realizarle modificaciones estructurales y electrónicas con el fin de mejorar su reactividad [7–9]?. En este contexto, en este trabajo se reporta el estudio teórico de la estabilidad de cúmulos bimetálicos ($\text{Co}_{13-x}\text{Cu}_x$; $x = 1-12$) de forma icosaédrica soportados sobre grafeno dopado con nitrógeno. Todos los cálculos fueron desarrollados con la teoría de funcionales de la densidad usando la aproximación de gradiente generalizado. Se demostró que al aumentar el número de átomos de Co en los cúmulos bimetálicos de $\text{Co}_{13-x}\text{Cu}_x$ ($x = 1-12$), el momento magnético tendió a aumentar. También, se investigó que el grafeno dopado con nitrógeno es un excelente material de soporte para los cúmulos bimetálicos.





Referencias:

- R. Ferrando, J. Jellinek, R.L. Johnston, Nanoalloys: from theory to applications of alloy clusters and nanoparticles, *Chem. Rev.* 108 (2008) 845–910.
- G. Sharma, A. Kumar, S. Sharma, M. Naushad, R. Prakash, Z.A. Alothman, G. Tessema, Journal of King Saud University – Science Novel development of nanoparticles to bimetallic nanoparticles and their composites?: A review, *J. King Saud Univ. - Sci.* 31 (2019) 257–269. doi:10.1016/j.jksus.2017.06.012.
- K. Nogi, M. Naito, T. Yokoyama, Preface to the Second Edition. In *Nanoparticle Technology Handbook*, 2018.
- Y. He, C. Luan, Y. Fang, X. Feng, X. Peng, G. Yang, N. Tsubaki, Low-temperature direct conversion of methane to methanol over carbon materials supported Pd-Au nanoparticles, *Catal. Today.* (2019).
- B.G. Ghamsari, J. Tosado, M. Yamamoto, M.S. Fuhrer, S.M. Anlage, Erratum: Measuring the Complex Optical Conductivity of Graphene by Fabry-Pérot Reflectance Spectroscopy, *Sci. Rep.* 7 (2017) 40973.
- X. Xu, L.F.C. Pereira, Y. Wang, J. Wu, K. Zhang, X. Zhao, S. Bae, C.T. Bui, R. Xie, J.T.L. Thong, others, Length-dependent thermal conductivity in suspended single-layer graphene, *Nat. Commun.* 5 (2014) 3689.
- X. Zhou, W. Chu, W. Sun, Y. Zhou, Y. Xue, Enhanced interaction of nickel clusters with pyridinic-N, B) doped graphene using DFT simulation, *Comput. Theor. Chem.* 1120 (2017) 8–16.
- S. Kim, S.-H. Jhi, A first-principles study of CO dissociative adsorption on iron nanoparticles supported on doped graphene, *Solid State Commun.* 223 (2015) 50–53.
- Y.R. Wang, L.F. Wang, S.H. Ma, Role of defects in tuning the adsorption of CO over graphene-supported Co₁₃ cluster, *Appl. Surf. Sci.* (2019).



Estudio del efecto del tamaño de los iones en una DCE mediante simulación Monte Carlo.

Diana Marlén Castañeda-Bagatella 1, Santiago Alberto Flores-Román 2, José Guadalupe Ibarra Armenta 3, José María Martínez Guerrero 3.

1) Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla., 2) Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla., 3) Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, Universidad Autónoma de Sinaloa.

Se desarrolló un código C++ basado en el algoritmo Metropolis en la colectividad canónica (NVT) [1,2] empleando un modelo primitivo de electrolito. Se varía el tamaño de los iones del electrolito en presencia de una superficie con densidad de carga negativa uniforme, que emula a una superficie coloidal. De un sistema modelo, con una configuración inicial, se manipularon las partes del modelo, después de la termalización es similar a las condiciones de equilibrio del sistema real. Se almacenó la estadística: cantidad de cargas, iteraciones, pasos, temperatura, concentración, actualización, distancias de desplazamiento, permitividad dieléctrica relativa del agua, diámetro de los iones y densidad de carga superficial; en un archivo de salida; para electrolitos 1:1, 2:1 y 3:1. Se realizaron correcciones al modelo, si son esferas rígidas o no, pared cargada con la que interactúan, confinamiento de la caja, energía de interacción total entre iones y grosor de la Doble Capa Eléctrica (DCE). Para el análisis, se empleó en el programa GeoGebra y Origin. Analizando los resultados, se observó que la forma de los perfiles de concentración iónica depende de la densidad superficial de carga y tienden asintóticamente al mismo valor para alcanzar el equilibrio en el seno de la solución. La simulación muestra sensibilidad al tamaño de los iones, esto ayudará a cuantificar los efectos de la especificidad salina, fenómeno difícil de analizar por medio de las teorías analíticas. [3]



Referencias:

[1] Dezs? Boda, Kwong-Yu Chan, and Douglas Henderson (1998). Monte Carlo simulation of an ion-dipole mixture as a model of an electrical double layer. *J. Chem. Phys.* 109, 7362.

[2] Frenkel Daan (2004). *Introduction to Monte Carlo Methods*. John von Neumann Institute for Computing, Jülich, NIC Series, Vol. 23, ISBN 3-00-012641-4, pp. 29-60.

[3] Ibarra-Armenta J. G. (2012). *Simulation of electrokinetic and colloidal stability properties with the primitive model of electrolyte*. Universidad de Jaén. Servicio de Publicaciones e Intercambio Científico. SBN 978-84-8439-686-4.



Interacciones débiles vs enlaces de hidrógeno en la estabilidad del ácido 3-nitroftálico

Lorena Monterrosas-Pérez¹, Jacinto Sandoval-Lira^{2,3}, M. P. Amador-Ramírez¹, H. Flores-Segura¹, Julio M. Hernández-Pérez¹, J. M. Solano-Altamirano¹

¹Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 14 Sur y Av. San Claudio, Col. San Manuel, 72520 Puebla, México, ²Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM, Carretera Toluca-Atlacomulco Km. 14.5, Unidad San Cayetano, 50200 Toluca de Lerdo, México, ³Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, México City, 04510, México

Las interacciones intramoleculares que se presentan entre pares de electrones libres y grupos carbonilos, denominadas $n\cdots\pi$, han sido de gran interés, debido a que son consideradas interacciones de carácter débil, pero que pueden afectar la conformación e incluso la actividad de las moléculas que las poseen [1, 2]. En este trabajo, realizamos un análisis teórico sobre todos los conformeros estables del ácido 3-nitroftálico. Este compuesto tiene una variedad conformacional tan rica que nos permitió comparar diferentes efectos estabilizadores y desestabilizadores en función de algunos ángulos diedros. Realizamos cálculos a nivel MP2/cc-pVTZ con el programa GAMESS [3]. Las interacciones electrónicas se estudiaron con NBO [4-6], QTAIM [7] y NCI [8]. El ácido de estudio puede formar enlaces de hidrógeno intramoleculares, sin embargo, estos no se presentan en la estructura de mínima energía. Descubrimos que la estructura de energía más baja es el resultado de un equilibrio entre la estabilización proporcionada por una interacción doble $n\cdots\pi$, la disminución global de las repulsiones estéricas y la alteración de la deslocalización de electrones. Las contribuciones de estas entidades a la estabilidad molecular global se acoplan (es decir, todas se ven afectadas cuando se modifica una) de tal manera que se prefiere la formación de una interacción doble $n\cdots\pi$ sobre la formación de un enlace de hidrógeno moderado.



Referencias:

Bürgi HB, Dunitz JD, Shefter E (1974) Acta Crystallogr B 30 (6) 1517.

Newberry RW, Raines RT (2014) ACS Chem Biol 9 (4) 880.

Schmidt M. W., Baldrige K. K., Boatz J. A., Elbert S. T., Gordon M. S., Jensen J. H., Koseki S., Matsunaga N., Nguyen K. A., Su S., Windus T. L., Dupuis M., y Montgomery Jr J. A., Journal of Computational Chemistry 14, 1347 (1993).

Reed AE, Weinstock RB, Weinhold F (1985) J Chem Phys 83 (2) 735.

Reed AE, Weinhold F (1985) J Chem Phys 83 (4) 1736.

Foster JP, Weinhold F (1980) J Am Chem Soc 102 (24) 7211.

Bader RFW (1990) Atoms in molecules: a quantum theory (International Series of Monographs on Chemistry). Oxford University Press, Oxford.

Johnson ER, Keinan S, Mori-Sanchez P, Contreras-García J, Cohen AJ, Yang W (2010) J Am Chem Soc 132 (18) 6498.



Magnetismo en metales de transición con aproximaciones GGA y meta-GGA

Karla Botello-Mancilla, Angel Albavera-Mata, Samuel B. Trickey, José L. Gázquez, Alberto Vela

Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas, Instituto Politécnico Nacional, Av. Luis Enrique Erro SN, 07738 Ciudad de México, México., Departamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Av. Instituto Politécnico Nacional 2508, 07360 Ciudad de México, México., Quantum Theory Project, Department of Physics and Department of Chemistry, University of Florida, P.O. Box 118435, Gainesville, FL 32611-8435, USA., Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco 186, 09340 Ciudad de México, México., Departamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Av. Instituto Politécnico Nacional 2508, 07360 Ciudad de México, México.

Las aproximaciones al funcional de la densidad pueden clasificarse de acuerdo con la llamada escalera de Jacob [1]. A pesar de que la aproximación de la densidad local es precisa para el cálculo de diversas propiedades de sistemas periódicos[2-4], se mostró que para el Fe este peldaño predice un estado basal fcc no magnético y una estructura bcc ferromagnética de mayor energía [5], pero no ocurre lo mismo con las aproximaciones de gradiente generalizado [6]. Por otra parte, estudios recientes muestran que SCAN [7] sobreestima la magnetización de saturación para este metal, mientras que los funcionales híbridos globales y locales predicen estados basales incorrectos o momentos magnéticos sobreestimados para el Fe y Pd [8-10]. Por lo anterior, las propiedades magnéticas en metales de transición son una opción atractiva para evaluar el desempeño de los funcionales. En este trabajo, mostramos resultados para la magnetización de saturación en sistemas periódicos de metales de transición puros, obtenidas con aproximaciones de dos peldaños distintos de la escalera de Jacob, a saber, gradiente generalizado y meta-gradiente generalizado. Los resultados muestran que los funcionales de gradiente generalizado proporcionan valores cercanos a las referencias experimentales, mientras que algunas de las aproximaciones de meta-gradiente generalizado sobreestiman la magnetización.



Referencias:

- J. P. Perdew y K. Schmidt, en *Density Functional Theory and Its Application to Materials*, editado por V. Van Doren, C. Van Alsenov, y P. Geerlings (AIP, Melville, NY, 2001).
- R. G. Parr y W. Yang, *Density Functional Theory for Atoms and Molecules* (Oxford University Press, NY, 1989).
- E. Engel y R. M. Dreizler, *Density Functional Theory, an Advanced Course* (Springer-Verlag, Berlín, 2011).
- J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, G. I. Csonka, O. A. Vydrov, G. E. Scuseria, L. A. Constantin, X. Zhou, y K. Burke, *Phys. Rev. Lett.* 100, 136406 (2008).
- C. S. Wang, B. M. Klein, y H. Krakauer, *Phys. Rev. Lett.* 54, 1852 (1985).
- D. J. Singh, W. E. Pickett, y H. Krakauer, *Phys. Rev. B* 43, 11628 (1991).
- J. Sun, A. Ruzsinszky, y J. P. Perdew, *Phys. Rev. Lett.* 115, 036402 (2015).
- F. Tran, D. Koller, y P. Blaha, *Phys. Rev. B* 86, 134406 (2012).
- Y.-R. Jang y B. Deok-Yu, *J. Phys. Soc. Jpn.* 81, 114715 (2012).
- W. Gao, T. A. Abtey, T. Cai, Y.-Y. Sun, S. Zhang, y P. Zhang, *Solid. State Commun.* 234-235,10 (2016).

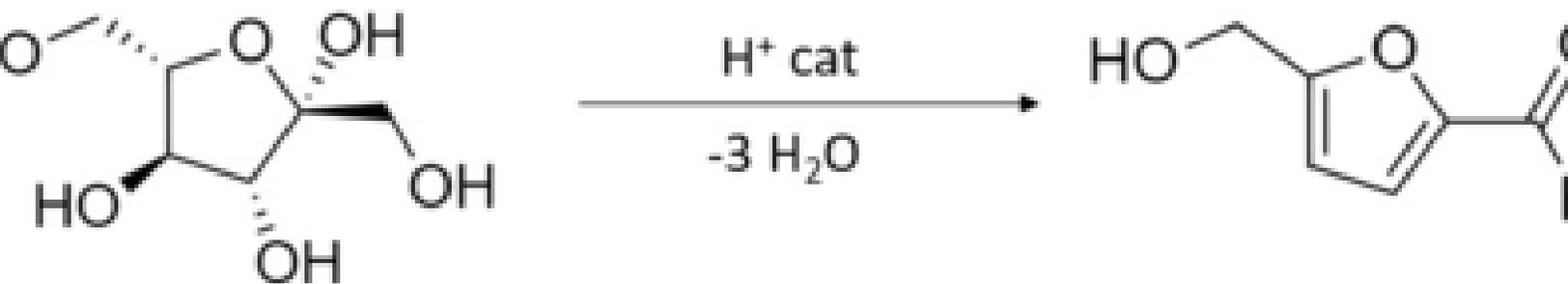


Estudio DFT sobre la síntesis de HMF a partir de la deshidratación de fructosa

Kayim Pineda-Urbina, Carlos Humberto Cervantes-Trujillo, Gabriela Concepción Cortés Quintero, Arely Yajaira García Nava, Silvia Guillermina Ceballos-Magaña, Roberto Muñiz-Valencia

Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Colima; México, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Colima; México

El petróleo se encuentra en la vida cotidiana actual, siendo la fuente de materia prima para la producción de energía y diversos productos químicos. Sin embargo, su alto consumo y la elevada contaminación ambiental derivada de su procesamiento ha llevado a la búsqueda de nuevas alternativas que satisfagan la demanda energética y material. Una propuesta es la utilización de recursos renovables como materiales de partida para la obtención de sustitutos de los derivados del petróleo; tal es el caso del hidroximetilfurfural (HMF).¹ La biomasa rica en azúcares ha sido identificada como un excelente candidato para la obtención de HMF por medio de tratamientos hidrotermales. Sin embargo, la optimización de condiciones y medios de reacción para aumentar el rendimiento de la síntesis aún presenta un área de oportunidad para trabajos futuros.² Con el propósito de maximizar el rendimiento del proceso, el presente trabajo explora diversas condiciones de reacción desde el punto de vista teórico. Se calcularán los datos termoquímicos (entalpía y energía libre de Gibbs) de la ruta de deshidratación de la fructosa hasta la obtención del HMF variando la temperatura y el solvente (implícitamente, bajo el modelo SMD), utilizando la metodología compuesta por el funcional híbrido M06-2X y el conjunto de bases de Dunning aug-cc-pVTZ.³ KPU agradece a la SEP por el apoyo a la incorporación a nuevo PTC.





Referencias:

- 1 Mukherjee, A.; Dumont, M. J.; Raghavan, V. Review: Sustainable Production of Hydroxymethylfurfural and Levulinic Acid: Challenges and Opportunities. *Biomass and Bioenergy* 2015, 72, 143–183.
- 2 Portillo-Perez, G.; Mukherjee, A.; Dumont, M. J. Insights into HMF catalysis. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry* 2019, 70, 1-34.
- 3 De Melo, F. C.; Coutinho, P. L. A.; De Souza, M. O. Synthesis of 5-Hydroxymethylfurfural from Dehydration of Fructose And Glucose Using Ionic Liquids. *Artic. J. Braz. Chem. Soc* 2014, 25 (12), 2378–2384.



Acoplamiento molecular de derivados de caespitato con UGM con actividad anti-tuberculosis.

Andrea Moreno-Ceballos^{1,3}, Norma A. Caballero², María Eugenia Castro³, Jose Manuel Perez-Aguilar¹, Liliana Mammino⁴, Francisco J. Melendez¹

¹Lab. de Química Teórica, Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570, Puebla, México, ²Facultad de Ciencias Biológicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570, Puebla, México, ³Centro de Química, ICUAP, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570, Puebla, México, ⁴Department of Chemistry, University of Venda, Private Bag X5050, Thohoyandou 0950, South Africa

La tuberculosis (TB) es una enfermedad con alta incidencia en Sudáfrica representando un problema de salud [1]. Esta enfermedad se puede tratar dependiendo de un diagnóstico eficaz y continuas revisiones. En la actualidad, el tratamiento consiste en la administración de fármacos como la isoniazida [2], rifampicina [3], etc., no obstante, la TB ha presentado farmacorresistencia ante éstos. En este sentido, el presente trabajo pretende estudiar computacionalmente una serie de compuestos acilfloroglucinol derivados del caespitato como posibles bloqueadores de la proteína UGM. El caespitato es una molécula extraída de la planta *Helicrysum caespitium*, que es utilizada por la población sudafricana como medicina alternativa para tratar la TB [4] y dicha proteína es un biocatalizador esencial implicado en la biosíntesis de la pared celular de *Mycobacterium tuberculosis*, microorganismo responsable de la TB [5]. Las estructuras de los derivados se construyeron con ayuda del programa Gaussian View [6] y se optimizaron con el método HF/6-31G(d,p). Los acoplamiento se realizaron utilizando el programa AutoDock Vina [7]. Se identificó una zona de interacción en la enzima UGM formada principalmente por los aminoácidos Arg257, Asp323 y Trp260. Las principales interacciones de la molécula propuesta son puentes de hidrógeno convencionales formados por los átomos de oxígeno 7 y 13 de la molécula y un átomo de H del aminoácido Arg257 y de N del aminoácido Trp260, respectivamente (Figura 1).

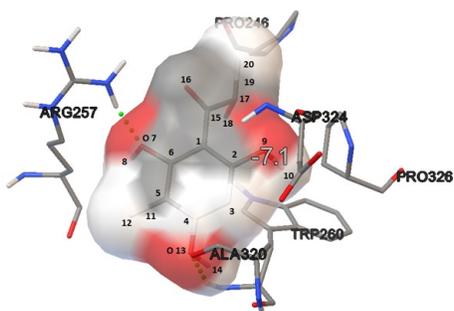


Figura 1. Acoplamiento molecular de un derivado de caespitato con la enzima UGM



Referencias:

WHO|Global tuberculosis report (2018): www.who.int/tb/publications/global_report Last visit: August 13, 2019.

Gegia M. *Lancet Infect Dis.* (2017) 17, 223–34.

Dutertre D. *EMC.* (2017) 21, 1-5.

Watt J., Breyer-Brandwijk M. *The Medicinal and Poisonous Plants of Southern and Eastern Africa.* 2nd Edition. Livingstone, London. (1962) 1457.

Villaume S. A., Fu J., N'Go I., Liang H., Lou H., Kremer L., Pan W., Vincent S. P., *Chem. Eur. J.* (2017) 23, 10423.

Dennington, R.; Keith, T. A.; Millam, J. M. *GaussView, Version 6,* Semichem Inc., Shawnee Mission, KS, (2016).

Trott O., Olson A. J., *J. Comput. Chem.* (2010) 31, 455-461.



