

# Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN



**Cinvestav**

Programa de Doctorado en Ciencias en la especialidad de Ciencias Químicas

**Relación de la participación de los estudiantes en actividades para generar investigación-desarrollos tecnológicos-innovación**

**A continuación, se enlistan los productos de investigación del período 2017-2021, que cuentan con la participación de estudiantes del Programa. Los nombres de los estudiantes se encuentran en letras negras.**

## Artículos:

T. O. Villaseñor-Granados, **P. Montes-Tolentino**, **G. Rodríguez-López**, S. A. Sánchez-Ruiz and A. Flores-Parra. Structural analysis of tris (5-methyl- [1,3,5]-dithiazinan-2-yl)stibine, its reactions with chalcogens. Intramolecular chalcogen-bonding interactions. J. Mol. Struct. 1200: 127050: 2020.

**P. Montes-Tolentino**, **G. Rodríguez-López**, S. A. Sánchez-Ruiz, T. O. Villaseñor-Granados and A. Flores-Parra. Structural analysis of (5-methyl-[dithiazinan-2-yl])phosphines and their oxides. N-Borane adducts as conformational probes. Inorganica Chimica Acta 482: 420-430: 2018.

**M. Pérez Venegas**, **M. M. Téllez Cruz**, O. Solorza-Feria, A. López Munguía, E. Castillo and E. Juaristi. Thermal and Mechanical Stability of Immobilized Candida Antarctica LipaseB an Approximation to Mechanochemical Energetics in Enzyme Catalysis. ChemCatChem 12(803): 81: 2020. <https://doi.org/10.1002/cctc.201901714>.

**C. Cruz-Hernández**, J. M. Landeros and E. Juaristi. "Multifunctional Phosphoramidate-(S)-proline Derivatives as Efficient Organocatalysts in Asymmetric Aldol and Michael Reactions". New J. Chem. 43: 5455-56465: 2019.

**O. Sánchez-Antonio** and E. Juaristi. "Synthesis of a New Chiral Organocatalyst Derived from (S)-Proline Containing a 1,2,4-Triazolyl Moiety and Its Application in the Asymmetric Aldol Reaction. Effect of Water". Tetrahedron Lett. 60: 151128: 2019.

C. G. Ávila-Ortiz, **M. Pérez Venegas**, **J. Vargas Caporali** and E. Juaristi. "Recent Applications of Mechanochemistry in Enantioselective Synthesis". Tetrahedron Lett. 60: 1749- 1757: 2019.

**C. Cruz-Hernández**, P. E. Hernández-González and E. Juaristi. "(R)- and (S)-Proline-Derived Chiral Phosphoramidates as Organocatalysts for the Enantiodivergent Aldol Reaction of Isatins with Cyclohexanone in the Presence of Water". Synthesis 50: 1827-1840, 2018.

**C. Cruz-Hernández**, P. E. Hernández-González and E. Juaristi. "Proline-Glycine Dipeptidic Derivatives of Chiral Phosphoramidates as Organocatalysts for the Enantiodivergent Aldol Reaction of Arylaldehydes and Isatins with Cyclohexanone in the Presence of Water". Synthesis 50: 3445-3459: 2018. 1827-1840: 2018.

**C. Cruz-Hernández**, E. Martínez-Martínez, P. E. Hernández-González and E. Juaristi. "Synthesis of a New N-Chiral Diamino-phosphoryl N-(2S)-2-pyrrolidinylmethyl-thiourea as an Organocatalyst for the Stereoselective Michael Addition of Cyclohexanone to Nitrostyrenes and

Chalcones-Applications in Cascade Processes for the Synthesis of Polycyclic Systems". *Eur. J. Org. Chem.* : 6890-6900: 2018.

A. R. Hernández-Martínez, J. A. Luján-Montelongo, **C. Silva-Cuevas**, J. D. Mota-Morales, M. Cortez-Valadez, A. de J. Ruiz-Baltazar, M. Cruz and J. Herrera-Ordoñez. Swelling and methylene blue adsorption of poly (N,N-dimethylacrylamide-co-2-hydroxyethyl methacrylate) hydrogel. *React. Funct. Polym.* 122: 75 - 84: 2018.

J. A. Luján-Montelongo, H. L. Mendoza-Figueroa, **C. Silva-Cuevas**, A. C. Sánchez-Chávez, L. A. Polindara García, S. Oliveros-Cruz and M. D. Torres-Cardona. Highly regioselective enzymatic synthesis of lutein-3-monoesters. *Tetrahedron Lett.* 59(46): 4096–4101: 2018.

