

Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN



Cinvestav

Programa de Doctorado en Ciencias en la especialidad de Ciencias Químicas

Documento de la idoneidad del núcleo académico a las LGAC del programa

Documento en el que se demuestre la idoneidad del núcleo académico para atender a estudiantes asociados a las LGAC del programa.

La planta académica que forma parte del Programa de Doctorado en Ciencias Químicas está constituida por 18 profesores de tiempo completo, todos con el grado de doctor, 17 adscritos al Sistema Nacional de Investigadores. Actualmente se desarrollan ocho líneas de generación y/o aplicación del conocimiento (LGACs) que son: química de heteroelementos y heterocíclica (QHE), electroquímica (FQ), termoquímica molecular (TM), química biológica (QB), química de coordinación y organometálica (QCO), química supramolecular (QS), química teórica (QT) y síntesis orgánica (SO). Los profesores participan, como máximo, en 3 diferentes LGACs mientras que los estudiantes sólo pueden estar asociados a una LGAC.

Las líneas divisorias entre algunas de las LGACs que se tenían, de repente se volvían artificiales ante la cercanía de temas y los estudios entre diferentes áreas. Por ello, se consideró deseable combinar las líneas de Química de heteroelementos y Química heterocíclica en una sola llamada Química de heteroelementos y heterocíclica. De la misma manera se combinaron las líneas de Química de Coordinación y Química Organometálica en la de Química de Coordinación y Organometálica.

Es importante señalar que los 18 profesores, son invitados de manera frecuente a participar en diversos comités de evaluación tanto del Conacyt, la SEP como de otras universidades nacionales y extranjeras. Esto es en sí mismo, un reconocimiento a la calidad académica de los integrantes del núcleo académico adscrito al Programa.

QUIMICA DE HETEROELEMENTOS y HETEROCICLICA: Se realiza investigación química de compuestos con elementos pertenecientes al grupo principal; con énfasis en la síntesis asimétrica de compuestos conteniendo los elementos boro, fósforo, estaño, silicio, selenio, antimonio y aluminio. Estas sustancias son usadas a su vez como ligantes con ácidos de Lewis y varios metales como los alcalinos y alcalinotérreos, así como la triada del zinc. También se estudian las interacciones intermoleculares no convencionales que presentan en el estado sólido y la síntesis asimétrica y estructura de nuevos heterocíclicos saturados, en combinación con la química covalente de los elementos representativos.

Los investigadores adscritos a esta LGAC, además de publicar trabajos en el área, han recibido reconocimientos a su experiencia en el tema al ser invitados a arbitrar artículos sometidos a revistas que publican sobre el tema tales como J. Organometal. Chem., Appl. Organomet. Chem., Journal of Phosphorus, Sulfur, and Silicon and Journal Molecular Structure, Main Group Metal Chemistry. También, la Dra. Angelina Flores Parra ha sido miembro del Comité Editorial de la revista Inorganica Chimica Acta. La Dra. Rosa Luisa Santillán, que trabaja en esta LGAC, obtuvo el Premio Nacional de Química Andrés Manuel del Río en el 2018.

SÍNTESIS ORGANICA: La investigación en síntesis orgánica que se desarrolla en el Departamento de Química se enfoca al desarrollo y optimización de metodologías para permitir la obtención de materias primas, intermediarios y productos finales novedosos a través de procesos sostenibles y de bajo impacto ambiental. Se proponen soluciones para problemas que involucren la modificación molecular de sustancias químicas, así como su análisis químico-estructural.

Los investigadores adscritos a esta LGAC, además de publicar trabajos en el área, han recibido reconocimientos a su experiencia en el tema al ser invitados a arbitrar artículos en revistas del más alto impacto en el área tales como el Beilstein Journal of Organic Chemistry, Tetrahedron and Tetrahedron Letters, Arkivoc, Natures Reviews Chemistry, European Journal of Organic Chemistry, Synthesis, Letters in Organic Chemistry, Chemical Communications, Synthetic Communications and Green Chemistry, entre otras. El Dr. Eusebio Juaristi, quien trabaja en esta LGAC, recibió el Premio Heberto Castillo, Por una Ciudad con Ciencia 2019, otorgado por la Secretaría de Educación, Ciencia, tecnología e Innovación, Gobierno Ciudad de México.

QUÍMICA SUPRAMOLECULAR. Esta es un área de investigación que se dedica al estudio de complejos multi-moleculares en aspectos tales como su auto ensamble, estructura, estabilidad y las interacciones intermoleculares que guían su formación. En el marco del Programa, se estudian dendrímeros, rotores moleculares y rotaxanos como precursores de nuevos materiales, máquinas, motores, sensores y dispositivos moleculares, a través de estímulos químicos, electroquímicos y fotoquímicos. El Dr. Tiburcio es miembro del Comité Editorial de la Revista Supramolecular Chemistry.

QUÍMICA DE COORDINACIÓN Y ORGANOMETÁLICA: La investigación sobre química de coordinación que se realiza dentro del Programa tiene varias vertientes. Entre estos, se estudian complejos de ligantes de interés biológico, así como el estudio de derivados de péptidos, con el fin de entender el papel que juegan algunos metales en el desarrollo de diversas enfermedades. Un tema más reciente que se está estudiando es el fenómeno de equilibrio de espín que presentan algunos compuestos de coordinación.

En la rama de compuestos organometálicos, los estudios van enfocados en la síntesis, aspectos estructurales y reactividad de diversos compuestos organometálicos; con énfasis en aquellos que contienen ligantes acíclicos heterodienilo, análogos a los clásicos alilo y ciclopentadienilo con metales de transición, así como cúmulos metálicos carbonílicos de hierro, rutenio y osmio. Especial interés se tiene en la activación de moléculas pequeñas mediante estos complejos.