Estudio MEDT de la reacción de cicloadición [4+2] de C₆₀ con oxo-iminas quirales

Rafael Flores Larrañaga, María Eugenia Castro, Norma A. Caballero, Jose Manuel Perez-Aguilar, Rene Gutiérrez-Pérez, Francisco J. Meléndez

Lab. de Química Teórica, Centro de Investigación. Depto. de Físicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Edif FCQ10, San Claudio y 22 Sur, Ciudad Universitaria, Col. San Manuel, Puebla, 72570, México., Centro de Química, Instituto de Ciencias, Universidad Autónoma de Puebla, Complejo de Ciencias, ICUAP, 22 Sur y San Claudio, C.P. 72570 Puebla, Puebla, México. , Facultad de Ciencias Biológicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Edif. 112, Ciudad Universitaria, Blvd. Valsequillo y Av. San Claudio s/n, Col. San Manuel, C.P 72570, Puebla, México., Lab. Síntesis de Complejos. Fac. Cs. Químicas., Universidad Autónoma de Puebla, Edif. FCQ-6, C.U. Av. San Claudio y 22 Sur, Col. San Manuel, C.P. 72592, Puebla, Pue, México

La reacción de cicloadición de Diels-Alder (4+2) del fullereno (C₆₀) con oxo-iminas quirales en posición ? [1], se estudió usando cálculos DFT en el marco de la teoría de la densidad electrónica molecular (MEDT) [2]. Los cálculos se realizaron a nivel B97D/6-311+G(d,p) [3,4] en fase gas y en disolución usando el modelo CPCM [5] para diferentes sustituyentes en las oxo-iminas. Se obtuvieron los descriptores de reactividad global y local, así como el mecanismo de la reacción para un C₆₀ funcionalizado. Se evaluó el efecto de tres disolventes sobre la barrera de activación. Los resultados muestran que la reacción en fase gas requiere de una alta energía de activación (@ 40 kcal mol⁻¹) debido al carácter aromático del C₆₀ y de una reacción fuertemente endotérmica (@ 38 kcal mol⁻¹). La asincronía en la formación (no simultánea) de los enlaces en el estado de transición sugiere que la reacción se realizó en tres fases: 1) formación de un enlace N-C, 2) formación de un enlace O-C y 3) ruptura de un enlace C-C. Los valores de reactividad global indicaron que ambas moléculas se resisten al flujo de electrones, mientras los valores de reactividad local muestran que el flujo de electrones ocurre de la imina hacia el C₆₀. Finalmente, se observó que la adición de disolvente disminuye la energía de activación en @ 2 kcal mol⁻¹ sin afectar la reactividad de las moléculas implicadas en la reacción. Los resultados demuestran el carácter no polar de esta reacción Diels-Alder.

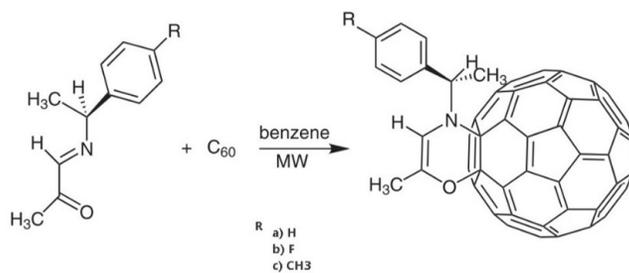


Figura 1. Reacción Diels-Alder (4+2) del fullereno con oxo-imina quiral en posición α de las moléculas propuestas por Tovar y cols. en 2006 ^[1]. Los sustituyentes empleados en la reacción DA a) hidrógeno, b) flúor y c).



Referencias:

Tovar, A., Peña, U., Hernández, G., Portillo, R., Gutiérrez, R. (2006). Microwave-Assisted Synthesis of New Adducts from the Diels-Alder [4+2]-Cycloaddition Reaction of Chiral α -Oxo Imines and β -Diimines with fullerene C60. *Synthesis*, Vol. 2007, No. 1, pp: 22-4.

Domingo, L.R. (2016). Molecular Electron Density Theory: A modern View of Reactivity in Organic Chemistry. *Molecules*, Vol. 21, No. 10, p: E1319

Grimme, S. (2006). Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction. *J. Comp. Chem.*, Vol. 27, pp: 1787-99.

Krishnan, R., Binkley, J.S., Seeger, R., Pople, J.A. (1980). Self-consistent molecular orbital methods. A basis set for correlated wave functions. *J. Chem. Phys.*, Vol. 72, pp: 650-54.

Barone, V. y Cossi, M. (1998). Quantum calculation of molecular energies and energy gradients in solution by a conductor solvent model. *J. Phys. Chem. A.*, Vol. 102, pp: 1995-2001.

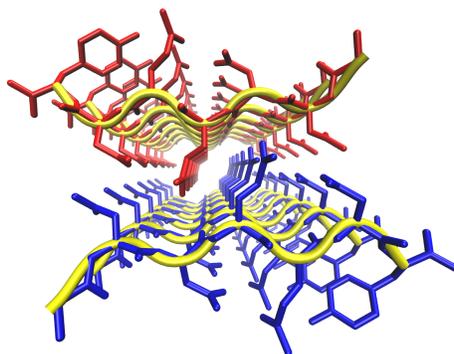


Dinámica molecular de agregados de péptidos cortos amiloides

Jorge Nochebuena, Joel Ireta, Alberto Vela

Departamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Unidad Iztapalapa

Las fibras amiloides son estructuras altamente ordenadas formadas por agregados de proteínas [1]. Los agregados comparten características en común, aunque las proteínas de las cuales provienen puede variar ampliamente. De hecho, se ha propuesto que cualquier secuencia de aminoácidos tiene el potencial de generar este tipo de estructuras. Aunque los mecanismos permanecen desconocidos, la hipótesis más aceptada sugiere un proceso de nucleación seguido de un proceso de crecimiento exponencial [2]. Sin embargo, el desarrollo de agentes terapéuticos requiere de un mejor entendimiento molecular del proceso de agregación. Así, desde hace más de una década, diversos grupos de investigación se han dedicado a estudiar péptidos cortos que provienen de proteínas relacionadas con enfermedades [3]. Estos péptidos se han utilizado para estudiar la formación de agregados con dinámica molecular. Sin embargo, los tiempos de simulación que se pueden obtener en tiempos de computo razonables, apenas logran simular la formación de oligómeros amorfos [4]. En este trabajo, estudiamos con dinámica molecular agregados fibrilares de dos péptidos que tienen secuencias muy parecidas, pero se agregan a diferentes velocidades. Los resultados indican que la secuencia GNNQQNY es más propensa a la agregación que la secuencia NNQQNY, lo cual corresponde con observaciones experimentales.





Referencias:

- [1] F. Chiti y C. M. Dobson. *Annu. Rev. Biochem.* 86 (2017).
- [2] X. Wen-Hui y W. Guang-Hong. *Chin. Phys. B* 25 (2016).
- [3] D. Eisenberg y M. Jucker. *Cell.* 16 (2012).
- [4] Zhao et al. *J. Chem. Theory Comput.* 15 (2019).

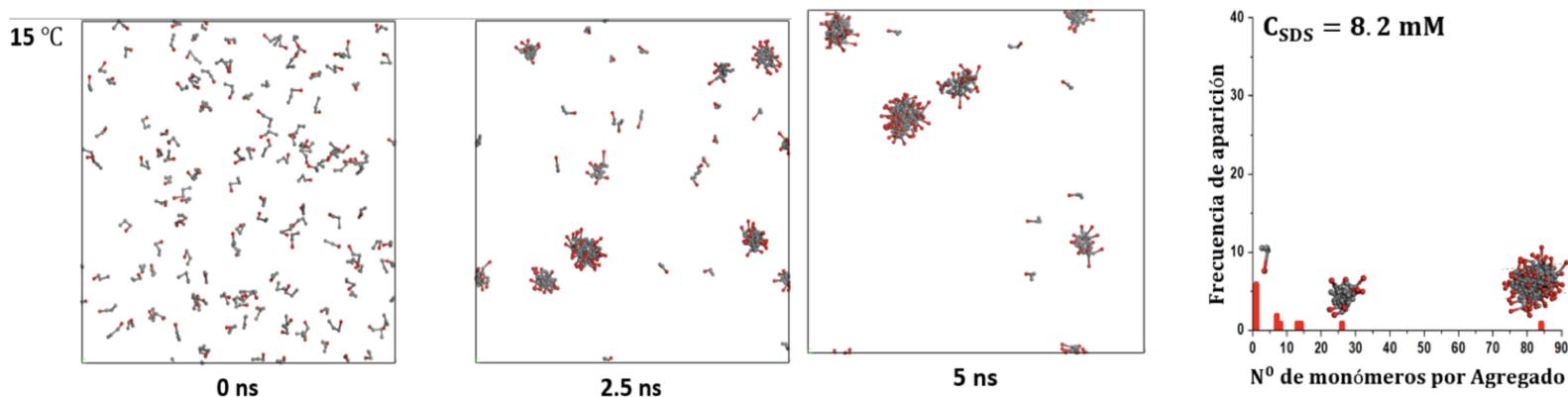


Determinación de la CMC en Agua de Dodecil Sulfato de Sodio mediante DPD

Didier Nivón Ramírez, Luis Ignacio Reyes García, Rodolfo Gómez Balderas, Raúl Oviedo Roa, José Manuel Martínez Magadán

Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán Laboratorio de Fisicoquímica Analítica, Instituto Mexicano del Petróleo

En este trabajo se calculó el valor de la concentración micelar crítica (CMC) para el surfactante Dodecil Sulfato de Sodio en disolución acuosa a 15, 20, 25, 30 y 35 °C, utilizando como metodología de cálculo la Dinámica de Partículas Disipativas (DPD). Para tal propósito se calcularon los parámetros de interacción (a_{ij}) por medio de una aproximación en el marco de la Teoría de Funcionales de la Densidad y de la teoría de mezclas de Flory-Huggins. Los valores de CMC obtenidos por este método y su comparación con los reportados por la técnica experimental de Titulación Calorimétrica Isotérmica (ITC) se muestran en la siguiente Tabla 1. A diferencia de los valores experimentales, que presentan un mínimo en la CMC con función de la temperatura, los valores calculados presentan un aumento casi lineal, que podría deberse a que los parámetros de interacción DPD no toman de manera correcta el efecto de la temperatura. Temp./°C CMC/mM (teórica) CMC/mM (experimental) 15 8.23 8.21 20 8.37 8.00 25 9.55 8.17 30 11.00 8.43 35 11.66 8.73 Tabla 1. Valores de CMC obtenidos mediante dinámicas tipo DPD para el SDS comparados con valores experimentales reportados a diferentes temperaturas





Referencias:

Flory, Paul J. (1953). *Statistical Thermodynamics of Polymer Solutions*. Cornell University Press.

Klamt A. (1995) Conductor like Screening Model for Real Solvents, *J. Phys. Chem*, 99, 2224-2235.

Robert D., Groot. (1997) Dissipative Particle Dynamics. *Phys. Rev*, 52, 1734-1742.



EFFECTOS DEL SUSTITUYENTE EN LA DISOCIACIÓN EN FASE GASEOSA DEL ÁCIDO BENZOICO

Michael A. Martínez-Sánchez, Jorge A. Amador-Balderas, Francisco J. Meléndez, Norma A. Caballero, Francisco Méndez, Ramsés E. Ramírez

Departamento de Química, División de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, México, D.F. , Departamento de Fisicomatemáticas, Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, Pue. , Departamento de Físicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, Pue.

Para el ácido benzoico sustituido, se han realizado diferentes estudios teóricos principalmente para las posiciones para- y meta-; sin embargo, la posición orto- ha recibido relativamente poca atención por parte de estos estudios [1] e incluso se carece de los datos experimentales de algunos sustituyentes en esa posición. En el presente trabajo se pretenden utilizar las acideces calculadas para la fase gaseosa junto con descriptores teóricos como la función de Fukui, el potencial electrostático (MEP) y el principio de ácidos y bases duros y blandos (HSAB) para introducir una metodología con la que se puedan medir los efectos inductivos y de resonancia para los sustituyentes en posición orto-, para- y meta. Se encontró que, para los sustituyentes electro donadores, el ácido benzoico es más susceptible a ser atacado en una posición dentro del anillo bencénico; mientras que, para los sustituyentes electro atractores, el ácido es más susceptible a ataques en el oxígeno carbonílico del grupo carboxilo. Se utilizó el programa Gaussian09 [2] para la optimización de las estructuras a un nivel de cálculo de B3LYP/6-311++G (2d,2p), y el programa gOpenMol [3] para la visualización del MEP y la FF. De igual manera, se realizó el cálculo de las funciones de Fukui condensadas para todos los átomos de cada molécula a través del cálculo de las cargas de Hirshfeld.



Referencias:

- [1] Otto Exner and Stanislav Böhm., J. Org. Chem. 2002, 67, 6320-6327.
- [2] Frish, M; Trucks, G; Scelegel, H. et al Gaussian09; Gaussian, Inc.: Wallingford CT, 2017.
- [3] <https://www.csc.fi/english/pages/gOpenMol> (sitio visitado el 9 de Julio de 2018).



Estudio teórico del enlazamiento de Cu(I) con el fragmento hIAPP(18-22)

Andrés Felipe Álvarez García, Dr. Jorge Martín del Campo Ramírez

Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM).

El polipéptido intrínsecamente desordenado hIAPP es secretado en el páncreas y está compuesto por 37 residuos. El cobre interacciona con el fragmento hIAPP(18-22), permitiendo un retraso en la formación de fibrillas de amiloide que están relacionadas con la diabetes tipo 2 (DT2). Aunque se reportan diversas estructuras de Cu(II) con hIAPP, se desconoce el entorno de coordinación para la especie reducida Cu(I). Así, la determinación de la estructura de Cu(I) con el fragmento hIAPP(18-22) sirve como punto de partida para la obtención del potencial de reducción Cu(II)-hIAPP(18-22)/Cu(I)-hIAPP(18-22), que a su vez permitiría evaluar el impacto en la generación de especies reactivas de oxígeno. En este estudio, se optimizaron diversos modos de coordinación para Cu(I) con el fragmento hIAPP(18-22) empleando la teoría de funcionales de la densidad (DFT) como se implementa en el programa de estructura electrónica Terachem, además se realizaron dinámicas moleculares a primeros principios para establecer con mayor claridad el entorno de coordinación.



Referencias:

E. Atrián-Blasco and et.al, Coordination Chemistry Reviews, 2018, 371, 38–55

L. Quintanar and et. al, Inorganic Chemistry, 2016, 55, 10727-10740

N. Fowler, C. Blanford, J. Warwicker, and S. de Visser, Chemistry - A European Journal, 2017, 23, 15436 – 15445

M. Tuckerman, J. Physics: condensed matter, 2002, 14, R1297 - R1355



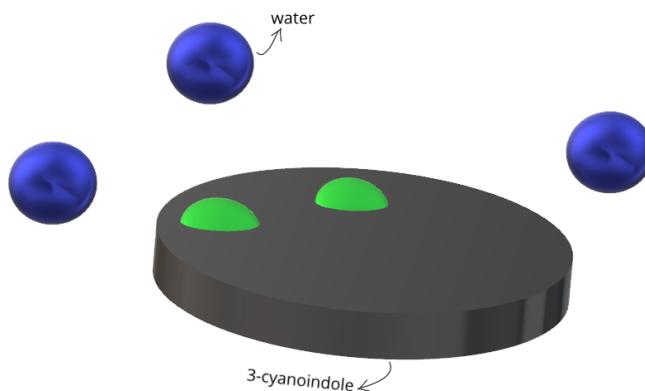
Estudio de las geometrías y tiempos de vida en el estado excitado de los cluster 3CI-H₂O

América Y. Torres-Boy (a), Leonardo Álvarez-Valtierra(a), Ramón Castañeda-Priego (a) y Michael Schmitt(b)

(a)División de Ciencias e Ingenierías, Universidad de Guanajuato-Campus León, León, Guanajuato 37150, México,

(b)Heinrich-Heine-Universität, Institut für Physikalische Chemie I, D-40225 Düsseldorf, Alemania

El 3-cianoindol (3CI) es uno de los componentes fundamentales de interés en la industria farmacéutica y médica. Además, su conformación molecular juega un papel importante en muchos problemas físicoquímicos, y desempeña un papel diverso como ligandos terapéuticos del receptor de estrógenos, inhibidores de la xantina oxidasa, agentes anticancerígenos, inhibidor de la acetil-CoA carboxilasa para la diabetes tipo 2, hepatitis Inhibidor del virus C entre otras actividades biológicas [1] El objetivo principal de este trabajo es determinar la estructura tipo racimo de agua 3CI a granel utilizando una descripción de grano grueso. 3CI es una molécula aromática plana, que puede modelarse utilizando estructuras discóticas con sitios de asociación. [2] De esta manera, tales partículas discóticas interactúan con las moléculas de agua y se estudian explícitamente las condiciones termodinámicas para la formación del complejo y su estructura correspondiente. Una vez que se obtiene la estructura primaria del complejo 3CI-agua, se puede determinar el tiempo de vida del estado excitado y compararlo con los datos experimentales disponibles [3]. Se pretende la comprensión de las interacciones inter e intramoleculares entre el agua y el 3-cianoindol para reproducir y predecir la relación entre las geometrías de los grupos, sus tiempos de vida de fluorescencia en términos de propiedades termodinámicas y explorar las posibilidades de un cúmulo de 3CI-agua más grande.





Referencias:

- [1] O. Yuen, P.Y Choy, W.K. Chow, W.T. Wong, F.Y. Kwong, *Org. Chem.* 78, 337, (2013)
- [2] Bianchi, E., Blaak, R., & Likos, C. N., *Phys. Chem. Chem. Phys.* 13(14), 6397-6410, (2011)
- [3] Schneider, M., Hebestreit, M. L., Lindic, M. M., Parsian, H., Torres-Boy, A. Y., Álvarez-Valtierra, L., & Schmitt, M. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 20(36), 23441-23452. (2018).



Validación de parámetros de potenciales clásicos para clatrato de metano

Ivan E. Romero Ramirez, Alejandro Ramirez Solís, Humberto Saint-Martin Posada

CINC-UAEM, CINC-UAEM, ICF-UNAM

Se realizaron dinámicas BOMD para el sistema metano-agua con clatratos 512 y 4115262 (Encontrada por Bravo y Saint-Martin como red estable de agua) simulando ca. 15 ps en cada caso con y sin vinilcaprolactama (VCap) como inhibidor. A continuación se realizaron dinámicas moleculares con los potenciales clásicos; TIP4P/ICE para agua y para la molécula VCap se obtuvieron del Automated topology builder utilizando las trayectorias obtenidas de simulaciones BOMD/DFT a nivel M062x/6-311G**. Se compararon las energías clásicas vs. sus contrapartes cuánticas para evaluar la calidad de los potenciales clásicos. Los resultados estructurales y energéticos revelaron una complejidad inesperada por lo que no es adecuado utilizar el sistema metano-agua/VCap para la validación de los potenciales; incluso se detectaron grandes variaciones para los sistemas más simples. Se intentó ajustar dos parámetros críticos: epsilon y sigma del potencial clásico de la molécula de metano en el modelo de átomo unido. No se encontró una tendencia global al variar uno u otro parámetro, ya que en algunos casos disminuye el error rms, en otros aumenta y en algunos otros se mantiene constante.



Referencias:

Graciela Bravo-Pérez and Humberto Saint-Martín. *Int. J. Quantum Chem.*, 112:3655–3660, 2012.

J. L. F. Abascal, E. Sanz, R. García Fernández, and C. Vega. *J. Chem. Phys.*, 122:234511, 2005.

A.K. Malde and L. Zuo. *J. Chem. Theory Comput.*, 7(12):4026, 2011.



Hipercoordinación en Complejos de Metales Alcalinos y Alcalinotérreos.