**M. Pérez-Venegas** and E. Juaristi. Mechanoenzymatic Resolution of Racemic Chiral Amines, A Green Technique for the Synthesis of Pharmaceutical Building Blocks. *Tetrahedron* 74: 6453-6458: 2018.

A. L. Ramos-Jacques, J. A. Luján-Montelongo, **C. Silva-Cuevas**, M. Cortez-Valadez, M. Estévez and A. R. Hernández-Martínez. Lead (II) removal by poly(N,N-dimethylacrylamide-co-2-hydroxyethyl methacrylate). *Eur. Polym. J.* 101: 262-272: 2018

**C. Silva-Cuevas**, E. Paleo, D. F. León-Rayó and J. A. Lujan-Montelongo. An expeditious and efficient bromomethylation of thiols: enabling bromomethyl sulfides as useful building blocks. *RSC Adv* 8(43): 24654-24659: 2018.

**J. Vargas-Caporali**, A. van der Lee, G. Dewynter and E. Juaristi. Synthesis of Diastereomeric Pyrrolidine Sulfamides via Anchimerically Assited Nucleophilic Substitution and Reaction. *Let. Org. Chem.* 15: 352-358: 2018.

**J. Vargas-Caporali** and E. Juaristi. "Determination of Enantioselectivities by Means of Chiral Stationary Phase HPLC in Order to Identify Effective Proline-Derived Organocatalysts". *J. Brazilian Chem. Soc.* 29: 896-915: 2018. ISBN 0103-5053.

**A. Obregón-Zúñiga**, M. Guerrero-Robles and E. Juaristi, Chiral Imidazolium Ionic Liquids Derived from (S)-Prolinamine as Organocatalysts in the Asymmetric Michael Reaction and Michael-Aldol Cascade Reaction under Solvent-Free Conditions. *Eur. J. Org. Chem.* (2017) 2692-2697.

**A. Obregón-Zúñiga** and E. Juaristi. (2S,4R)-Hyp-(S)-Phe-OMe dipeptide supported on imidazolium tagged molecules as recoverable organocatalysts for asymmetric aldol reactions using water as reaction medium. *Tetrahedron.* (2017) 73: 5373-5380. 0040-4020.

**A. Obregón-Zúñiga**, M. Milán, and E. Juaristi. Improving the Catalytic Performance of (S)-Proline as Organocatalyst in Asymmetric Aldol Reactions in the Presence of Solvate Ionic Liquids. Involvement of a Supramolecular Aggregate. *Org. Lett.* (2017) 19: 1108-1111. 1523-7060.

**M. Pérez-Venegas**, G. Reyes-Rangel, A. Neri, J. Escalante and E. Juaristi. Mechanochemical enzymatic resolution of N-benzylated- $\beta$ -amino esters. *Beilstein J. Org. Chem.* (2017) 13: 1728-1734. 1860-5397.

G. Reyes-Rangel, **J. Vargas-Caporali** and E. Juaristi. Asymmetric Michael addition reaction organocatalyzed by stereoisomeric pyrrolidine sulfinamides under neat conditions. A brief study of self-disproportionation of enantiomers. *Tetrahedron.* (2017) 73: 4707-4718. 0040-402

**C. Silva-Cuevas**, C. Pérez-Arrieta, L. A. Polindara García and J. A. Lujan-Montelongo. Sulfonyl halide synthesis by thiol oxyhalogenation using NBS/NCS – iPrOH. *Tetrahedron Lett.* (2017) 58: 2244 – 2247.

**J. Vargas-Caporali** and E. Juaristi. Fundamental Developments of Chiral Phase Chromatography in Connection with Enantioselective Synthesis of  $\beta$ -Amino Acids. *Isr. J. Chem.* (2017) 57: 896-912. 0021- 2148

M. E. Ochoa, R. Arcos-Ramos, **P. I. Ramírez-Montes**, H. Hopfl, M. A. Leyva, N. Farfán and R. Santillán. Asymmetric Molecular Rotors Based on Steroidal Fragments. *Organic Building Blocks Displaying | Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN Anuario 2019* 756 Versatile Supramolecular Steroid-Stacking Interactions. *Crystal Growth and Design* (19): 6114-6126: 2019.

**R. A. Luna-Ixmatlahua**, A. Carrasco-Ruiz, R. Cervantes, A. Vela and J. Tiburcio. An Anionic Ring Locked into an Anionic Axle: A metastable Rotaxane with Chemically Activated Electrostatic Stoppers. *Chemistry - A European Journal.* 25: 10042- 10047: 2019.