Los profesores adscritos a esta LGAC son invitados a evaluar artículos en las revistas Organometallics, Inorganic Chemistry, European Journal of Inorganic Chemistry Journal of Organometallic Chemistry and Polyhedron.

ELECTROQUÍMICA: En esta área se estudia la cinética y el mecanismo de diversas reacciones electroquímicas, tales como la reacción de reducción de oxígeno, oxidación de hidrógeno, la química

redox de quinonas, así como de compuestos organometálicos. Se desarrollan celdas de combustible que son utilizadas en la construcción de dispositivos de baja potencia. Se producen electrodos modificados de carbono para su utilización como sensores. Así mismo se realizan estudios de electroquímica supramolecular.

Los profesores participan en la evaluación de proyectos de sustentabilidad energética y realizan frecuentemente arbitrajes para las revistas *Electrochimica Acta*, *ChemElectroChem*, *Electrochemical Communications*, *J. Electroanalytical Chemistry* y *Langmuir*.

QUÍMICA BIOLÓGICA: La química biológica es el área de la química que se enfoca a estudiar sistemas biológicos a nivel molecular. Es altamente multidisciplinaria y aplica conceptos de química orgánica, inorgánica, fisicoquímica, y química teórica para lograr una mejor comprensión de fenómenos y sistemas biológicos, tales como la estructura de proteínas y ácidos nucleicos, mecanismos de reacción enzimáticos, replicación celular, el rol de metales en la célula y en enfermedades degenerativas, entre otros temas. Otro aspecto bajo estudio es la Valoración de fármacos a través de modelado molecular, in vitro y en animal vivo.

Los profesores participantes son evaluadores de revistas como el *Inorganic Chemistry*, *Applied Organometallic Chemistry*, *Journal of Medicinal Research*. La Dra. Quintanar es Miembro del Comité Editorial Consultor (Editorial Advisory Board) de la revista *Journal of Biological Inorganic Chemistry (JBIC)*.

La Dra. Quintanar obtuvo el Premio de Investigación 2017 de la Academia Mexicana de Ciencias, en el área de Ciencias Exactas.

QUÍMICA TEÓRICA: Los temas principales de investigación en química teórica giran alrededor del desarrollo, implementación computacional (programa deMon2k) y aplicación a sistemas químicos muy diversos, de la teoría de funcionales de la densidad (DFT). Se cubren aspectos fundamentales como el desarrollo de funcionales, el papel de la densidad auxiliar dentro del marco de la teoría de Kohn-Sham, la teoría de reactividad química y la naturaleza del enlace químico.

Los profesores que participan en esta LGAC son miembros reconocidos de la comunidad nacional e internacional de la química teórica. Coordinan simposios en el tema además de ser editores invitados en diversas revistas para la edición de números especiales.

TERMOQUÍMICA MOLECULAR: Los grupos de termoquímica molecular correlacionan las funciones termodinámicas experimentales de un compuesto con su estructura molecular. La información generada permite elucidar la estabilidad de fullerenos, porfirinas o complejos supramoleculares; calibrar cálculos de química computacional o evaluar el poder calorífico de combustibles. Los resultados usualmente son integrados a la base de datos del NIST.

La siguiente tabla presenta la distribución de profesores del núcleo académico por LGAC.

| Distribución de profesores por LGAC | | | | | | | | | |
|---|------------|-----------|-----------|------------|-----------|-----------|-----------|-----------|---------------------------------|
| Profesor | QHH | SO | QS | QCO | EQ | QB | QT | TM | Número de LGACs/profesor |
| Ariza Castolo Armando | | x | | | | | | | 1 |
| Calaminici Patrizia | | | | | | | x | | 1 |
| Flores Parra María Angelina | x | | | | | | | | 1 |
| González Bravo Felipe de Jesús | | | x | | x | | | | 2 |
| Luján Montelongo Jesús Armando | | x | | | | | | | 1 |
| Juaristi y Cosío Eusebio | | x | | | | x | | | 2 |
| Köster Schliemann Andreas | | | | | | | x | | 1 |
| Mancilla Percino Teresa | x | x | | | | x | | | 3 |
| Olguín Talavera Juan Leopoldo | | | | x | x | | | | 2 |
| Paz Sandoval María de los Ángeles | | | | x | | | | | 1 |
| Quintanar Vera Liliana | | | | x | | x | | | 2 |
| Rojas Aguilar Aarón | | | | | | | | x | 1 |
| Rosales Hoz María del Jesús | | | | x | | | | | 1 |
| Santillán Baca Rosa Luisa | x | x | x | | | | | | 3 |
| Solorza Feria Omar | | | | | x | | | | 1 |
| Tiburcio Báez Jorge | | | x | | | | | x | 1 |
| Torres Gómez Luis Alfonso | | | | | | | | x | 2 |
| Vela Amieva Alberto Marcial | | | | | | x | x | | 2 |
| Total profesores por LGAC = | 3 | 5 | 3 | 4 | 3 | 4 | 3 | 3 | |
| Total estudiantes asociados por LGAC = | 2 | 10 | 2 | 3 | 2 | 3 | 6 | 2 | |

QHH: Química de Heteroelementos y heterocíclica

SO: Síntesis Orgánica

QS: Química Supramolecular

QCO: Química de Coordinación y Organometálica

EQ: Electroquímica

QB: Química Biológica

QT: Química Teórica

TM: Termodinámica Molecular

En el período 2017-julio 2021, se publicaron 213 artículos en revistas indizadas, 6 capítulos de libro y se presentaron 3 patentes. En alrededor del 40% de las publicaciones y capítulos de libro participan estudiantes del Programa.