Esau Israel Álvarez Buendía, Alberto Marcial Vela Amieva

Departamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Av. Instituto Politécnico Nacional 2508, 07360, Ciudad de México, México., Departamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Av. Instituto Politécnico Nacional 2508, 07360, Ciudad de México, México.

Los recientes descubrimientos de complejos de metales alcalinotérreos octacoordinados $M(\text{CO})_8$ ($M = \text{Ca}, \text{Sr}$ o Ba) [1], nos motivaron a realizar un estudio teórico de sus análogos isoelectrónicos de metales alcalinos $M(\text{CO})_8$ ($M = \text{K}^-, \text{Rb}^-$ o Cs^-). Para determinar la participación de los orbitales d en el enlace de los complejos se llevó a cabo un análisis de composición de orbital [2], se utilizaron la partición de Mulliken, de Stout-Politzer y de Ros-Schuit, lo cual se realizó con el programa MultiWFN [3]. Se realizaron los cálculos de los complejos para la multiplicidad singulete y triplete empleando la teoría de funcionales de la densidad con el funcional de rango separado $w\text{B97XD}$ y con el conjunto de base def2TZVPP implementado en Gaussian 09 [4], esto para determinar la multiplicidad más estable. Para el anión de Rb la configuración electrónica más estable fue la del singulete, para los aniones de K y Cs fue la de triplete. Las optimizaciones de geometría de los complejos $[M(\text{CO})_8]^-$ ($M = \text{K}, \text{Rb}$ o Cs) muestra la factibilidad de que estas especies existan. El análisis de composición de orbitales muestra la participación activa de los orbitales $(n-1)d$ de los metales alcalinos en los singuletes, con contribuciones entre 10 y 35%, lo que da lugar a la hipercoordinación de estos metales formando complejos que son característicos de metales de transición. En el caso de los tripletes los tres análisis reportan participaciones de orbitales d menores al 5% en los orbitales ocupados.



Referencias:

X.Wu, L.L.Zhao, J.Y.Jin, S.D.Pan, W.Li, X.Y. Jin, G. J. Wang, M. F. Zhou, and G. Frenking, *Science* 361, 912 (2018).

Tian Lu, Feiwu Chen, Calculation of Molecular Orbital Composition, *Acta Chim. Sinica*, 69, 2393-2406 (2011).

Tian Lu, Feiwu Chen, Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer, *J. Comput. Chem.*, 33, 580-592 (2012).

Gaussian 09, Revision A.02, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, X. Li, M. Caricato, A. Marenich, J. Bloino, B. G. Janesko, R. Gomperts, B. Mennucci, H. P. Hratchian, J. V. Ortiz, A. F. Izmaylov, J. L. Sonnenberg, D. Williams-Young, F. Ding, F. Lipparini, F. Egidi, J. Goings, B. Peng, A. Petrone, T. Henderson, D. Ranasinghe, V. G. Zakrzewski, J. Gao, N. Rega, G. Zheng, W. Liang, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, K. Throssell, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, T. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, J. M. Millam, M. Klene, C. Adamo, R. Cammi, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, O. Farkas, J. B. Foresman, and D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016.



Characterizing transition metals in proteins by X-ray spectroscopy and quantum chemistry

N. Schuth, G. Palomino, E. Garay, F. Missirlis, L. Quintanar, A. Vela

Departamento de Química, Departamento de Fisiología Biofísica y Neurociencias, Centro de Investigación y Estudios Avanzados del IPN, , Av. Instituto Politécnico Nacional 2508, Col. San Pedro Zacatenco, Del. GAM C.P. 07360 CDMX

First-row transition metals (FRTM) are essential elements for life and facilitate a large variety of chemical processes with tremendous efficiencies bound as cofactors. However, the chemical reactivity of FRTMs has been linked to cell death mechanisms associated to degenerative diseases like Alzheimer's, Parkinson's and cataract disease. Maintaining metal-homeostasis suitable to efficiently harness the beneficial effects of FRTMs while diminishing the harmful side-effects is vital for any organism. Understanding the bioinorganic facets of these Janus-like characteristics is of relevance for catalytic and medical research. Synchrotron-based X-ray absorption/emission spectroscopy (XAS/XES) can yield tremendous insight into the structure and electronic configuration of FRTMs in biological samples, especially if correlated with quantum chemistry. Mexico, one of the five G20 members without a synchrotron light source, is advancing plans to construct its first. As part of this talk, previous and ongoing work showcasing the capabilities of synchrotron-based methods will be presented. Showcased work includes insight into oxygen binding in hemoproteins, water splitting in photosystem II, zinc homeostasis in fruit flies and metal-induced aggregation of human eye lens proteins from combining synchrotron-based methods with multiple scattering theory, density functional approximation and MO-based approximations. The latter is a project funded by CONACYT grant PN2076.



Referencias:

N. Schuth, S. Mebs, D. Huwald, P. Wrzolek, M. Schwalbe, A. Hemschemeier, M. Haumann; Effective intermediate spin iron in O₂-transporting heme proteins; Proc. Natl. Acad. Sci. USA 114, 8556-8561 (2017)

N. Schuth, I. Zaharieva, P. Chernev, G. Berggren, M. Anderlund, S. Styring, H. Dau, M. Haumann Ka X-Ray emission spectroscopy on the photosynthetic oxygen-evolving complex supports manganese oxidation and water binding in the S₃ state; Inorg. Chem. 57, 10424-10430 (2018)

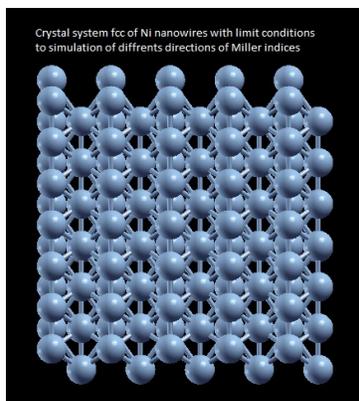


Estudio computacional ab-initio del cambio de dirección cristalina en nanoalambres de Ni

Jonathan Almazán Celis, Luis Enrique Díaz Sánchez, Oscar Fernando Olea Mejía, Joaquín De la Torre Medina

Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado México, Instituto Literario No. 100. Cp. 50000., Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Campus Morelia. Antigua Carretera a Pátzcuaro 8701. Cp. 58190

En el proceso de síntesis de nanoalambres de Ni, se presenta un fenómeno donde en la primera etapa de crecimiento existe una sección cristalina con diferentes orientaciones de cristal de manera arbitraria seguido de una segunda etapa que presenta un crecimiento puramente monocristalino con dirección preferencial con índices de Miller [220] y estructura cristalina fcc. El proyecto consiste en estudiar el cambio de dirección cristalino mediante el análisis computacional usando teoría funcional de la densidad (DFT) de primeros principios (ab-initio), usando principalmente el paquete de simulación VASP con el potencial PAW-PBE de la aproximación GGA. El análisis por simulación ab-initio se concentra en estudiar con condiciones límite definidas la interfase de la sección policristalina con diferentes direcciones de cristal y la sección monocristalina con una dirección preferencial de cristal con condiciones de un sistema infinito simulando el bulto, obteniendo los valores de la energía de enlace y distancias interatómicas en la interfase de estas dos etapas. Este trabajo tiene respaldo experimental donde el método de síntesis utilizado fue electrodeposición con variaciones de pH. Así como análisis de magnetometría de gradiente alterno (AGM), resonancia ferromagnética (FMR), difracción de rayos X (XRD) y microscopía electrónica de transmisión (TEM). Estos nanoalambres tienen relevancia en la creación de nuevos dispositivos electrónicos de alta tecnología.





Referencias:

- J. De La Torre Medina, G. Hamoir, Y. Velázquez-Galván, S. Pouget, H. Okuno, L. Vila, A. Encinas and L. Piraux, Large magnetic anisotropy enhancement in size controlled Ni nanowires electrodeposited into nanoporous alumina templates, *Nanotechnology* 27 (2016) 145702 (8pp).
- J. De La Torre Medina, L. Piraux, J. M. Olais Govea, A. Encinas, *Phys. Rev. B* 81, 144411 (2010).
- X. H. Huang, G. H. Li, G. Z. Sun, X. C. Dou, L. Li, L. X. Zheng, Initial Growth of Single-Crystalline Nanowires: From 3D Nucleation to 2D Growth, *Nanoscale Res Lett* (2010) 5:1057^a1062.
- Xue Wei Wang, Guang Tao Fei, Li Chen, Xi Jin Xu, and Li De Zhang, Orientation-Controllable Growth of Ni Nanowire Arrays with Different Diameters, *Electrochemical and Solid-State Letters*, 10 (4) E1-E3 (2007).
- J. De La Torre Medina, Magnetic Anisotropy and Dipolar Interaction in Arrays of Magnetic Nanowires. Thesis doctoral. Université catholique de Louvain.
- A. Encinas-Oropesa, M. Demand, and L. Piraux, I. Huynen, U. Ebels, Dipolar interactions in arrays of nickel nanowires studied by ferromagnetic resonance, *PHYSICAL REVIEW B*, VOLUME 63, 104415.
- L. Piraux, A. Encinas, L. Vila, S. Máté?-Temp?i, M. Máté?-Temp?i, M. Darques, F. Elhoussine, and S. Michotte, Magnetic and Superconducting Nanowires, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology* Vol. 5, 372–389, 2005.
- Ming Tan and Xinqi Chen, Growth Mechanism of Single Crystal Nanowires of fcc Metals (Ag, Cu, Ni) and hcp Metal (Co) Electrodeposited. *Journal of The Electrochemical Society*, 159 (1) K15-K20 (2012).



Estudio computacional de electrolitos usados en baterías de ion litio

Valeria García Melgarejo, Edgar Núñez Rojas, José Alejandro

Universidad Autónoma Metropolitana- Iztapalapa

En este trabajo se mejoraron los campos de fuerza del 1,2-dimetoxietano (DME), el dietil carbonato (DEC), el carbonato de etileno (EC) y el carbonato de propileno (PC). El procedimiento seguido fue el propuesto por Salas y colaboradores, en donde se relacionan parámetros del potencial intermolecular con propiedades objetivo particulares: las cargas atómicas, con la constante dieléctrica; la ϵ_{LJ} que representa la atracción entre dos átomos, con la tensión superficial y la ϵ_{LJ} que es el volumen efectivo del átomo, con la densidad del líquido. Las cargas utilizadas durante el procedimiento fueron obtenidas de un cálculo de estructura electrónica (PBE0/6-311++G**) mientras que los parámetros de Lennard-Jones (ϵ_{LJ} y σ_{LJ}) iniciales fueron los de OPLS-AA. Los campos de fuerza modificados reproducen, con errores relativos bajos, las tres propiedades objetivo mencionadas y predicen otras propiedades como la entalpía de vaporización y la viscosidad de los componentes puros y de las mezclas binarias. Se contruyó el campo de fuerza del LiPF_6 utilizando cargas parciales reducidas. Las densidades y coeficientes de autodifusión de las soluciones electrolíticas están en buen acuerdo con el dato experimental.



Referencias:

Salas, F. J.; Méndez-Maldonado, G. A.; Núñez-Rojas, E.; Aguilar-Pineda, G. E.; Domínguez, H.; Alejandre, J., Systematic Procedure To Parametrize Force Fields for Molecular Fluids. *J. Chem. Theory Comput.* 2015, 11, 683-693.



Irradiación de patrones de Moiré en bicapas de grafeno

Montserrat Navarro Espino, José Eduardo Barrios Vargas

Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química, UNAM

En 2018 el grafeno atrajo nuevamente los reflectores al presentar el fenómeno de superconductividad al apilar dos láminas de dicho material con una diferencia de 1.1° , denominado ángulo mágico, formando un patrón de Moiré [1]. A su vez, dentro de las áreas promisorias de la investigación en grafeno, la fotónica es una de las más brillantes [2]. En este trabajo estudiamos la posibilidad de irradiar las bicapas de grafeno a un ángulo mágico con luz láser polarizada, con el fin de generar brechas energéticas nunca antes caracterizadas en un superconductor. Desde una perspectiva atómico, el reto se presenta en el modelado de estas bicapas, ya que la estructura al ángulo mágico consiste de un gran número de átomos, excediendo las decenas de miles [1]; por lo que es necesario una aproximación al Hamiltoniano. El modelo de Hamiltoniano que consideramos es de tipo amarre fuerte de 10 bandas [3,4], al cual agregamos el acoplamiento con la luz mediante un potencial vector periódico. La resolución del Hamiltoniano irradiado se resolvió de forma no perturbativa utilizando la teoría de Floquet. Nuestros resultados iluminan un camino a una nueva ingeniería de bandas [5].



Referencias:

- [1] Z. Song, Z. Wang, W. Shi, G. Li, C. Fang, and B. A. Bernevig, “All magic angles in twisted bilayer graphene are topological,” *Phys. Rev. Lett.* 123, 036401 (2019).
- [2] T. Oka and H. Aoki, “Photovoltaic hall effect in graphene,” *Phys. Rev. B* 79, 081406 (2009).
- [3] S. Carr, S. Fang, Z. Zhu, and E. Kaxiras, “Exact continuum model for low-energy electronic states of twisted bilayer graphene,” *Phys. Rev. Research*, 1, 013001 (2019).
- [4] H. C. Po, L. Zou, T. Senthil, and A. Vishwanath, “Faithful tight-binding models and fragile topology of magic-angle bilayer graphene,” *Phys. Rev. B* 99, 195455 (2019).
- [5] G. E. Topp, G. Jotzu, J. W. McIver, L. Xian, A. Rubio, and M. A. Sen-terf, “Topological floquet engineering of twisted bilayer graphene,” arXiv preprint arXiv:1906.12135 (2019).

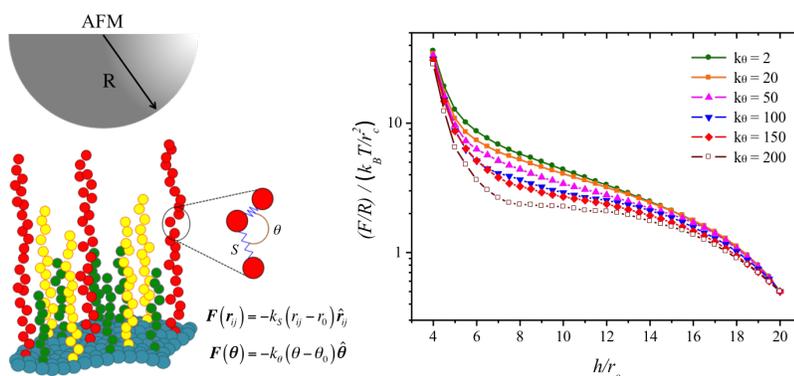


Simulación computacional de cepillos biológicos

Salomón de Jesús Alas Guardado, José Saúl Hernández Frago, Armando Gama Goicochea

Departamento de Ciencias Naturales, UAM Cuajimalpa, Ciudad de México, México, División de Ingeniería Química y Bioquímica, TESE, Ecatepec, Estado de México, México

El conjunto de microvellosidades, microcrestas y cilios forman cepillos biológicos en la superficie de algunas células epiteliales, por ejemplo, la de las células cancerosas del cérvix. Estas células tienen diferencias morfológicas y mecánicas que han sido descritas por medio de técnicas microscópicas, como: SEM, TEM, etc. Además, sus propiedades mecánicas han sido caracterizadas mediante AFM, y resultan ser diferentes a las células normales. A la fecha, también se sabe que las células cancerosas del cérvix aumentan su rigidez conforme avanza la lesión precancerosa, pero la contribución de esta dureza y de otros factores a nivel molecular aún no están explicadas. Recientemente, se ha logrado reproducir de forma cualitativa el comportamiento mecánico de los cepillos de las células normales y cancerosas, como lo hace el AFM, por medio de DPD. En este trabajo, utilizando DPD se modelan los cepillos de células cancerosas y se incluye la longitud de persistencia, la dureza de la superficie celular, la punta del AFM y el medio acuoso. Los resultados obtenidos muestran que cuando la longitud de persistencia de los cepillos aumenta, la fuerza de oposición de estos disminuye con respecto a la punta del AFM. Se ha determinado que el aumento en esta fuerza se debe a que incrementa el desorden del solvente (aumento de entropía), ocasionando que el parámetro de orden orientacional (orden nemático) de los cepillos aumenta a medida que incrementa la longitud de persistencia.





Referencias:

Iyer, S., Gaikwad, R. M., Subba-Rao, V., Woodworth, C. D., Sokolov, I. Nature Nanotech. 4, 389–393 (2009).

Gama Goicochea, A., Alas Guardado, S. J. Sci. Rep. 5, 13218 (2015).?

Groot, R. D., Warren, P. B. J. Chem. Phys. 107 (11), 4423-4435 (1997).

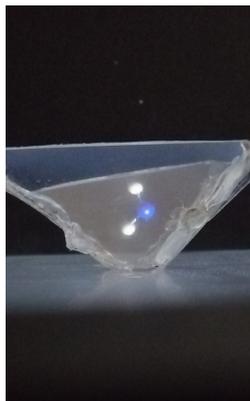


Hologramas moleculares

Sergio Franco, José Alfredo Flores Ramos, Roberto Flores-Moreno

Universidad de Guadalajara, Departamento de Química

Se describe el desarrollo de librerías en la interfaz gráfica del software Nagual [1] para la proyección holográfica de moléculas. Mediante el programa se consigue crear una imagen de cualquier molécula de interés. El programa se ha modificado para que la visualización de la molécula sea mediante un instrumento óptico que consta de un arreglo de 4 trapecios de un material reflejante, con lo cual se consigue un efecto visual tipo holograma. Además de lo atractivo que resulta para motivar a los estudiantes/espectadores, permite una mejor apreciación de algunas características moleculares, tales como la simetría, orbitales entre otras. En el cartel se describe el procedimiento y se da una demostración del resultado del holograma.





Referencias:

1. R. Flores-Moreno, J. A. Guerrero-Cruz, A. Venegas-Reynoso, H. N. Gonzalez-Ramirez, J. J. Villalobos-Castro, T. Tamayo-Mendoza, M. A. Diaz-Tinoco, J. A. Flores-Ramos, B. A. Zuniga-Gutierrez, M. U. Delgado-Jaime, J. F. H. Lew-Yee, J. M. del Campo, Nagual 1, Guadalajara Jal., Mexico (2019)



Nanomateriales basados en dendrímtero para el transporte del cisplatino

María Fernanda Padilla Mercado. Unidad Académica de Ciencias Químicas. Universidad Autónoma de Zacatecas (UACQ-UAZ). Zacatecas, México., Ma del Refugio Cuevas Flores. Unidad Académica de Ciencias Químicas. Universidad Autónoma de Zacatecas (UACQ-UAZ). Zacatecas, México., Marco Antonio García Revilla. Departamento de Química, Universidad de Guanajuato, (UGto) Guanajuato, México.

Marco Antonio García Revilla. Departamento de Química, Universidad de Guanajuato, (UGto) Guanajuato, México.