**O. Cruz Vásquez**, L. J. Bernal Sánchez, R. Cervantes, J. Tiburcio and A. Rojas. Energetics and the molecular structure of an ion-paired supramolecular system in water. *Physical Chemistry Chemical Physics.* (2017) (19): 19334-19340.

**D. Hernández Melo**, R. Cervantes and J. Tiburcio. Shuttling Motion in a Host Guest Complex Triggered by Spiropyran to Merocyanine Reversible Chemical Transformation. *The Journal of Organic Chemistry.* (2017) (82): 4484-4488.

**D. Plaza-Lozano**, A. Conde-Gallardo and J. Olguín. Spin Crossover vs. High-Spin Iron(II) Complexes in N4S2 Coordination Sphere Containing Picolyl-Thioether Ligands and NCE (E=S, Se and BH3) Co-Ligands. *Europ. J. Inorg. Chem.* . Chem. 2021, 2846-2856.

**J. L. Silva-Sánchez**, V. González-López, M. A. Leyva and M. J. Rosales-Hoz. Unusual  $h^1(S)$  coordination of dibenzothiophene to trinuclear acetylide clusters  $[(\mu-H)M_3(CO)_9(CCSiMe_3)]$  (M=Ru, Os). *J. Organometal. Chem.* (2021) 121766.

**A. Reyna-Madrigal**, M. Cervantes-Vásquez, N. Ortiz-Pastrana and M. A. Paz-Sandoval. Cyclooctadiene iridium complexes with phosphine, oxoand aza-pentadienyl ligands. *Journal of Organometallic Chemistry* 930(121600): 1 - 17: 2020.

**D. Plaza Lozano**, D. Morales Martínez, F. J. González and J. Olgúin. Homoleptic Mononuclear Tris Chelate Complexes of FeII CoII NiII and ZnII Based on a Redox Active Imidazolyl 2 thione Ligand Structural and Electrochemical Correlation. *Eur. J. Inorg. Chem.* 2020 : 1562-1573: 2020.

A. Reyna-Madriral, N. Ortiz-Pastrana and M. A. Paz-Sandoval. "Cyclooctadiene iridium complex with phosphine and pentadienyl ligands". *J. Organometal. Chem.* 886: 13-6: 2019.

**V. González López, I. Torres Sandoval**, A. L. Carrasco González, A. Elías Jiménez, M. J. Rosales Hoz, J. Cruz Borbolla, F. J. Zuno Cruz, G. Sánchez Cabrera and C. Jardínez. CO substitution vs C-Si cleavage in the reactions of (u-H)  $M_3(CO)_9(CCSiR_3)$  (M=Ru, R=Me, Ph; M=Os, R=Me) with tertiary phosphines: Experimental and theoretical studies. *Inorganica Chimica Acta* 492: 8-17.: 2019.

**J. I. de la Cruz-Cruz** and M. A. Paz-Sandoval. Examination of different nucleophiles binding to the cationic [(HMB)Ru(1-5- $\eta$ -butadienesulfonyl)]X (X = OTf, BF<sub>4</sub>) complexes: Novel phosphonium-1-3- $\eta$ -butenyl sulfonyl complexes and cationic N, S, O adducts. *J. Organometal. Chem.* (2017) 834: 28-39.

**A.S. Estrada-Montaño**, O. R. Reyes-López, **V. González-López**, M. A. Leyva, A. L. Carrasco, A. Vela, and M. J. Rosales-Hoz. The reactions of [(m-H)M<sub>3</sub>(CO)<sub>9</sub>(CCSiMe<sub>3</sub>)] (M=Fe, Ru) with thiols: Cleavage of M-M and formation of M-S bonds in isomeric structures. *Journal of Organometallic Chemistry*, (2017) 849: 31-37.

**D. Morales-Martínez**, L. Lartundo Rojas and F. J. González. Mechanistic Aspects on the Electrografting of Carbon Surfaces by Oxidation of Carboxylates Bearing Unsaturated Groups. *ChemElectroChem* 7: 4431-4439: 2020. doi.org /10.1002/celc.202001096.

H. Cruz Martínez, **M.M. Téllez- Cruz**, O. Solorza-Feria, P. Calaminici and D.I. Medina. Catalytic activity trends from pure Pd nanoclusters to M PdPt (M 1 4 Co, Ni, and Cu) core shell nanoclusters for the oxygen reduction reaction: A first principles analysis. *International Journal of Hydrogen Energy* : 3738-3745: 2020.

H. M. Alfaro López, M. A. Valdés Madriral, H. Rojas Chávez, H. Cruz Martínez, M. A. Padilla Islas, **M. M. Téllez Cruz** and O. Solorza-Feria. A trimetallic Pt<sub>2</sub>NiCo/C electrocatalyst with enhanced activity and durability for oxygen reduction reaction. *Catalysts* 10(170): 2020. <https://doi.org/10.3390/catal10020170>.