Los nanomateriales que se utilizan como acarreadores de fármacos proporcionan una vía óptima para dirigir un fármaco a la diana biológica y mejorar la biodisponibilidad. Los dendrímeros son un tipo de polímero hiperramificado que crece radialmente, dejando huecos capaces de albergar pequeñas moléculas, y tiene una cantidad considerable de grupos funcionales en su última rama susceptibles de ser funcionalizados, tanto con moléculas como con fármacos. El cis-diaminocloroplatino, constituye el primer compuesto metálico introducido en terapias antitumorales de forma global. Sin embargo, es necesario reducir los efectos secundarios asociados al tratamiento con cisplatino, tales como nefrotoxicidad y ototoxicidad, que limitan las dosis administrables del fármaco y los problemas de resistencia intrínseca o adquirida en ciertos tumores. Con la finalidad de disminuir los efectos adversos se realizó un estudio para determinar la energía de interacción entre cisplatino y dendrímeros de poliamidoamina PAMAM de generación 1 y 2. Se sabe que PAMAM cambia su conformación en función del pH del medio, por lo tanto, esta característica podría proporcionar una estrategia para la carga y descarga del fármaco. Se llevó a cabo un estudio de dinámica molecular dentro del dendrímtero PAMAM a distintos pH's, utilizando el campo de fuerzas AMBER implementado en GROMACS, se llevó a cabo el acoplamiento de 23 y 22 kcal mol⁻¹ en medio básico. El PAMAM puede ser un vector para carga y descarga del fármaco.



Referencias:

Thomas Goudoulas. Polymers and Biopolymers as Drug Delivery Systems in Nanomedicine, volume 2. 07 2012.

Timothy C. Johnstone, Kogularamanan Suntharalingam, and Stephen J. Lippard. The next generation of platinum drugs: Targeted $pt(ii)$ agents, nanoparticle delivery, and $pt(iv)$ prodrugs. *Chemical Reviews*, 116(5):3436–3486, 2016.

Yi Liu, Vyacheslav S. Bryantsev, Mamadou S. Diallo, and William A. Goddard III. Pamam dendrimers undergo ph responsive conformational changes without swelling. *Journal of the American Chemical Society*, 131(8):2798–2799, 2009.

Raviprasad Aduri, Brian T. Psciuk, Pirro Saro, Hariprakash Taniga, H. Bernhard Schlegel, and John SantaLucia. Amber force field parameters for the naturally occurring modified nucleosides in rna. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 3(4):1464–1475, 2007.

Van Der Spoel David, Lindahl Erik, Hess Berk, Groenhof Gerrit, Mark Alan E., and Berendsen Herman J. C. Gromacs: Fast, flexible, and free. *Journal of Computational Chemistry*, 26(16):1701–1718, 2005.



Análisis de la interacción de taurina en la dimerización de α / β -tubulinas

Viridiana Vargas-Castro, Bertha Alicia León-Chávez, José Ramón Eguibar-Cuenca, Juan Manuel Solano-Altamirano

Posgrado en Ciencias Químicas, BUAP, Facultad de Ciencias Químicas, BUAP, Instituto de Fisiología, BUAP, Facultad de Ciencias Químicas, BUAP

Las enfermedades hipo-desmielinizantes deterioran las habilidades sensorimotoras de los pacientes, y son consecuencia de una pérdida progresiva de mielina en los axones neuronales. Algunas de éstas derivan de mutaciones en los genes que codifican para las proteínas del citoesqueleto, de entre las que destaca la β -tubulina de los microtúbulos [1]. El ensamble y el desensamble de los microtúbulos (inestabilidad dinámica microtubular) es un evento regulado y varía en respuesta a las necesidades de la célula. Alteraciones en este equilibrio afectan los procesos celulares de proliferación celular y el transporte de ARNm y proteínas (como la mielina). Sobre un modelo animal, la rata taiep [2], Duncan et al. reportaron una mutación en el gen *Tubb4a*, que genera una β -tubulina deficiente [3]. Se cree que esta mutación afecta la inestabilidad dinámica microtubular [3]. Esto genera que los microtúbulos se acumulen cerca del retículo endoplásmico y que impidan el transporte de proteínas, efecto que se observa en los oligodendrocitos (células productoras de mielina). Por otra parte se sugiere a la taurina como tratamiento para la esclerosis múltiple, aunque el mecanismo molecular de acción se desconoce. En este trabajo se evalúa la interacción directa de la taurina con las α y β tubulinas que conforman los microtúbulos a través de modelado por homología de los dímeros de α / β -tubulina mutados y sin mutar (SCWRL4), y acoplamiento molecular (docking) en sitios activos (Autodock 4.2.6).



Referencias:

- [1] Duncan, I. D.; Radcliff, A. B. Inherited and Acquired Disorders of Myelin: The Underlying Myelin Pathology. *Experimental Neurology* 2016, 283, 452–475.
- [2] Holmgren, B.; Urbá-Holmgren, R.; Riboni, L.; & Vega-SaenzdeMiera, E. C. Sprague Dawley rat mutant with tremor, ataxia, tonic immobility episodes, epilepsy and paralysis. *Lab Anim Sci* 1989, 39 (1), 226-228
- [3] Duncan, I. D.; Bugiani, M.; Radcliff, A. B.; Moran, J. J.; Lopez-Anido, C.; Duong, P.; August, B. K.; Wolf, N. I.; Knaap, M. S. V. D.; Svaren, J. A Mutation in the *Tubb4a* Gene Leads to Microtubule Accumulation with Hypomyelination and Demyelination. *Annals of Neurology* 2017, 81 (5), 690–702.

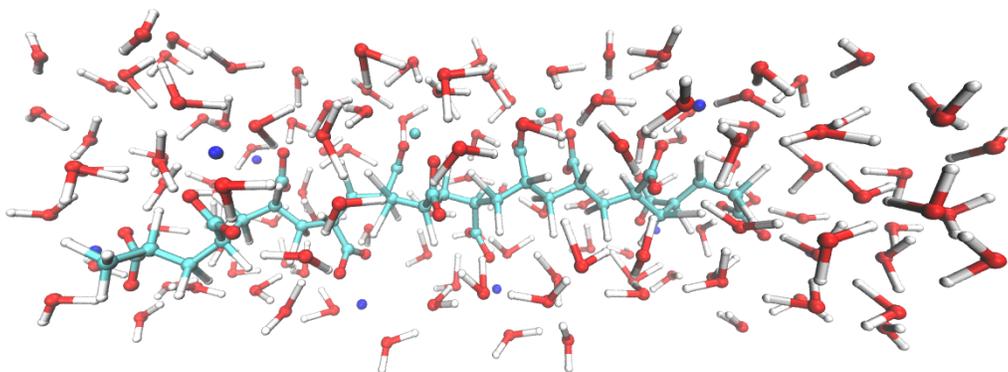


Estudio computacional de las interacciones metálicas en una membrana modificada de polipro

Brandon Meza González-1, Rosa María Gómez Espinosa-2, Fernando Cortés Guzmán-1

1. Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Química, Ciudad Universitaria, Ciudad de México, 04510 México,
2. Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM, Carretera Toluca-Atlaconulco Km. 14.5, Toluca, México

La contaminación por metales pesados es un problema mundial. Recientemente se ha encontrado que el acrilato de sodio es capaz de coordinar con metales, por lo tanto, en este trabajo se propone un modelo computacional de una membrana de polipropileno modificada con acrilato y se estudian las propiedades electrónicas comparándose con datos experimentales obtenidos por nuestro grupo. Para encontrar puntos estacionarios en la superficie de energía potencial de la membrana y sus complejos con cationes divalentes de plomo, cobre y cadmio se realizaron cálculos de dinámica molecular Born-Oppenheimer. Como nivel de teoría se empleó PBE-D3/DZVP-MOLOPT-SR-GTH mediante el código CP2K 6.1. Se estudió la esfera de coordinación de uno y dos cationes sobre oligómeros de 6, 12 y 36 unidades de acrilato. El análisis de las trayectorias nos permitió identificar mínimos locales que se optimizaron posteriormente a nivel M06-2X/LANLDZ con Gaussian 16. Para los tres cationes, las geometrías más estables muestran interacciones con hasta 4 grupos carboxilatos mediante π en el estado de espín más bajo posible. Los cambios en la energía libre del proceso de coordinación muestran una tendencia similar a la eficiencia experimental de remoción que se observa en una membrana con 29.4% de grado de injerto, indicando que el modelo propuesto es capaz de describir las interacciones entre los metales y la matriz polimérica con un bajo grado de modificación.





Referencias:

K. M. Seema, B. B. Mamba, J. Njuguna, R. Z. Bakhtizin, and A. K. Mishra. Removal of lead(II) from aqueous waste using (CD-PCL-TiO₂) bio-nanocomposites. *International Journal of Biological Macromolecules*, 109:136-142, 2018.

El Sayed A. Hegazy, H. A. Abd El-Rehim, and H. A. Shawky. Investigations and characterization of radiation grafted copolymers for possible practical use in waste water treatment. *Radiation Physics and Chemistry*, 57(1):85-95, 2000.

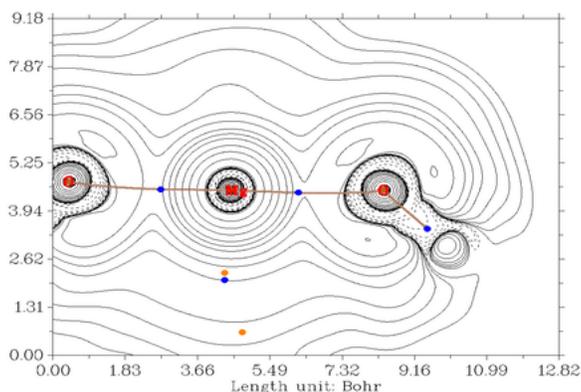


Cumulos Mg-O en la estructura de estado sólido del valproato de magnesio

Serafin Jiménez-Apolinar, Horacio Reyes-Pérez, Joanatan M. Bautista-Renedo, Nelly González-Rivas

Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM, División de Ingeniería Química, Tecnológico de Estudios Superiores de Jocotitlán

La sal de magnesio del ácido valproico conocida como valproato de magnesio ($C_{16}H_{30}MgO_4$), es ampliamente utilizada para el tratamiento de la epilepsia, trastornos bipolares y dolores de cabeza por migraña. A pesar de su gran interés como fármaco, son escasos los estudios experimentales y teóricos que profundicen en la naturaleza electrónica del mismo. En el presente trabajo se analiza la estructura cristalina del valproato de magnesio, obtenida por difracción de Rayos-X. La cual presenta centros de magnesio hexacoordinados con diversos arreglos espaciales. Los diferentes centros de coordinación presentes en el valproato de magnesio fueron estudiados bajo el marco de la Teoría de Funcionales de la Densidad (TFD) utilizando el método B3LYP/def2-SVP implementado en NWChem 6.5. De manera adicional, se caracterizaron las interacciones ligando-Mg mediante descriptores topológicos, como la teoría de Átomos en Moléculas y el Laplaciano de la Densidad Electrónica, y energéticos como los modos normales de vibración ν_{Mg-O}





Referencias:

Matta F. C., Boyd J. R.: The Quantum Theory of Atoms In Molecules; Wiley-VHC, Weinheim, 2007

Kumar C. P.: Chemical Reactivity Theory; CRC Press; Boca Raton 2009

Vinod K. P. S. et. al. ader's Theory of Atoms in Molecules (AIM) and its Applicatios to Chemical Bonding; J. Chem. Sci. 2016



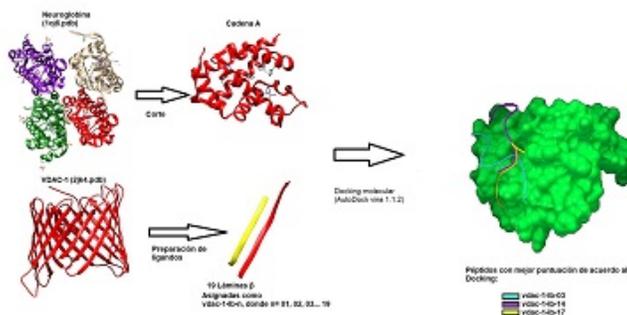
Acoplamiento molecular e interacción peptídica entre Neuroglobina y VDAC-1

Gerardo Bravo-Villegas, Nelly González-Rivas, Eugenio Torres-García, Patricia Vieyra-Reyes*

Facultad de Medicina - UAEMéx, Facultad de Química - UAEMéx

La neuroglobina (NGB) es una hemoproteína globular con peso molecular de 17 kDa [1-3]. Ensayos de coimmunoprecipitación identificaron la interacción entre NGB y el canal aniónico dependiente de voltaje tipo 1 (VDAC-1) formado por una estructura de β -barril con 19 láminas [1,4,5]. A través de análisis bioinformático, Guidolín et al. describen la interacción del complejo NGB-VDAC-1 [5]. En el presente proyecto se estudia el acoplamiento molecular para la interacción de la NGB con las láminas β de VDAC-1. El objetivo es seleccionar el fragmento peptídico que teóricamente presente características favorables de afinidad y especificidad para el diseño de un ligando dirigido a dicha hemoproteína. Las estructuras moleculares fueron obtenidas en formato pdb (Protein Data Bank, disponible en <http://www.rcsb.org/>) NGB (1oj6) y VDAC-1 (2jk4). Los cálculos del docking molecular se realizaron utilizando el software AutoDock vina 1.1.2, se configuró a NGB como macromolécula, VDAC-1 se editó en el software Chimera 1.13.1 extrayendo cada lámina beta y renombrándose como “vdac-1-lb-n”, (n=01, 02, 03... 19) para emplearlas como ligandos. Tras la ejecución del docking con las 19 láminas beta de VDAC-1 se seleccionaron los péptidos que su mejor puntuación presentara interacción en la región más externa de NGB excluyendo la cavidad del grupo hemo, se seleccionaron los ligandos vdac-1-lb-03, 14 y 17, quienes mostraron características potenciales para el diseño del péptido buscado.

Acoplamiento molecular de péptidos de VDAC-1 con neuroglobina





Referencias:

1. Ascenzi, P., di Masi, A., Leboffe, L., Fiochetti, M., Nuzzo, M. T., Brunori, M., & Marino, M. (2016). Neuroglobin: From structure to function in health and disease. *Molecular Aspects of Medicine*, 52, 1–48.
2. Burmester, T., & Hankeln, T. (2004). Neuroglobin: A Respiratory Protein of the Nervous System. *Physiology*, 19(3), 110–113.
3. Burmester, T., Welch, B., Reinhardt, S., & Hankeln, T. (2000). A vertebrate globin expressed in the brain. *Nature*, 407, 520–523.
4. Dewilde, S., Kiger, L., Burmester, T., Hankeln, T., Baudin-Creuzat, V., Aerts, T., ... Moens, L. (2001). Biochemical characterization and ligand binding properties of neuroglobin, a novel member of the globin family. *The Journal of Biological Chemistry*, 276(42), 38949–38955.
5. Guidolin, D., Agnati, L. F., Tortorella, C., Marcoli, M., Maura, G., Albertin, G., & Fuxe, K. (2014). Neuroglobin as a regulator of mitochondrial-dependent apoptosis: A bioinformatics analysis. *International Journal of Molecular Medicine*, 33(1), 111–116.



Estudio de la migración de agua y iones en una membrana de nafión en baterías de flujo

Guillermo Leuman Rodríguez Segura, Dulce Consuelo Guzmán Ocampo, Carlos Amador Bedolla, Laura Domínguez Dueñas

Universidad Nacional Autónoma de México

En los últimos años se ha dado un mayor seguimiento a la investigación del uso de energías renovables, esto debido al incremento de la demanda energética y a la búsqueda de disminuir el daño ecológico producido por el uso de combustibles fósiles. La más grande limitación en el empleo de las energías renovables es su almacenamiento, ya que la energía se obtiene en condiciones específicas. Con la finalidad de poder emplear las energías renovables conforme la demanda energética, el empleo de baterías ha surgido como uno de los métodos de almacenamiento más importantes. Las baterías de flujo consisten en un sistema de reacciones redox en el que la disolución donde ocurre la reducción (catolito) es separada de la disolución donde ocurre la oxidación (anolito) por una membrana que permite una transferencia selectiva de iones. La principal ventaja de este tipo de baterías es que la capacidad de almacenamiento de energía está directamente relacionada con la capacidad de almacenamiento de los electrolitos. Debido a esto, se puede almacenar una gran cantidad de energía. En este trabajo, nos enfocamos en el estudio computacional de la transferencia de aguas y iones a través de una membrana de nafión empleando herramientas de la dinámica molecular clásica; con el fin de determinar diferentes factores fisicoquímicos que puedan afectar sus propiedades.



Referencias:

Yang, X.-B., Zhao, L., Sui, X.-L., Meng, L.-H., & Wang, Z.-B. (2019). Phosphotungstic acid immobilized nanofibers-Nafion composite membrane with low vanadium permeability and high selectivity for vanadium redox flow battery. *Journal of Colloid and Interface Science*, doi: 10.1016/j.jcis.2019.02.001.

Mabuchi, T., & Tokumasu, T. (2014). Effect of bound state of water on hydronium ion mobility in hydrated Nafion using molecular dynamics simulations. *The Journal of Chemical Physics*, 141(10), 104904. doi:10.1063/1.4894813.

Akbari, S., Hamed Mosavian, M. T., Moosavi, F., & Ahmadpour, A. (2019). Atomistic simulation of proton transfer ability of Isopoly acid (IPA)/Heteropoly acid (HPA) doped Nafion® 117 for high-temperature fuel cell applications. *Composites Part B: Engineering*, 161, 402–410. doi: 10.1016/j.compositesb.2018.12.125.



Obtención de la función de onda de biomacromoléculas utilizando ELMO

Lillian G. Ramírez-Palma 1,2, Rodrigo Galindo-Murillo 3, Alessandro Genoni 4, Fernando Cortés-Guzmán 1,2

1 Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Av. Universidad 3000, C.U., Ciudad de México, México.,
2 Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEMéx-UNAM, Carretera Toluca-Atlaconulco km 14.5,
Toluca, México., 3 College of Pharmacy, University of Utah, Skaggs Hall 201, Salt Lake City, UT 84112, United States., 4
Université of Lorraine, Laboratoire SRSMC, UMR 7565, Vandoeuvre-lés-Nancy, F-54506, France.

El desarrollo de nuevas herramientas computacionales ha permitido soportar indicios experimentales de interacciones entre ligantes y sistemas biológicos. Aquí proponemos una nueva herramienta metodológica que permite el estudio de los cambios en propiedades atómicas derivadas de la densidad electrónica, haciendo uso de la Teoría de Funcionales de la Densidad, la Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas¹ y la obtención de Orbitales Moleculares Extremadamente Localizados (ELMO, por sus siglas en inglés)² durante una Dinámica Molecular para la interacción de una cadena de ADN, conformada por 18 pares de bases, y un complejo de cobre II^{3,4}; reduciendo considerablemente el tiempo de cómputo.



Referencias:

- 1 Bader, R. F. W. Atoms in Molecules: A Quantum Theory. Oxford University Press, Oxford, 1990.
- 2 Sironi, M.; Genoni, A.; Civera, M.; Pieraccini, S.; Ghitti, M. Theor. Chem. Acc. 2007, 117, 685.
- 3 Ruiz Azuara, L. Process to obtain new mixed copper aminoacidate complexes from phenylatephenanthroline to be used as anticancerigenic agents. RE 35,458, 1992.
- 4 Galindo-Murillo, R.; Ruíz-Azuara, L.; Moreno-Esparza, R.; Cortés-Guzmán, F. Phys. Chem. Chem. Phys. 2012, 14, 15539.



Estudio de complejos organometálicos con cobre y su actividad como posibles fotosensores

Lisset Noriega¹, María Eugenia Castro², Jose Manuel Perez-Aguilar¹, Norma A. Caballero³, Enrique González-Vergara², Francisco J. Melendez¹

¹Lab. de Química Teórica, Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570, Puebla, México, ²Centro de Química, Instituto de Ciencias, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570, Puebla, México, ³Facultad de Ciencias Biológicas. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570, Puebla, México.

La fotodinámica (PDT), es una terapia utilizada como antimicrobiano y antitumoral que necesita de una molécula conocida como fotosensor (PS) que actúa transfiriendo energía al oxígeno molecular cuando es irradiado con luz visible [1]. En la PDT existen dos tipos de procesos fotoquímicos, el tipo I y II, en los cuales está involucrada la interacción con el oxígeno molecular [2]. En los últimos años, complejos con metales de transición como el cobre con ligandos orgánicos, han ganado interés biológico debido a que el Cu puede regularse y eliminarse de manera natural en los sistemas biológicos [3]. En este trabajo se estudian las propiedades fotoquímicas de complejos de Cu(II) con diferentes ligandos de importancia farmacológica tales como metformina, glicina, piridina-imidazol y bipyridina con el fin de conocer y predecir su estabilidad y reactividad química, así como su actividad como posibles PS, además del tipo de reacción que pueden llevar a cabo en la PDT utilizando las metodologías basadas en DFT y TD-DFT con diferentes funcionales. El funcional B3PW91 con las bases 6311++G**/LANL2DZ es el que mejor predice la geometría de estos complejos. Del análisis de poblaciones se observa que los orbitales 3d del Cu están casi llenos, lo que sugiere transferencia de carga por parte de los átomos que forman parte de la esfera de coordinación y, por lo tanto, transferencias de carga de ligando a metal en las transiciones electrónicas.



Referencias:

Civantos, F.J.;Karakullukcu, B.; Biel, M. Adv. Ther. 2018, 35, 324-340.

Mascio, P.D.; Martinez, G.R., Miyamoto, S.; Ronsein, G.E.; Medeiros, M.H.G.,; Cadet, J. Chem. Rev. 2019, 119(3), 2043-2086.

Chanu, S.B.; Banerjee, S.; Roy, M. Eur. J. Med. Chem. 2017, 125, 816-824.



Formación de cristales en forma laminar a través del autoensamblaje de dipéptidos.

Norma E. González Díaz, Roberto López Rendón, Joel Ireta Moreno

Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de México; Toluca Estado de México, Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. México D.F., México.

Fragmentos peptídicos hidrofóbicos se agregan formando cristales mediante un proceso de autoensamblaje molecular dirigidos a través de una serie de fuerzas atractivas y repulsivas [1, 2]. En este trabajo se presenta el estudio de 6 dipéptidos capaces de autoensamblarse formando estructuras laminares con interesantes propiedades químicas y físicas convirtiéndolos en candidatos ideales para el desarrollo de nanodispositivos de almacenamiento de energía, suministro de medicamentos y sensores electromecánicos [3]. Mediante un análisis energético observamos que la formación de láminas sigue rutas diferentes de ensamblaje, incluso si se trata de el mismo dipéptido solo intercambiando el orden de los aminoácidos que lo componen. También se presenta un análisis energético sobre estos cristales en presencia de solventes para comprender el papel que juegan estas moléculas durante el proceso de cristalización. A partir del análisis estructural de los cristales se deriva la hipótesis sobre el rol que juegan los extremos N-terminal y C-terminal en el autoensamblaje de los dipéptidos. Los cálculos se realizaron en el marco de la teoría de los funcionales de la densidad bajo la formulación de Kohn-Sham y condiciones periódicas. Se usaron pseudopotenciales para describir la interacción núcleo-electrón, ondas planas para desarrollar los orbitales de Kohn-Sham y la aproximación al funcional de intercambio y correlación propuesta por Perdew-Burke-Ernzerhof.



Referencias:

[1] G. M. Whitesides and B. Grzybowski, “Self-assembly at all scales,” *Science*, vol. 295, no. 5564,

pp. 2418–2421, 2002.

[2] G. Demirel and F. Buyukserin, “Surface-induced self-assembly of dipeptides onto nanotextured

surfaces,” *Langmuir*, vol. 27, no. 20, pp. 12533–12538, 2011.

[3] S. Zhang, “Fabrication of novel biomaterials through molecular self-assembly,” *Nature biotech-*

nology, vol. 21, no. 10, p. 1171, 2003.



El rol de la topología de espín en interacciones metal-ligante

David Ramírez-Palma [1], Fernando Cortés-Guzmán [1,2]

[1] Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Universidad 300, Ciudad Universitaria, Ciudad de México, 04510, México., [2] Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM, Carretera Toluca-Atlacomulco km 14.5 San Cayetano, Piedras Negras, 50200, Toluca, Estado de México, México

En este trabajo presentamos un análisis topológico sistemático de la densidad electrónica y sus componentes de espín \uparrow y \downarrow en complejos hexa-acuo de metales de la primera serie del bloque d con la finalidad de entender el rol que desempeña cada una de estas densidades en las interacciones metal-ligantes. Empleando la Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas se realizó un estudio detallado de la polarización de carga en la capa de valencia del centro metálico. Además, esta teoría nos permite obtener las contribuciones energéticas de espín con la finalidad de entender consecuencias energéticas en fenómenos de transferencia de carga. De esta manera, fue posible obtener una relación que describe al potencial estándar de reducción como una repulsión originada por las capas de valencia \uparrow y \downarrow . Todos los resultados obtenidos se tratan de una extensión a las ideas propuestas por Linnett y Gillespie a las estructuras para metales de transición.



Referencias:

Linnett, J W. 1961. A Modification of the Lewis-Langmuir Octet Rule. *Journal of the American Chemical Society* 83: 2643–2653. doi:10.1021/ja01473a011

Gillespie, Ronald J. 1992. The VSEPR model revisited. *Chem. Soc. Rev.* 21: 59. doi:10.1039/cs9922100059

Popelier, P. 2000. On the full topology of the Laplacian of the electron density. *Coordination chemistry reviews* 197: 169–189. doi:10.1016/S0010-8545(99)00189-7

Bader, Richard F. W. 1991. A quantum theory of molecular structure and its applications. *Chemical Reviews* 91: 893–928. doi:10.1021/cr00005a013

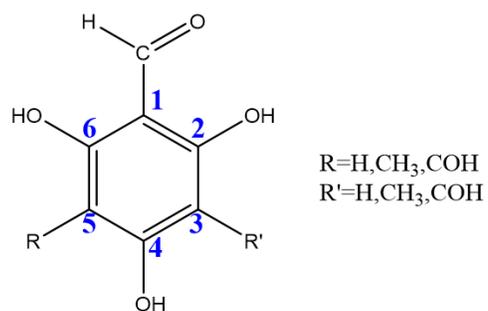


Estudio de los parámetros de reactividad global y local de acilfloroglucinoles

Luis Fernando Paredes^{1,2}, María Eugenia Castro², Norma A. Caballero³, Sergio Luis García^{1,4}, Jose Manuel Perez-Aguilar¹, Liliana Mammino⁵, Francisco J. Melendez¹

¹Lab. de Química Teórica, Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570, Puebla, México, ²Centro de Química, ICUAP, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570, Puebla, México, ³Facultad de Ciencias Biológicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570, Puebla, México., ⁴Universidad Abierta y a Distancia de México, UnADM, 06700, CDMex, Mexico, ⁵Department of Chemistry, University of Venda, Private Bag X5050, Thohoyandou 0950, South Africa

Los acilfloroglucinoles son compuestos que exhiben propiedades farmacológicas variadas, tales como antifúngica, antiviral, antioxidante, antidepresiva y antipalúdica [1]. En años recientes, los acilfloroglucinoles han sido estudiados por su importancia como posibles fármacos contra la malaria [2]. El grupo acilo forma enlaces por puente de hidrógeno intramoleculares con los grupos hidroxilo adyacentes. Los enlaces de hidrógeno intramoleculares juegan un papel importante en la determinación de las preferencias conformacionales, la energía de estabilidad de la molécula y la reactividad de las mismas. En este trabajo, se presenta un estudio de acilfloroglucinoles que contienen en su estructura -H, -CH₃ y -COH como sustituyentes, ver Esquema 1. Se estudian las propiedades electrónicas y de reactividad global y local usando los funcionales APFD [3] y B98 [4] con la base aug-ccpVDZ [5] en fase gas y en disolución con agua, acetonitrilo y cloroformo. Se utilizaron los modelos PCM [6] y SMD [7] de solvatación implícita. Todos los cálculos se realizaron en el programa Gaussian16 [8]. Los resultados preliminares muestran que los compuestos que tienen -CH₃ como sustituyente en C3 y C5 tienen energías gap @ 4.46 eV, electrofilicidad @ -3.5 eV, electronegatividad @ -3.9 eV y valores de blandura @ -0.44 eV, indicando un comportamiento como donador mayor que con -H y -COH. Como perspectivas, se calcularán los sitios de reactividad local mediante funciones de Fukui.



Esquema 1. Estructura de acilfloroglucinol y sus sustituyentes.



Referencias:

1. Singh P. Inder., Bharate B. Sandip. (2006) Nat. Prod. Rep., 23, 558-591.
2. van Vuuren, S.F., Viljoen A.M., van Zyl, R.L., van Heerden F.B., Baser K.H.C. (2006) South Africa J. Bot., 72, 287-290.
3. Austin A., Peterson G.A., Frisch M., Dobek F., Scalmani G., Throssell K. (2012) J. Chem. Theor. Comput., 8, 4989-5007.
4. Schmider H.L., Becke, D.A. (1998) J. Chem. Phys., 108, 23, 9624-9631.
5. Kendall R.A., Dunning Jr.T.H., Harrison R.J. (1992) J. Chem. Phys., 96, 6796-806.
6. Tomasi J., Mennucci B., Cammi R. (2005) Chem. Rev., 105, 2999-3093.
7. Marenich A.V., Cramer C.J., Truhlar D.G. (2009) J. Phys. Chem. B, 113, 6378-96.
8. Gaussian 16, Revision B.01, Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., et al. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016.

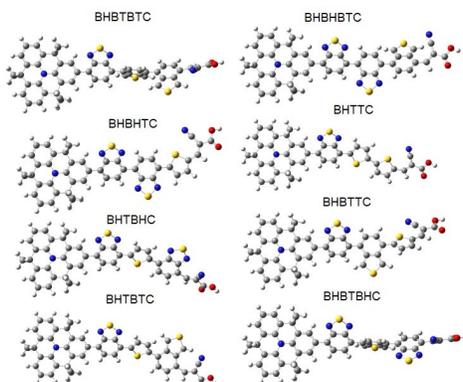


ESTUDIO TEÓRICO DEL PUENTE PI DE COLORANTES BASE ACRIDINA EN DSSC

Rodolfo Alejos-León, Rody Soto-Rojo, Daniel Glossman-Mitnik, Jesús Baldenebro-López

Facultad de Ingeniería Mochis, Universidad Autónoma de Sinaloa. Prol. Ángel Flores y Fuente de Poseidón, S/N, C.P. 81223, Los Mochis, Sinaloa; México, NANOCOSMOS Virtual Lab, Centro de Investigación en Materiales Avanzados S.C. Miguel de Cervantes 120, C.P. 31136, Chihuahua, Chihuahua; México

El consumo de energía es uno de los grandes medidores del progreso y bienestar de una sociedad. Un modelo económico como el actual, cuyo funcionamiento depende de un continuo crecimiento, exige una demanda igualmente creciente de energía. La energía solar constituye una fuente de energía limpia, abundante y renovable. Las celdas solares sensibilizadas por colorantes (DSSC) es una de las alternativas más prometedoras desde un punto de vista tecnológico¹. La eficiencia de DSSCs depende en gran proporción en la estructura química del colorante², generalmente, las mayores eficiencias de colorantes consisten de un grupo donador (D), puente p y grupo aceptor (A), nombrados estructuras (D-p-A). Este trabajo expone novedosos colorantes con variaciones en el puente p determinadas con moléculas de benzotiadazol, tiofeno y benzotiofeno. El estudio fue llevado a cabo con la teoría de funcionales de la densidad (DFT) y su ampliación para tratar sistemas excitados y se delimita los orbitales moleculares con el conjunto base 6-311G(d). El estudio de orbitales moleculares HOMO (orbital molécula más alto ocupado) y LUMO (orbital molécula más bajo desocupado) y el análisis de los parámetros de reactividad química complementa el entendimiento de los factores que potencialmente influenciarían la eficiencia fotovoltaica de las mejores propuestas como sensibilizadores, surgiendo un campo de oportunidad desde el punto de vista experimental.





Referencias:

- (1) E. R. Bobicki, Q. Liu, Z. Xu, et al. "Carbon capture and storage using alkaline industrial wastes". Prog. Energy Combust. Sci. 38(2) 302–320, .
- (2) Kim, J.-J.; Yoon, J.; Kim, E. J.; Kim, B. R.; Yoon, Y.-J.; Kang, M. A New Ruthenium Sensitizer Containing Benzo[1,9]quinolizino(acridin-2-Yl)vinyl-2,2'-Bipyridine Ligand for Effective Nanocrystalline Dye-Sensitized Solar Cells. Int. J. Photoenergy 2012, 2012, 1–7.



Descripción molecular de la interacción de bloqueadores tipo cannabinoide con los Cav3

Maricruz Rangel, Jose Manuel Perez-Aguilar, Norma Caballero, María Eugenia Castro, A. Rangel-Huerta, Francisco J. Meléndez

Facultad de Ciencias Químicas. Laboratorio de Química Teórica. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP); Puebla, Puebla, México, Facultad de Ciencias Químicas. Laboratorio de Química Teórica. BUAP, Facultad de Ciencias Biológicas. BUAP, Centro de Química. Instituto de Ciencias. BUAP, Facultad de Ciencias de la Computación. BUAP, Facultad de Ciencias Químicas. Laboratorio de Química Teórica. BUAP

Los canales de calcio tipo T (Ca_v3) están involucrados en los mecanismos de acción de enfermedades cardíacas y trastornos neurológicos que afectan a una gran parte de la población mundial [1]. Un conocimiento detallado de tales mecanismos funcionales y cómo éstos son modulados por ligantes, requiere identificar las interacciones proteína-proteína y proteína-ligante más relevantes. En este trabajo se propone hacer un estudio de la interacción de moléculas con actividad cannabinoide capaces de bloquear la función de los Ca_v3 ($Ca_v3.1$, $Ca_v3.2$ y $Ca_v3.3$). Dichas moléculas incluyen a Anandamida y a tres compuestos NMP (Neuro Molecular Production) derivados del carbazol: NMP-4, NMP-7 y NMP-181. Utilizando la técnica de modelado por homología, se construyen las estructuras 3D de los Ca_v3 [2]. Posteriormente, se analiza la interacción de los ligantes antes mencionados mediante acoplamiento molecular utilizando el programa AutoDock-Vina [3]. Los resultados obtenidos coinciden en identificar regiones de interacción que están de acuerdo con la literatura [4]. Se corrobora la importancia de los segmentos S5 y S6 de los canales como un sitio fundamental para modular la fase de inactivación de dichos canales. Nuestro trabajo sugiere no solamente sitios de interacción para los bloqueadores tipo cannabinoide sino detalles estructurales que pueden coadyuvar a incrementar su afinidad por los Ca_v3 .



Referencias:

Zhang Y.; Jiang X.; Snutch TP.; Tao J. *Biochim Biophys Acta*. 2012, 1828, 1-10.

Šali A.; Blundell TL. *J. Mol. Biol.* 1993, 234, 779-815.

AutoDock-Vina, Trott O.; Olson AJ. *J. Comp. Chem.* 2010, 31, 455-461.

Marksteiner R.; Schurr P.; Berjukow S.; Perez-Reyes E.; Hering S.; *J. Physiol.* 2001, 537, 27-34.



Estudio del mecanismo de descarboxilación Schenkel-Rudin del etil metil malonato

Alvarez Lucia*, Hernández Isaías**, Domínguez Víctor***, Poulain Enrique*, Olvera Óscar*, González Julio*

* Universidad Autónoma Metropolitana, CBI, Área de Física Atómica Molecular Aplicada, Av. San Pablo 180, Col. Reynosa Tamaulipas, Azcapotzalco, Ciudad de México, C.P. 02200, México., ** Universidad Autónoma Metropolitana, CBI, Área de Química Aplicada, CBI, Av. San Pablo 180, Col. Reynosa Tamaulipas, Azcapotzalco, Ciudad de México, C.P. 02200, México., *** Universidad Autónoma Metropolitana, CBI, Área de Química de Materiales, Av. San Pablo 180, Col. Reynosa Tamaulipas, Azcapotzalco, Ciudad de México, C.P. 02200, México.

El mecanismo de descarboxilación propuesto por Schenkel-Rudin [1] involucra una serie de procesos electrónicos unimoleculares para liberar CO_2 , los cuales se pueden alcanzar simplemente por el efecto de la temperatura y son independientes del pH. Los investigadores [2] han propuesto diferentes mecanismos que involucran la interacción de los hidrógenos en la molécula con radicales libres del medio de reacción. En este trabajo estudiamos el mecanismo de Schenkel-Rudin, utilizando la teoría de funcionales de la densidad con el programa ORCA [3], empleando las funciones de base TZVP [4] y los funcionales PBE, PBE0, M06 y M062X. Encontramos las estructuras de mínima energía del producto, el reactivo, y el estado de transición, verificándolos con los análisis de frecuencias de vibración. Luego calculamos la coordenada intrínseca de reacción para corroborar que efectivamente estos estén conectados. También, estudiamos el efecto del intercambio exacto en los funcionales utilizados para describir la reacción. Encontramos que el mecanismo propuesto por Schenkel-Rudin es viable, el estado de transición se compone de una migración del hidrógeno del ácido carboxílico, el cual debilita el enlace C-C, liberando CO_2 y formando un doble enlace entre los otros carbonos. La energía de activación es de ~ 1.3 eV como lo muestra la Figura 1 a). Figura 1. a) PES. b) Espectros infrarrojos. c) Estructuras del reactivo, estado de transición y producto.



Referencias:

1. Schenkel, H. & Schenkel-Rudin, M. Beitrag zum Problem der Decarboxylierung. 3. Mitteilung. Theoretische Betrachtungen zum Problem der Decarboxylierungsreaktion. Helvetica Chimica Acta 31, 514-524 (1948).
2. Taylor, J.E. & Verhoek, F.H. THE DECARBOXYLATION OF L-2-METHYL-2-BENZENESULFONYLBUTYRIC ACID. Journal of the American Chemical Society 81, 4537-4540 (1959).
3. Neese, F. The ORCA program system. Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science 2, 73-78 (2012).
4. Peintinger, M.F., Oliveira, D.V. & Bredow, T. Consistent Gaussian basis sets of triple-zeta valence with polarization quality for solid-state calculations. Journal of Computational Chemistry 34, 451-459 (2013).
5. NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69, Eds. P. J. Linstrom and W. G. Mallard.

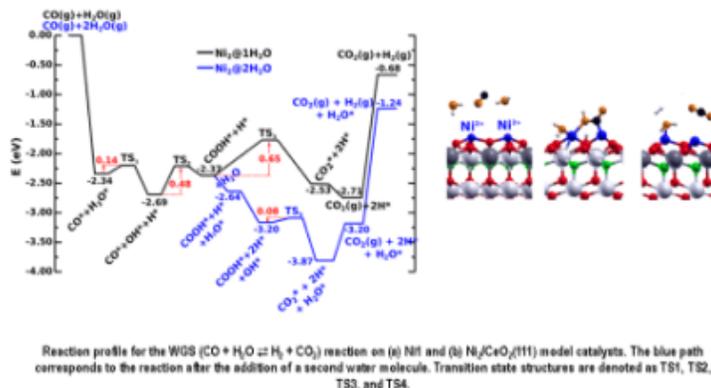


Efectos cooperativos entre los sitios de Ni soportados sobre CeO₂(111) en la reacción WGS.

Leticia Feria, Pablo Lustemberg, Veronica Ganduglia

Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México., Instituto de Física Rosario, Rosario S2000EZO, Santa Fe, Argentina., Instituto de Catálisis y Petroleoquímica, C/Marie Curie 2, E-28049 Madrid, España.

Los cálculos de la teoría funcional de densidad (DFT) han sido realizado para estudiar el mecanismo de reacción de cambio de gas de agua (WGSR, por sus siglas en inglés) a través de la formación de un intermediario carboxilo sobre un catalizador modelo de Ni/CeO₂(111), para el cual los adatomos de níquel están en contacto directo con el soporte de ceria. Las fuertes interacciones metal-soporte estabilizan las especies de adatomos de Ni²⁺ que favorecen la disociación de los enlaces O-H. En este sistema, el paso limitante es la formación de COOH. En este trabajo descubrimos que, si el CO y el agua se adsorben en los adatomos de Ni vecinos, se pueden formar especies de COOH, superando una barrera de energía por debajo de 0.5 eV, que es aproximadamente 0.2 eV más baja que la de un solo sitio aislado de Ni. Además, mostramos que la alta hidratación/hidroxilación del sistema reduce significativamente la barrera de activación para la desprotonación de las especies de carboxilo quimisorbidas y facilita la evolución de la reacción WGS. Los resultados muestran efectos cooperativos entre sitios únicos de Ni que hacen que la reacción sea más eficiente.





Referencias:

P. G. Lustemberg, L. Feria and V. Ganduglia. JPCC, 2019, 123, 7749-7757

K. Mudiyansele, S. D. Senanayake, L Feria, J. A. Rodriguez, and D. J. Stacchiola. Angew. Chem. 2013, 52, 5101-5105

J. A. Rodriguez, S. Ma, P. Liu, J. Hrbek, J. Evans, M. Perez, Science, 2007, 318, 1757 – 1760.

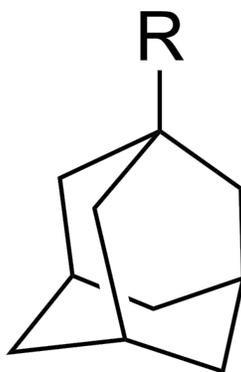


Análisis de propiedades termoquímicas y estructurales de derivados del adamantano.

Sebastián García Pineda, Omar Santiago Sosa, Henoc Flores Segura, Elsa Adriana Camarillo Jiménez, Juan Manuel Solano Altamirano, Julio Manuel Hernández Pérez.

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Facultad de Ciencias Químicas

Los compuestos derivados del adamantano presentan aplicaciones interesantes en la industria farmacéutica, sin embargo, no existen datos termoquímicos reportados en la literatura. Con la idea de conocer más sobre las propiedades termoquímicas de estos compuestos, estudiamos la relación entre la energía de compuestos derivados del adamantano y su estructura. Para ello calculamos algunas propiedades termoquímicas en fase gaseosa (entalpías y energías de Gibbs de formación y capacidades caloríficas) de derivados monosustituídos del adamantano en la posición 1 con $R = H, -COOH, -CH_2COOH, -NH_2, -NCO, -NCS, -CH_2OH, -CH_2CH_2OH, -NHC(O)CH_3$. También estudiamos la posible formación de interacciones intramoleculares y su influencia en la energía total del sistema. En el cálculo de la energía electrónica usamos el protocolo G4. Las interacciones intramoleculares se estudiaron usando Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas, Orbitales Naturales de Enlace y el Índice de Interacciones No-covalentes.





Referencias:

L. A. Curtiss, P. C. Redfern, and K. Raghavachari, "Gaussian-4 theory." J. Chem. Phys., 126 (2007) 084108. DOI: 10.1063/1.2436888



Estudio conformacional del CNBD del canal HCN con simulaciones de dinámica molecular

Violeta Rangel, Maricruz Rangel, José Manuel Perez-Aguilar, María Eugenia Castro, Norma Caballero, Francisco J. Meléndez

Facultad de Ciencias Químicas. Laboratorio de Química Teórica. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP); Puebla, Puebla, México, Facultad de Ciencias Químicas. Laboratorio de Química Teórica. BUAP, Facultad de Ciencias Químicas. Laboratorio de Química Teórica. BUAP, Centro de Química. Instituto de Ciencias BUAP, Facultad de Ciencias Biológicas. BUAP, Facultad de Ciencias Químicas. Laboratorio de Química Teórica. BUAP

Los canales activados por hiperpolarización y unión a nucleótidos cíclicos (HCN) son canales catiónicos tetraméricos. Cada subunidad (HCN1-4) tiene seis segmentos transmembranales (S1-S6) y un segmento citosólico en la región C-terminal formando dominios de unión a nucleótidos cíclicos (CNBD) [1]. Fisiológicamente, estos canales contribuyen a la transmisión de impulsos nerviosos y a la actividad marcapasos tanto en neuronas como en cardiomiocitos [2]. La función de los canales HCN está modulada por la unión con su ligante endógeno, el adenosín monofosfato cíclico (cAMP). Sin embargo, está bien documentado que otro nucleótido cíclico, el cGMP (guanosin monofosfato cíclico) también es capaz de modificarla aunque de manera menos eficiente [3]. Para determinar los mecanismos y cambios conformacionales asociados a la interacción del CNBD con los nucleótidos cíclicos, se realizaron estudios de simulaciones de dinámica molecular. Nuestro estudio identifica posibles diferencias entre la interacción del CNBD con cAMP y cGMP. Se estudian tres condiciones del CNBD del canal HCN1 en ambiente fisiológico: i) CNBD (apo), CNBD/cAMP y CNBD/cGMP. Los resultados sugieren diferencias conformacionales significativas en varias regiones del CNBD que dependen de la presencia del ligante (aunque no de la naturaleza del mismo). Este estudio contribuye a entender la función de los canales HCN cuando son modulados por sus ligantes naturales que se encuentran en el citosol.



Referencias:

Schunke S.; Stoldt M. Biol Chem. 2013, 394, 1439-1451.

Akimoto M.; Van Schouwen B.; Melacini G. The FEBS Journal. 2018, 285, 2182-2192.

Zagotta W.N.; Olivier N.B.; Black K.D.; Young E.C. Nature. 2003, 425, 200-205.

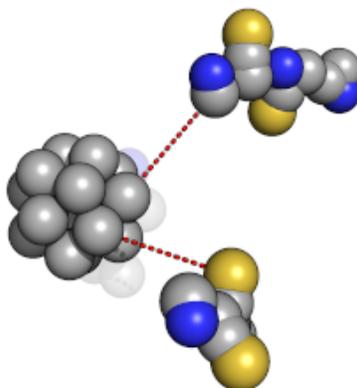


Simulación molecular multiescala de moléculas orgánicas con aplicación fotovoltaica

Humberto Tadeo Flores Trujillo, Andrés Felipe Marmolejo Valencia, Carlos Amador Bedolla, Laura Domínguez Dueñas

Departamento de Fisicoquímica, Facultad de Química, UNAM

Las celdas solares orgánicas pertenecen a la tercera generación de dispositivos desarrollados para la conversión de energía solar a eléctrica. Estos dispositivos ofrecen una serie de ventajas frente a las tradicionales, aunque carecen aún de una eficiencia equiparable a estas. Esta eficiencia depende de la morfología de la heterojunta, que es la interfase entre las fases de moléculas donadoras yceptoras que componen la fase activa de la celda [1]. En consecuencia, resulta de suma importancia estudiar los parámetros fisicoquímicos que influyen en esta morfología, ya que por métodos espectroscópicos ha sido difícil su caracterización. En este trabajo utilizamos herramientas de dinámica molecular clásica para estudiar el proceso de preparación de la fase activa mediante la evaporación de solvente de la mezcla donador/aceptor. Empleamos como molécula aceptora el PCBM y como molécula donadora un conjunto de moléculas heterocíclicas aromáticas generadas por métodos computacionales. Para desarrollar nuestras simulaciones se adaptó y empleó un modelo de grano grueso [2], y se analizaron diferentes parámetros que influyen en la formación de ésta heterojunta, como: tipo de molécula donadora, sustitución alifática y rapidéz de evaporación.





Referencias:

Alessandri, R., Uusitalo, J. J., De Vries, A. H., Havenith, R. W. A. & Marrink, S. J. Bulk Heterojunction Morphologies with Atomistic Resolution from Coarse-Grain Solvent Evaporation Simulations. *J. Am. Chem. Soc.* (2017).

Marrink, S. J., Risselada, H. J., Yefimov, S., Tieleman, D. P. & De Vries, A. H. The MARTINI force field: Coarse grained model for biomolecular simulations. *J. Phys. Chem. B* (2007).

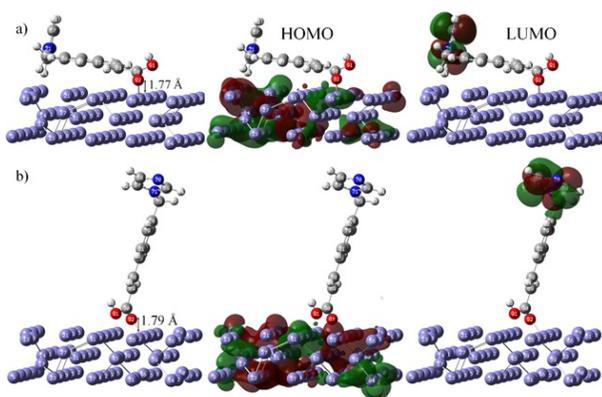


Estudio teórico de moléculas inhibitoras de benzimidazol y piridina sobre un clúster de Fe

Jorge Luis Reyes Corrales, Jesús Adrián Baldenebro López, Rody Abraham Soto Rojo, Daniel Glossman Miknit

Facultad de Ingeniería Mochis, Universidad Autónoma de Sinaloa. Prol. Ángel Flores y Fuente de Poseidón, S/N, C.P. 81223, Los Mochis, Sinaloa; México, NANOCOSMOS Virtual Lab, Centro de Investigación en Materiales Avanzados S.C. Miguel de Cervantes 120, C.P. 31136, Chihuahua, Chihuahua; México

Una de las principales pérdidas millonarias en las industrias (principalmente petroleras), se debe a la corrosión de los materiales, tales como tuberías, accesorios, equipos y cualquier otro material metálico que se encuentre en contacto con un medio agresivo. Los inhibidores basados en heteroátomos de nitrógeno han mostrado ser uno de los productos químicos eficaces en la inhibición de la corrosión de metales. El presente trabajo consiste en un modelo teórico a través de la teoría de funcionales de la densidad usando el nivel de cálculo PB0/6-311G(d) para los átomos de C, H, O, N y S y el pseudopotencial LANL2DZ para los átomos de Fe a moléculas inhibitoras de corrosión derivadas de benzimidazol y piridina. se plantearon distintas posiciones (paralela y horizontal) de las estructuras seleccionadas sobre distintos clústeres de Fe de 3x5x5, 2x5x5 y 2x4x5 en el plano (111). Diversas propuestas fueron planteadas hasta obtener las geometrías de mínima energía y sus orbitales moleculares de frontera HOMO y LUMO para observar el comportamiento de anclaje sobre el clúster de Fe. El objetivo de este estudio es determinar el modo de adsorción de las moléculas y su transferencia de carga sobre el clúster de Fe.





Referencias:

M. Mousavi, M. Mohammadalizadeh, and A. Khosravan. “Theoretical investigation of corrosion inhibition effect of imidazole and its derivatives on mild steel using cluster model” 53 3086–3091, 2011.

M. Lashkari and M. R. Arshadi. “DFT studies of pyridine corrosion inhibitors in electrical double layer: Solvent, substrate, and electric field effects”. Chem. Phys. 299(1) 131–137, 2004.



Estudio computacional del efecto de los grupos protectores en la síntesis de C-glicósidos.

José Isaac Bautista Blanco, Fernando Cortés Guzmán

Instituto de Química, UNAM

Se realizó un estudio enfocado en los lactoles derivados de la D-fucosa con ter-butildimetilsililo (TBDMS) y bencilo (Bn), como grupos protectores. Se encuentra reportado en la literatura, que experimentalmente dichos grupos protectores conllevan a rendimientos de C-glicósidos estéricamente opuestos, siguiendo la metodología de reacción propuesta por Kishi. Donde la estereoselectividad es usualmente explicada por el modelo de Woerpel, que postula que el ión oxocarbenio formado en el estado de transición de la reacción define la estereoquímica del producto, y a su vez la conformación de dicho ión depende de factores estereoelectrónicos causados por los grupos protectores. Para estudiar estos efectos se realizaron dinámicas moleculares semicuánticas tipo BOMD implementadas en el programa de cálculo CP2k, las cuales permiten simular el comportamiento de los lactoles a través del tiempo.



Referencias:

Cortezano-Arellano, O., Meléndez-Becerra, C. A., Cortés, F., Sartillo-Piscil, F., y Cordero-Vargas, A. (2014). Stereoselective C-glycosidation of d-fucose derivatives directed by the protective groups. *Carbohydrate research*, 393, 51-59.



Multipolo eléctrico cuantizado topológico sobre una red fractal

Marco Antonio Díaz Villarreal 1, Atahualpa S. Kraemer 1, José Eduardo Barrios Vargas 2

1 Facultad de Ciencias, UNAM, México, 2 Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química, UNAM, México

Un material que presenta una fase topológica se caracteriza por tener estados electrónicos de borde robustos a impurezas y fluctuaciones térmicas. Usualmente dichos estados se restringen espacialmente a la frontera del material. Recientemente, Benalcazar et al. extendieron la clasificación de las fases topológicas donde los estados topológicos pueden restringirse a bordes de menor dimensión [1, 2]. Por ejemplo, típicamente en un cristal topológico bidimensional, los estados topológicos se alojan a lo largo de los bordes, pero en la nueva clasificación los estados topológicos pueden ubicarse en las esquinas del material, como resultado, el material es un aislante multipolo eléctrico cuantizado [3]. Muchos fenómenos topológicos pueden entenderse como una cuantización inducida por simetría de la fase Berry, que describe la polarización de carga dentro de la celda unitaria. Esta teoría que relaciona la topología y la polarización se ha extendido recientemente a momentos multipolares de orden superior. Actualmente se han logrado observar estos estados en arreglos fonónicos, circuitos eléctricos y cristales fotónicos [4-6]. En este trabajo, presentamos un modelo de aislante multipolo eléctrico cuantizado sobre una red fractal (alfombra Sierpinski). Estudiamos la auto- semejanza en los multipolos eléctricos la auto- semejanza en el espectro electrónico, y la caracterización de la cantidad topológica asociada a la fase de Berry.



Referencias:

W. A. Benalcazar, et al. Science 357, 6346, pp. 61-66 (2017)

W. A. Benalcazar, et al. Phys. Rev. B 96, 245115 (2017)

F. Schindler et al. Science Advances, 4, 6, eaat0346 (2018)

Serra-Garcia, Marc, et al. Nature 555.7696 (2018): 342.

Peterson, Christopher W., et al. " Nature 555.7696 (2018): 346.

Yang, Yihao, et al. Nature 565.7741 (2019): 622.



Docking molecular de derivados de quinolonas en la estructura de topoisomerasa II de TBM

Dayan Bernal Miranda, Ma del Refugio Cuevas Flores, Jaime Cardoso Ortiz, Marco Antonio García Revilla

Unidad Académica de Ciencias Químicas. Universidad Autónoma de Zacatecas (UACQ-UAZ). Zacatecas, México., Marco Antonio García Revilla. Departamento de Química, Universidad de Guanajuato, (UGto) Guanajuato, México.

Según la Organización Mundial de la Salud, la Tuberculosis, sigue siendo la enfermedad infecciosa más letal del mundo. Según las estimaciones, hubo 558 000 nuevos casos de resistencia al fármaco de primera línea, de los cuales el 82% padecían TB-MDR. Las fluoroquinolonas son una de las clases más exitosas de medicamentos contra patógenos bacterianos, que representan el 24% del mercado de antibióticos. Los casos particularmente problemáticos de TB, son los que presentan resistencia a los dos fármacos principales: rifampicina e isoniacida. La sustitución en la posición C-7, generalmente esencial en la potencia antibacteriana, el espectro y la seguridad, y se considera el sitio más adaptable para la modificación química. Por lo que se propusieron un conjunto de moléculas derivadas de quinolonas modificadas en esta posición. El conjunto de moléculas propuestas primero se optimizó a nivel de teoría de funcionales de la densidad utilizando el funcional PBE y el conjunto de base 6-311G. El receptor de topoisomerasa II se obtuvo de Protein Data Bank, PDB. Posteriormente se llevó a cabo un acoplamiento molecular con la estructura cristalina de un complejo de topoisomerasa II para determinar los modos de formación fármaco-receptor, finalmente se determinó la energía de acoplamiento, en los cuales se obtuvieron resultados óptimos para su posterior síntesis.



Referencias:

Tim R. Blower, Benjamin H. Williamson, Robert J. Kerns, and James M. Berger

PNAS February 16, 2016 113 (7) 1706-1713; first published January 20, 2016
<https://doi.org/10.1073/pnas.1525047113>

Contributed by James M. Berger, December 22, 2015

Müller B, Dürr S, Alonso S, Hattendorf J, Laise CJM, Parsons SDC, et al. Zoonotic Mycobacterium

bovis–induced tuberculosis in humans. *Emerg Infect Dis* [Internet]. 2013 Jun; 19(6).

<http://dx.doi.org/10.3201/eid1906.120543>

Tuberculosis (TB). WHO. 2019.

Highsmith, H. Y., Starke, J. R., & Mandalakas, A. M. (2018). Tuberculosis. *Kendig's Disorders of the*

Respiratory Tract in Children, 475–497.e5. <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-44887-1.00029-8>



COMPORTAMIENTO FOTOQUÍMICO DE AVOBENZONA-DERIVADOS CON ESTABILIDAD MEJORADA MEDIANTE TDDFT

Nohemi García Molina, Dra. Nelly Ma. De la Paz González Rivas, Dr. Erick Cuevas Yañez, Dr. Horacio Reyes Pérez

Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM; México, Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM; México, Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM; México, División de Ingeniería Química, Tecnológico de Estudios Superiores de Jocotitlán; México

La avobenzona es el filtro solar más utilizado a nivel mundial, esto se debe a que es una β -dicetona que presenta una adecuada protección contra los rayos UV, sin embargo, en años recientes se ha dudado sobre su fotoestabilidad. Es así, como se ha llevado a cabo un estudio teórico muy completo acerca del comportamiento fotoquímico de la avobenzona utilizando modelos de TD-DFT, así mismo, un análisis teórico de los posibles sitios de ruptura de la avobenzona y la realización de la corrección o aproximación del solvente la cual puede acercarnos a la parte experimental que es nuestra finalidad. Esta misma metodología se ha aplicado a dos series de nuevas moléculas, con el objetivo de tener nuevas propuestas de compuestos que presenten las mismas propiedades de absorción, pero una mayor estabilidad fotoquímica. En base a los resultados se observó que en los derivados propuestos la contribución del solvente provoca un desplazamiento de la banda absorción a números de onda más altos, así como un incremento en la intensidad de la señal. Por otro lado, los orbitales moleculares juegan un papel muy importante en las propiedades eléctricas y en el espectro UV-vis de la avobenzona y sus derivados, mostrando que para el tautómero ceto, su λ_{max} donde se realiza la excitación electrónica se produce entre el HOMO-1 y el LUMO+1, por lo que se requiere una mayor energía que en los tautómeros E1 y E2.



Referencias:

Balogh TS, Velasco MVR, Pedriali CA, Kaneko TM, Baby AR (2011) Ultraviolet radiation protection: current available resources in photoprotection. *An Bras Dermatol* 86:732–742

Gutiérrez-Vidrio, R. M., *Cancer de Piel*, *RevFacMed UNAM* Vol.46 No.4 Julio-Agosto, 2003.

P. Hohenberg and W. Khon, *Physical Review* 136 (1964) B864-B871

R.G. Parr and W. Yang, *J. Am. Chem. Soc.* 106 (1984) 4049.

Nyang Kennet Nkungli, Julius Numbonui Ghogomu, Ludovid Ngouo Nogheu, Shridhar Ramachandra Gadre. DFT and TD-DFT Study of Bis[2-(5-Amino-[1,3,4]-Oxadiazol-2-yl) Phenol](Diaqua) M(II) Complexes [M=Cu, Ni and Zn]: Electronic Structures, Properties and Analyses. *Computational Chemistry*, 2015, 3, 20-44.

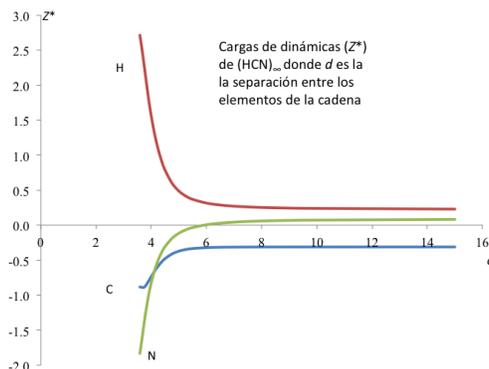


Cargas dinámicas en sistemas enlazados por puentes de hidrógeno

Joel Ireta Moreno

Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

Las cargas dinámicas o cargas de Born son el cambio en el momento dipolar debido al cambio en la posición de los átomos de un sistema. En este trabajo se mostrará que las cargas dinámicas se pueden obtener a partir de la cooperatividad de los puentes de hidrógeno, asumiendo la condición de que esta última resulta solo de interacciones dipolares. Las cargas dinámicas así calculada se contrastaran con las obtenidas por medio de la teoría de los funcionales de la densidad perturbativo, y se mostrará que existe una excelente concordancia entre las dos formas de calcularlas, lo cual valida lo asumido, esto es, que la cooperatividad de los puentes de hidrógeno es de origen electrostático.





Referencias:

Ninguna



Acoplamiento molecular de derivados de cumarinas con MAO-B en el tratamiento de Parkinson

Sabrina Marín, María Eugenia Castro, Norma A. Caballero, José Manuel Pérez-Aguilar, Francisco J. Meléndez

Facultad de Ciencias Biológicas. Licenciatura en Biotecnología. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570, Puebla, México., Centro de Química, Instituto de Ciencias, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570, Puebla, México, Lab. de Química Teórica, Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570, Puebla, México

La enfermedad de Parkinson (EP) es un trastorno neurológico que ocurre cuando las células neuronales no producen suficiente dopamina y ésta disminuye en el sistema nigroestriatal [1]. Algunos fármacos, como la selegilina o la rasagilina, previenen la descomposición de dopamina inhibiendo a la enzima monoaminoxidasa B (MAO-B), la cual degrada a la dopamina en el cerebro [2]. Estos inhibidores hacen que la dopamina se acumule en las neuronas sobrevivientes y reduzcan los síntomas de la EP. Su desventaja es que son irreversibles e inespecíficos. Se ha optado por usar algunos grupos de moléculas para inhibir selectiva y reversiblemente a la enzima MAO-B, entre ellas se encuentran las cumarinas que se sugieren como nuevos fármacos por su estructura molecular y propiedades químicas [3]. En este trabajo se realizó un estudio de acoplamiento molecular entre la enzima MAO-B y un grupo de compuestos cumarínicos con potencial efecto inhibitor usando el programa Sybyl-X 2.0 [4]. Los resultados preliminares indican que los compuestos cumarínicos presenta una buena afinidad con la enzima con una $K_d @ 6.97$, incluso más que los fármacos inhibidores comunes (selegilina $K_d @ 4.98$ y rasagilina $K_d @ 4.56$), los cuales fueron probados y tomados como referencia. Por lo tanto, se propone nuevas cumarinas con diferentes grupos funcionales sustituidos en la estructura base, con la finalidad de identificar aquellos grupos que ayuden a potenciar su actividad inhibitoria.



Referencias:

Youdim, M., Edmondson, D., Tipton, K. (2006). The therapeutic potential of monoamine oxidase inhibitors. *Nat. Rev. Neurosci.*, 7 pp. 295-309.

Borštnar, R., Repi?, M., Kržan, M., et al. (2011). Irreversible inhibition of monoamine oxidase B by the antiparkinsonian medicines rasagiline and selegiline: a computational study. *Eur. J. Org. Chem.*, 2011(32), 6419-6433.

Matos, M. J., Vilar, S., Gonzalez-Franco, R. M., et al. (2013). Novel (coumarin-3-yl) carbamates as selective MAO-B inhibitors: Synthesis, in vitro and in vivo assays, theoretical evaluation of ADME properties and docking study. *Eur. J. Med. Chem.*, 63, 151-161.

Sybyl, X. 1.0 Tripos Inc 1699 South Hanley Road. St Louis. Missouri, 6314



Estudio de la interacción entre derivados de triazol y la enzima 17 β -HSD1

Rodrigo Said Razo-Hernández [1], Mario Alberto Leyva-Peralta [2], Cesar Fernando Azael Gómez-Durán [3], Irving Rubén Rodríguez-Torres [3], Hiram Hernández-López [3], Socorro Leyva-Ramos [3]

[1] Laboratorio de Quimioinformática y Diseño de Fármacos, Centro de Investigación en Dinámica Celular-IICBA, UAEM, Estado de Morelos; México., [2] Departamento de Ciencias Químico-Biológicas y Agropecuarias, Universidad de Sonora; México., [3] Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí; México.

En este trabajo se estudió la interacción de una serie de triazoles con la enzima 17 β -HSD1. Las características estructurales y electrónicas de estos triazoles se evaluaron por medio de su potencial electrostático molecular empleando la teoría de funcionales de la densidad. La interacción de estos triazoles con la 17 β -HSD1 se efectuó por medio de docking con diversos programas. Con esta información se obtuvo una ecuación matemática de la relación entre la concentración media inhibitoria (IC50) y la energía de interacción de los compuestos. Finalmente, se proponen varios de los triazoles como inhibidores de la 17 β -HSD1.



Referencias:

Bey, E. et al. Bioorganic and Medicinal Chemistry, 2008, 16, 6423-6435.

Negri, M.; Recanatini, M.; Hartmann, R. W. J Comput Aided Mol Des, 2011, 25, 795-811.



ESTUDIO TEÓRICO DE LA INTERACCION DE LÍQUIDOS IÓNICOS CON MODELOS DE LIGNINA

Diana L. Campa-Guevara [1], Nohra V. Gallardo Rivas [1], Isidoro García-Cruz [2]

División de Estudios de Posgrado e Investigación, Instituto Tecnológico de Ciudad Madero, Ave. 1° de Mayo y Sor Juana I. De la Cruz Col. Los Mangos, Cd. Madero, Tamaulipas, 89440, México. , Gerencia de Transformación de Biomasa, Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázar Cárdenas Norte 152 Col. San Bartolo Atepehuacán, Del. Gustavo A. Madero, Ciudad de México, 07730, México.

La biomasa es una alternativa al empleo de combustibles de origen fósil.[1] Sus principales componentes son la celulosa, la hemicelulosa, y la lignina.[2] Debido a la estructura de la lignina y a sus propiedades químicas, se pueden obtener productos químicos de interés. La naturaleza recalcitrante de la lignina y las dificultades para efectuar la despolimerización, aunada a su baja solubilidad, resulta en procesos de conversión a condiciones extremas de temperatura y presión.[3] Los líquidos iónicos (LIs), son solventes que presentan ventajas para la conversión de lignina a producto de valor agregado debido a su facilidad para disolverla.[4] En este trabajo, se propone un estudio teórico con cálculos de dinámica molecular clásica y dinámica molecular cuántica Born-Oppenheimer (DMBO), que permiten entender la interacción de biomoléculas y LIs. Se consideran modelos de la lignina que incluyan los enlaces característicos del biopolímero. Los LIs considerados, son derivados del catión del anillo imidazolio. Para evaluar el efecto de la longitud del sustituyente alquílico en el anillo imidazolio, se consideraron cadenas de dos, cuatro y seis carbonos. Para evaluar el efecto del anión en las propiedades del LI, los cationes serán combinados con los aniones $[OAc^-]$, $[Cl^-]$ y $[BF_4^-]$, cuyo uso se ha reportado en el pretratamiento industrial de lignina. Los resultados teóricos muestran que el tamaño de la cadena alquílica y el anión, tiene un efecto en la disolución de la lignina.



Referencias:

Li C.; Zhao X.; Wang A.; Huber G. W.; Zhang T., “Catalytic transformation of lignin for the production of chemicals and fuels”, *Chem. Rev.*, 115, 11559-11624, 2015.

Sangha, A.; A. K.; Petridis, L.; Smith, J. C.; Ziebell, A.; Parks, J., “Molecular simulation as a tool for studying lignin” *Env. Prog. Sust. Ener.* 31, 47-54, 2012.

Glas D.; Van Doorslaer C.; Depuydt D.; Liebner F.; Rosenau T.; Binnemans K.; De Vos D. E., “Lignin solubility in non-imidazolium ionic liquids”, *J. Chem. Technol. Biotechnol.*, 90, 1821-1130, 2015.

Creary X.; Willis E. D., “Carbocation-forming reactions in ionic liquids”, *J. Am. Chem. Soc.*, 127, 18114-18120, 2005.



Correlación de Constantes de Formación con Descriptores Atómicos de Compuestos de Cu(II)

Ricardo Almada Monter, Fernando Cortés Guzman

Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México

El valor experimental que se utiliza para describir los aspectos termodinámicos de las interacciones metal-ligante en un compuesto de coordinación, es la constante de formación del compuesto (beta) (Casasnovas, 2013). Estas constantes representan equilibrios entre un metal y un número determinado de ligantes y son determinados experimentalmente en una disolución acuosa a una determinada fuerza Iónica(Vukovic, 2015). En este proyecto se calcularon las constantes de formación de compuestos de coordinación de cobre (II) a partir de cálculos de optimización y frecuencias, tomando en cuenta distintas configuraciones, y de sus respectivos ligantes a un nivel de teoría de M06-2X y una base de 6-311++g(d,p) con un modelo de disolvente implícito "PCM" y utilizando el paquete de programas de Gaussian16 . Recientemente en el grupo de investigación se ha propuesto un descriptor de compuestos de coordinación, basado en el Laplaciano de la densidad electrónica, que aproxima la dureza de un átomo en una molécula. Éste se basa en la diferencia de valores de la función laplacina en los puntos críticos de concentración y de dilución sobre la población electrónica del átomo central de cobre(Cortés-Guzman & Ramirez-Palma, 2019). Se busca relacionar este descriptor con las constantes de equilibrio.



Referencias:

Vukovic, S., Hay, B. P., & Bryantsev, V. S. (2015). Predicting stability constants for uranyl complexes using density functional theory. *Inorganic Chemistry*, 54(8), 3995–4001.

Casasnovas, R., Ortega-Castro, J., Donoso, J., Frau, J., & Muñoz, F. (2013). Theoretical calculations of stability constants and pKa values of metal complexes in solution: application to pyridoxamine-copper(II) complexes and their biological implications in AGE inhibition. *Physical Chemistry Chemical Physics: PCCP*, 15(38), 16303–16313.

Cortes-Guzman F, Ramirez-Palma D, The Role of Spin Density in Metal-Ligand Interactions (artículo en proceso de publicación)



Evolución temporal del enredamiento cuántico en modelos de interacción radiación-materia

Alejandra del Río Lima, Octavio Castaños Garza

Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM

La información es almacenada, transmitida y procesada a través de procesos físicos. En los últimos años se ha implementado la física cuántica para su procesamiento. Esto ha creado áreas de investigación conocidas como teoría de la información cuántica y computación cuántica. Dos recursos importantes para éstas son el enredamiento y los sistemas cuánticos de dos niveles llamados qubits. Diferentes aproximaciones para la construcción de qubits, una de ellas es mediante átomos atrapados en una cavidad óptica en interacción con un campo electromagnético, de forma que se pueda tener un control sobre la población electrónica del átomo. Así, un qubit funciona como una memoria en donde se almacena la información. Debido a que los estados cuánticos no pueden ser copiados, esta información sólo puede ser transmitida a través del enredamiento entre la memoria cuántica (qubit) y el canal de comunicación que puede ser un campo electromagnético. En este trabajo se consideran diferentes modelos para la interacción radiación-materia y se presenta la evolución temporal del enredamiento entre ellos. Para todos los casos se calculan las probabilidades de ocupación del átomo y las correlaciones campo-materia del sistema mediante el cálculo de la entropía lineal. También se muestra el comportamiento de la luz en el espacio fase mediante la determinación de las funciones de Wigner y Husimi.



Referencias:

P. W. Milonni and J. H. Eberly Lasers John Wiley & Sons (1988).

R. J. Glauber Phys. Rev. 130 (1963) 2529.

F. T. Arecchi, E. Courtens, R. Gilmore, H. Thomas, Phys. Rev. A 6 (1972) 2211-2237.

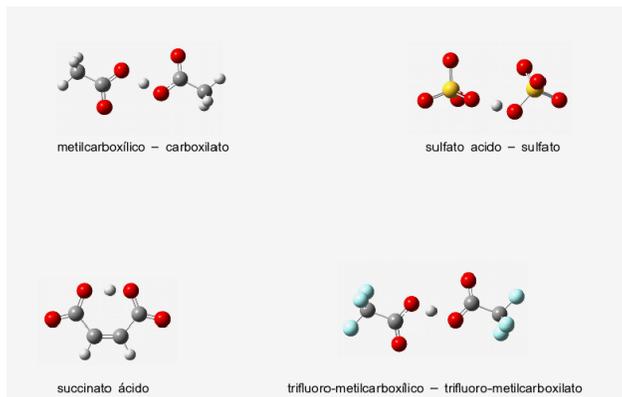


Partición de la energía de formación de enlaces de hidrógeno asistidos por carga

Gerardo Daniel Centeno Plaza, Tomás Rocha Rinza

IQ-UNAM

Los enlaces de hidrógeno se pueden clasificar en distintas categorías. En moléculas con regiones parcialmente cargadas, se favorece la formación de enlaces de hidrógeno asistidos por carga (CAHB por sus siglas en inglés). [1] La teoría cuántica de átomos en moléculas (QTAIM por sus siglas en inglés) propuesta por Bader ha permitido comprender mejor las propiedades de los cúmulos moleculares. [2] Por otro lado, la Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT) mediante el método de Kohn-Sham, ha permitido reducir el costo computacional de cálculos de estructura electrónica y así, la descripción de sistemas químicos. [3] Por medio de cálculos de topología de la densidad, se obtienen descriptores topológicos aplicando la teoría QTAIM, tales como la carga atómica y el índice de deslocalización electrónica, los cuales se utilizarán para verificar la presencia de enlaces tipo CAHB. La partición de la energía electrónica de átomos cuánticos interactuantes permitirá conocer la naturaleza de las interacciones y dividir la energía de interacción asociada a los cúmulos moleculares que se han elegido como sistemas de estudio (Figura 1). Haciendo uso de la teoría de funcionales de la densidad se realizaron cálculos de optimización de estructura electrónica con Gaussian09 empleando el funcional M06-2X, la base 6-311++G(2d,2p) y el método de disolvente (acuoso) SMD. Mediante la teoría de átomos en moléculas el estudio topológico de los sistemas se ha llevado a cabo empleando AIMAll.





Referencias:

Meot-Ner M. Chem. Rev. (2005) 105, 213 ? 284.

Foresman J. Exploring chemistry with electronic structure methods, Gaussian Inc. Pitsburg, 1996.

Bader R. Atoms in molecules A quantum theory, Clarendon Press, Oxford, 1994.

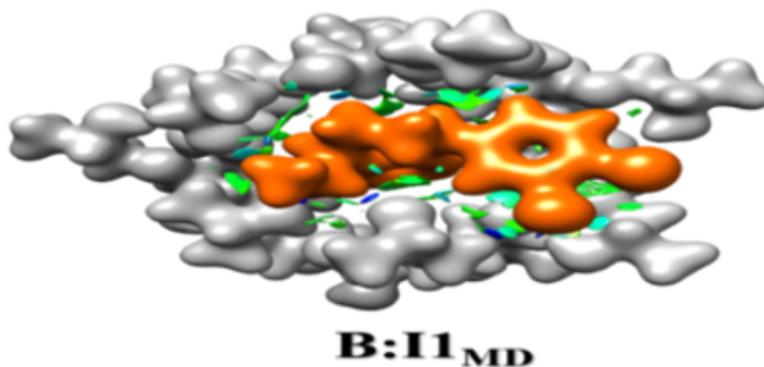


Impacto de los efectos electrónicos en la diferenciación de isómeros de la Sertralina

Joanatan-Michael Bautista Renedo, Nelly González Rivas, Jorge Garza Olguín, Rubicelia Vargas Fosada, Horacio Reyes Pérez, Erick Cuevas Yañez

Universidad Autónoma del Estado de México, Universidad Autónoma Metropolitana, Tecnológico de Jocotitlán

La sertralina, SRT, es un inhibidor de la serotonina con importantes efectos antidepresivos. [1] La relevancia de este compuesto es evidenciada por su uso en la industria farmacéutica para el tratamiento de desórdenes obsesivo-compulsivos. [2] Desde un punto de vista químico, la SRT posee dos centros quirales, por tanto, cuatro estereoisómeros. Curiosamente sólo el isómero *cis*-(1*S*,4*S*) exhibe las cualidades deseadas. Por tal motivo la pureza enantiomérica es uno de los principales factores a considerar. [3] Entre los métodos de purificación más utilizados se encuentra el uso de ciclodextrinas, CD, cuya forma cónica permite la formación de complejos que hacen posible la diferenciación. [4,5] Con el fin de explorar las interacciones entre los estereoisómeros de la SRT y derivados de la CD, se analizó la Superficie de Energía Potencial mediante mecánica molecular clásica, cuyos resultados se sometieron a un proceso de selección, obteniendo poco más de doscientas estructuras. Todas estas fueron optimizadas usando el método PBE0/6-31G(d,p) y caracterizadas energéticamente, geométrica y topológicamente. Los resultados obtenidos muestran mejores energías de asociación respecto a técnicas de muestreo manual e incluso de recosido simulado; así como la participación de interacciones débiles y el momento dipolar en el proceso de diferenciación.





Referencias:

Chromatographia 77(19-20):1315-1321

Rev Anal Chem 30 (2011): 87–122

Electrophoresis 27(1):213-21

International Journal of Analytical Chemistry 2016(3):1-7

Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis 107 (2015) 265–272



Estudio DFT de compuestos Zn(II)-PIR; estabilidad y propiedades termodinámicas

Karla L. Morales Cerón, Esther Agacino Valdés, Sandy M. Pacheco Ortín, Rodolfo Gómez Balderas

Centro de Investigaciones Teóricas, Dpto. de Ciencias Químicas y Laboratorio de Físicoquímica Analítica, Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán-UNAM, Cuautitlán Izcalli 54714, Edo. México, MÉXICO.

El Piroxicam (PIR) aunque es un fármaco antiinflamatorio no esterooidal usado en enfermedades reumatoideas y de osteo-artritis, presenta importantes efectos secundarios. Actualmente se estudia como reducir estos efectos y uno de ellos es la de administrar este fármaco en forma de un complejo con el Zn [1] habiéndose demostrado su efectividad. En un trabajo previo se encontró que la conformación más estable del fármaco como complejo Zn(II)-PIR es la forma enólica (EZZ). En este trabajo se realizaron cálculos en fase gas y con efecto de solvente (agua) de las posibles geometrías del complejo en su forma cuadrada plana, tetraédrica, bipirámide trigonal y octaédrica que son las más frecuentes en los complejos de Zn. Para la geometría más estable, las propiedades termodinámicas, incluyendo la constante de estabilidad son reportadas. Los cálculos se realizaron aplicando la TFD implementada en el Gaussian09, utilizando la combinación Rev-TPSS y 6-311+G(d,p); éste funcional ya fue validado en un trabajo previo [2]. Las estructuras modeladas fueron optimizadas totalmente con los correspondientes cálculos de frecuencia.



Referencias:

Tian, X.; Hussain, S.; de Pace, C.; Ruiz Perez, L.; Battaglia, G. (2019) ZnII complexes for bioimaging and correlated applications. Chem. Asian. J. 14, 509-26.

Lidia G. Ledesma-Olvera, Esther Agacino-Valdes, Rodolfo Gomez-Balderas, Stability constants

of Cu (II)-piroxicam complexes in solution: a DFT study. Theor. Chem. Acc. 135 (10) (2016) 241.



Melatonina y sus metabolitos como agentes químicos capaces de reparar el ADN oxidado.

Adriana Pérez-González, Romina Castañeda-Arriaga, Annia Galano, Juan Raúl Álvarez-Idaboy, Russel J. Reiter

CONACYT - Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina. Iztapalapa. C. P. 09340. México City, México., Departamento de Química. Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina. Iztapalapa. C. P. 09340. México City, México., Facultad de Química, Departamento de Física y Química Teórica, Universidad Nacional Autónoma de México, C.P. 04510 México City, México., Department of Cellular and Structural Biology, UT Health Science Center, San Antonio, Texas, TX 78229, USA.

Se exploró la capacidad de la melatonina y varios de sus metabolitos para reparar el ADN oxidado. Se encontró que todas las moléculas investigadas son capaces de reparar cationes radicalcentrados en guanina por transferencia de electrones a velocidades muy altas. También son capaces de reparar radicales centrados en carbono en 2'-desoxiguanosina (2dG) por transferencia de átomos de hidrógeno. Aunque este último se identificó como un proceso bastante lento, con constantes de velocidad que van desde 1.75 a $5.32 \times 10^{-2} \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$. También se predice que los metabolitos 6-hidroxymelatonina (6OHM) y 4-hidroxymelatonina (4OHM) reparan los aductos de OH en el anillo de imidazol. Las constantes de velocidad correspondientes para reparar los aductos de 8-OH-G son del orden de $10^4 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$ y están asistidos por una molécula de agua. Con estos resultados se sugiere que la melatonina y sus metabolitos pueden prevenir el daño en el ADN a través de diferentes rutas químicas.



Referencias:

Ninguna

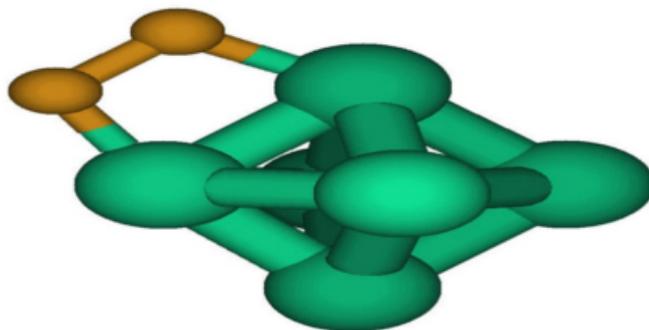


Structural transition and magnetic properties of $Ni_m Cu_n$ ($m + n \leq 6$) clusters: a DFT analysis

H. Rojas-Chávez, J. Ortiz Arreola, H. Cruz-Martínez, G. Carbajal Franco, D. I. Medina

Tecnológico Nacional de México, Instituto Tecnológico de Tláhuac II, Camino Real 625, Col. Jardines del Llano, San Juan Ixtayopan. Alcaldía Tláhuac, CDMX 13508, México, Tecnológico Nacional de México, Instituto Tecnológico de Toluca, División de Estudios de Postgrado e Investigación, México., Tecnológico de Monterrey, School of Engineering and Sciences, Atizapán de Zaragoza, Estado de México, C.P. 2926, México

This work reports the theoretical study of the structural, energetic, and magnetic properties of bimetallic clusters of $Ni_m Cu_n$ ($m + n \leq 6$). Moreover, the reactivity of the clusters using molecular oxygen was investigated. All calculations were developed using the density functional theory with the generalized gradient approximation. It was found that the magnetic properties of bimetallic clusters tended to decrease as the number of Cu atoms increases in the clusters. It was also demonstrated that spin density is mostly found on Ni atoms. Worth noting that via the mixing energy, the formation of bimetallic systems was favored. Finally, it was found that both the energy and adsorption site of molecular oxygen was greatly influenced by the shape and composition of bimetallic clusters.





Referencias:

Ninguna



Transferencia de carga y adsorción de hidrogeno en nano superficies de paladio soportado

C. Quintanar, R. Caballero, M. Ugalde, M. Ramos,, E. Chavira, H. Cruz-Manjarrez, F. Espinoza

1 Universidad Nacional Autónoma de México, Departamento de Física, Facultad de Ciencias, México, 04510 México , 2 Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigación de Materiales, México, 04510 México, 3 Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Física, México, México , 4 Banco de México, Evaluación de Insumos, Calzada Legaria 691, Irrigación, México, 11500, México , 5 Centro de Investigación en Materiales Avanzados, Física de Materiales, Chihuahua, Chihuahua, 31136 México

En el área de la nano catálisis, las muestras aideales, son superficies de mono cristales con una alta pureza y pocos defectos¹. Estas superficies han sido usadas para realizar y modelar reacciones catalíticas¹ con buena correlación entre las muestras modelo y las obtenidas industrialmente². Pero, los catalizadores en la industria tienen poros y área de superficie grande. La meta es analizar teóricamente muestras bimetalicas que contengan defectos, poros, área superficial grande y la influencia del soporte. Se prepararon nano cristales de paladio Sol-Gel y nano superficies de plata por el método de "sputtering". Las muestras se caracterizaron con microscopía electrónica de alta resolución (HRTEM) y "energy dispersive x-ray spectroscopy (EDX)". De las micrografías HRTEM con el software ImageJ-NIH se obtuvieron las coordenadas XY de los átomos en las muestras de Pd y Ag. Se construyeron los modelos de las superficies de Pd y de Ag. La superficie teórica de Pd se colocó sobre la superficie de Ag y dejando las coordenadas Z de los átomos de Ag fijas se optimizó la geometría. Teniendo la geometría de sistema Pd/Ag optimizada, se hicieron los análisis de población carga: Bader, NBO, NPA, Mulliken, Löwdin, Becke, Voronoi y diferencias de densidades de carga. Todos los resultados indicaron que Ag transfiere carga al Pd. Los resultados de los estudios de adsorción de H₂ indicaron que las energías de adsorción del sistema Pd/Ag sobre la superficie de Pd eran mayores que sobre Ag.



Referencias:

F. Gao and D. W. Goodman, *Annu Rev Phys Chem* 2012, 63, 265

G. A. Somorjai, Y. M. Li, *Introduction to Surface Chemistry and Catalysis*. New York: Wiley & Sons 771



Classification models of pesticides by Mode Of Action

Gabriela Gomez-Jimenez, Adriana Osnaya-Hernandez, Bruno Hernandez-Alvarado, José G. Rosas, Abraham Madariaga-Mazon, Karina Martinez-Mayorga,

Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México. Circuito Exterior S/N Ciudad Universitaria, Coyoacán CP 05410 Ciudad de México, México

La base de datos de Pesticidas (PPDB) contiene 2289 compuestos, clasificados por tipo de pesticidas y modo de acción (MOA). La base de datos T.E.S.T. (v. 4.2.1) contiene 7413 pesticidas. Usando la información contenida en la base de datos PPDB, desarrollamos modelos de clasificación basados en MOA, con el objetivo de clasificar compuestos contenidos en T.E.S.T. y otras bases de datos. Adicionalmente, modelos predictivos que usan estos datos se encuentran en desarrollo. Clasificaciones por modos de acción (MOA) pueden generar modelos locales con mayor precisión. En este estudio, presentamos un modelo de clasificación por MOA de pesticidas. La Pesticides Property DataBase (PPDB) fue utilizada como referencia. Modelos de clasificación de los pesticidas en PPDB fueron desarrollados a través de los MOAs más comúnmente utilizados. Tras el muestreo de clases, el algoritmo de random forest fue usado para la clasificación, y la validación externa se realizó con un mínimo de Kappa igual a 0.67.



Referencias:

Ninguna



Acoplamiento Molecular entre derivados de Triazoles y la proteína STAT3

Juan Carlos Dávila-Becerril, Gustavo Mondragón-Solórzano, Joaquín Barroso-Flores

Universidad de Ixtlahuaca CUI, Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM.

El cáncer es una de las enfermedades que causa al año 8.8 millones de defunciones, siendo una de las más letales en el mundo (1). Se ha encontrado que el cáncer se desarrolla bajo distintos mecanismos, por ejemplo, los procesos proteínicos involucrados en el metabolismo celular, como la Tirosina Quinasa (RTK) y el Transductor de Señal y Activador de la Transcripción (STAT) (2). Al combatir esta enfermedad con terapias convencionales como quimioterapia, radioterapia, las células cancerígenas son susceptibles a generar resistencia (3-5). Una alternativa para la resistencia celular es con tratamiento complementario, cuya función de este es reprimir los ciclos biológicos que desactivan la apoptosis. Los derivados de 1,2,3-triazoles presentan actividad sobre células cancerosas (6). En el presente trabajo, se estudió la inhibición de la proteína STAT3 con derivados de 1,2,3-triazoles con un sustituyente β -salicilato. En primera estancia 14 derivados de 1,2,3-triazoles fueron optimizados usando DFT en el nivel de teoría β B97X-D/6-311+G(d,p). Las geometrías optimizadas se usaron como punto de partida para el acoplamiento molecular con los archivos PDB de la proteína STAT3 (1BHH para el dominio SH2, 4ZIA para el dominio N-Terminal y 1BG1 para el dominio DBD). Los cálculos DFT se realizaron en Gaussian09 y el Acoplamiento molecular en MGLTools 1.5.6, resultando en un análisis de los modos de unión ligando- proteína más efectivos.



Referencias:

ORGANIZACION MUNDIAL DE LA SALUD. [Online].; 2018 [cited 2018 DICIEMBRE 15]. Available from: <https://www.who.int/cancer/es/>.

Zhao C, Li H, Lin H, Yang S, Lin J, Liang G. Feedback Activation of STAT3 as a Cancer Drug-Feedback Activation of STAT3 as a Cancer Drug-Resistance Mechanism. Trends Pharmacol Sci [Internet]. 2015;(November). Available from: <http://dx.doi.org/10.1016/j.tips.2015.10.001>

Jiang W, Ji M. Receptor tyrosine kinases in PI3K signaling: The therapeutic targets in cancer. Semin Cancer Biol [Internet]. 2019; Available from:

<https://doi.org/10.1016/j.semcancer.2019.03.006>

Neben CL, Lo M, Jura N, Klein D. Author ' s Accepted Manuscript. Dev Biol [Internet]. 2017; Available from: <https://doi.org/10.1016/j.ydbio.2017.10.017>

Yunus M, Jansson PJ, Kovacevic Z, Danuta S, Richardson DR. US CR. BBA - Gen Subj[Internet]. 2019; Available from: <https://doi.org/10.1016/j.semcancer.2019.03.006>.

Gup R, Erer O, Dilek N. A rapid synthesis of 2-substituted 1,2,3- triazole-1-oxide derivative starting from 4-(methyl)isonitrosoacetophenone and its Ni(II) complex: Characterization, DNA binding and cleavage properties. J Mol Struct. 2017;1129:142–51.



EXPLORACIÓN DEL ESPACIO FUNCIONAL DE UN FX GGA USANDO APRENDIZAJE DE MÁQUINA

Jorge L. Rosas-Trigueros, Alberto Vela

Departamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Unidad Zacatenco; Mexico Laboratorio Transdisciplinario de Investigación en Sistemas Evolutivos, SEPI de la ESCOM-Instituto Politécnico Nacional; México.

Simulaciones de sistemas químicos usando métodos ab initio producen resultados de notable precisión que ayudan a explicar y complementar resultados experimentales. Un método ampliamente utilizado para estudiar la estructura electrónica de moléculas, cúmulos, superficies y sólidos es la formulación de Kohn-Sham en la Teoría de Funcionales de la Densidad. La aproximación de gradiente generalizado (GGA por sus siglas en inglés) ofrece un compromiso atractivo entre precisión y costo computacional. En este esquema, el funcional de la energía de intercambio y correlación suele expresarse en términos de una función de amplificación $F_X(s)$, donde s es el gradiente adimensional. Las propuestas para F_X más usadas son las que ofrecen más ventajas en desempeño computacional, pero adolecen en la precisión de algunos cálculos como por ejemplo el calor de formación [1]. La Programación Genética es una herramienta del Aprendizaje de Máquina que parte de un conjunto de funciones y genera nuevas funciones mediante la combinación de porciones aleatorias de funciones seleccionadas o alterando una parte de una función seleccionada. La comparación y selección de las mejores funciones tiende a producir mejores funciones conforme este proceso itera [2]. El presente trabajo reporta los resultados de usar programación genética para explorar el espacio funcional de F_X para un funcional GGA. Las pruebas fueron realizadas en una versión modificada de deMon2k [3].



Referencias:

Pacheco-Kato, J. C., del Campo, J. M., Gázquez, J. L., Trickey, S. B., & Vela, A. A PW91-like exchange with a simple analytical form. *Chem. Phys. Lett.*, 2016, 651, 268-273.

McPhee, N. F.; Poli, R.; Langdon, W. B. *Field guide to genetic programming*, Lulu Enterprises, 2008.

deMon2k, Version 3, The deMon developers, Cinvestav, Mexico City (2011).



PCA de variantes de Neuraminidasa en presencia de ligandos

Rosaura Palma-Orozco, Jorge L. Rosas-Trigueros

Laboratorio Transdisciplinario de Investigación en Sistemas Evolutivos de la Escuela Superior de Cómputo del Instituto Politécnico Nacional; México.

La preocupante tasa de contagio y mortalidad de algunas formas de influenza han motivado el desarrollo de herramientas de diagnóstico y eliminación del virus involucrado, incluyendo fármacos antivirales y vacunas [1]. Una complicación en el combate a este padecimiento proviene de la capacidad del virus para presentar variantes en su genoma que consiguen superar los diagnósticos y fármacos disponibles [2]. Este proyecto pretende realizar un análisis de los componentes principales (PCA) de variantes de la Neuraminidasa del virus de la influenza, poniendo especial interés en las mutaciones que han mostrado resistencia a fármacos antivirales y notando los cambios que ocurren en presencia de ligandos [3]. La caracterización y posterior sistematización del espacio de componentes principales de la Neuraminidasa puede ser de utilidad en el desarrollo de fármacos para virus de la influenza que se presenten en el futuro. Se realizaron simulaciones de Dinámica Molecular de Neuraminidasas 1 y 9 (N1, PDB 3B7E, N9, PDB 6HCX) en presencia y ausencia del inhibidor de Neuraminidasa oseltamivir carboxilato. Se utilizó Gromacs con el campo de fuerzas Amber99sb-ILDN y solvente implícito GBSA a 300 K por 1 ns.



Referencias:

Jonathan P. Carrillo Vazquez et al., Journal of Molecular Recognition, 28(9), 553-564.

Elena Papaleo et al., Journal of Molecular Graphics and Modelling, 27(8), 889-899.

Meiling Dai et al., Journal of Virology, 13;91(9), DOI: 10.1128/JVI.00049-17.



FePt nanoclusters and Graphene/Iridium nano-structured surface, first principle study

J. Gutiérrez-Valdés, L. E. Díaz-Sánchez

Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de México, Instituto Literario 100, 50000 Toluca México, México

The FePt alloy, when chemically ordered in the $L1_0$ phase, is among the magnetic materials displaying the highest magnetic anisotropy constant (K around 7 MJ/m^3). Therefore, it is a perfect candidate for ultra-high density magnetic storage applications, provided nanoclusters can be prepared in such a high anisotropy phase [1-3]. Exist a lot of experiments of FePt nanoclusters, specifically in the Lyon group, France, they have recently grown in a size selected way 2 nm to 4 nm FePt nanoclusters [4,5]. For these reasons, in order to clarify the experiments and give a theoretical evidence of the physical properties of these nanoclusters, we have performed a first-principles theoretical study of the structure of monodomain $L1_0$ FePt nanoclusters. The nanocluster geometry is a perfect truncated octahedron and we varied the number of the atoms 38, 201 or 586 atoms. For these tree different sizes in this work we calculated the ground state structure, collinear magnetic properties and non-collinear magnetic properties.



Referencias:

P. Andreatza, V. Pierron-Bohnes, F. Tournus, C. Andreatza-Vignolle, and V. Dupuis, *S. Scie. Rep.* 70, (2015) 188.

A. T. N'Diaye, J. Coraux, T. N. Plasa, C. Busse, and T. Michely, *New Journal of Physics* 10, (2008) 043033.

S. Linas, F. Jean, T. Zhou, C. Albin, G. Renaud, L. Bardotti, and F. Tournus, *Scientific Reports* 5, (2015) 13053.

V. Dupuis, G. Khadra, S. Linas, A. Hillion, L. Gragnaniello, A. Tamion, J. Tuailon-Combes, L. Bardotti, F. Tournus, E. Otero, P. Ohresser, A. Rogalev, F. Wilhelm *J. Mag. Mater.* 383, (2015) 73.

N. Blanc, L.E. Diaz-Sanchez, A. Y. Ramos, F. Tournus, H. C. N. Tolentino, M. De Santis, O. Proux, A. Tamion, J. Tuailon-Combes, L. Bardotti, O. Boisron, G. M. Pastor, V. Dupuis, *Phys. Rev. B* 87, (2013) 155412.



DLPNO-CCSD(T). La nueva alternativa al golden standard en Estructura Electrónica Molecular

Aldo de Jesús Mortera-Carbonell, Luis Antonio Soriano-Agueda, Alberto Vela-Amieva

Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Cto. Exterior S/N, Ciudad Universitaria., 04510 Ciudad de México, México., Departamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Av. Instituto Politécnico Nacional 2508, 07360 Ciudad de México, México.

En este trabajo se estudió la eficiencia computacional de la nueva variante “Domain-based Local Pair Natural Orbitals” CCSD(T), una alternativa al método CCSD(T) en incluir la correlación electrónica dinámica utilizando menor cantidad de recursos computacionales. En este estudio teórico se determinó que el tamaño del sistema y la base auxiliar que emplea el algoritmo de cálculo en DLPNO-CCSD(T) juega un rol importante en su eficiencia. El tratamiento local de la correlación electrónica en éste método fue capaz de recuperar más del 98% de la energía de correlación para los sistemas estudiados, además que la cantidad de recursos computacionales fue mucho menor a comparación de CCSD(T). Por lo tanto, esta alternativa al “Golden Standard” puede ser empleada para obtener una buena calidad de la función de onda en sistemas moleculares grandes, con menos demanda de gastos computacionales.



Referencias:

Ninguna