T. O. Villaseñor-Granados, **G. Rodríguez-López**, I. Ramos-García, **D. Morales-Martínez**, F. J. González and A. Flores-Parra. Linkage between fluorescence and electrochemical properties of imidazolium compounds in acetonitrile solution. *ChemPhysChem* 21: 1177-1183: 2020.

V. Ramírez-Delgado, **D. Morales-Martínez** and F. J. González. Associative and Proton Transfer Effects on the Voltammetric Behaviour of Chemically Grafted Films Bearing Nitrophenyl Groups. *Electroanalysis* 32: 404-411: 2020. DOI:10.1002/elan201900367.

**D. Martínez Casillas**, O. Solorza-Feria, S. Mollá, Álvaro Montero, A. García Bernabé and V. Compañ. Polymer modified sulfonated PEEK ionomers membranes and the use of Ru<sub>3</sub>Pd<sub>6</sub>Pt as cathode catalyst for H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> fuel cells. *Int. J. Hydrogen Energy* 44: 205- 305: 2019.

E. Flores Rojas, **O. X. Guerrero Gutiérrez** and O. Solorza-Feria. Versatile synthesis of CuPt nanocatalysts for oxygen reduction reaction. *Materials Letters* 239: 98-101: 2019. doi.org/10.1016/j. matlet.2018.12.072.

E. Terán Salgado, D. Bahena Uribe, P. A. Márquez Aguilar, **J. L. Reyes Rodríguez**, R. Cruz Silva and O. Solorza-Feria. Platinum nanoparticles supported on electrochemically oxidized and exfoliated graphite for the oxygen reduction reaction. *Electrochimica Acta* 298: 172- 185: 2019. doi.org/10.1016/j. electacta.2018.12.057.

H. Cruz Martínez, **M. M. Téllez Cruz**, H Rojas Chávez, C. A. Ramírez Herrera, P. Calaminici and O. Solorza-Feria. NiPdPt trimetallic nanoparticles as efficient electrocatalysts towards oxygen reduction reactions. *Int. J. Hydrogen Energy* 44: 12463-12469: 2019. doi.org/10.1016/j. ijhydene.2018.07.142.

H. Cruz Martínez, **M. M. Téllez Cruz, O. X. Guerrero Gutiérrez**, C. A. Ramírez Herrera, M. G. Salinas Juárez, A. Velázquez Osorio and O. Solorza-Feria. Mexican contributions for the improvement of electrocatalytic properties for the oxygen reduction reaction in PEM fuel cells. *Int. J. Hydrogen Energy* 44: 12477-12491: 2019. doi.org/10.1016/j. ijhydene.2018.05.168.

M. Pérez González, S. A. Tomás, J. Santoyo Salazar, S. Gallardo Hernández, **M. M. Téllez Cruz** and O. Solorza-Feria. Solgel synthesis of Ag-loaded TiO<sub>2</sub>-ZnO thin films with enhanced photocatalytic activity. *Journal of Alloys and Compounds* 779: 908-917: 2019. doi.org/10.1016/j. jallcom.2018.11.302.

O. Solorza-Feria, E. Flores Rojas, H Rojas Chávez, **M. M. Téllez Cruz, J. L. Reyes Rodríguez**, J. G. Cabañas Moreno and P. Calaminici. A combined DFT and experimental investigation of Pt-decorated CoNi nanoparticles for the oxygen reduction reaction. *Electrocatalysis* 2018(9): 662-67: 2018.

**J. L. Reyes Rodríguez**, H. Cruz Martínez, M. M. Téllez Cruz, A. Velázquez Osorio and O. Solorza-Feria. *Fuel Cell Technologies. Sustainable Energy Technologies* : 229-244: 2018. ISBN 9781138034389.

H. Cruz Martínez, **L. López Sosa**, O.Solorza-Feria and P. Calaminici. First-principles investigation of adsorption and dissociation of molecular oxygen on pure Pd, Ni-doped Pd and NiPd alloy clusters. *Int. J. of Hydrogen Energy*. (2017) (42): 30310. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2017.08.041.

**F. Godínez Salomón**, C. P. Rhodes, **K. Suárez Alcantara**, Z. Qiushi, S. E. Canton, H. A. Calderon, J. L. Reyes Rodríguez, M. A. Leyva and O.Solorza-Feria. Tuning the Oxygen Reduction Activity and Stability of Ni(OH)<sub>2</sub>PtC Catalysts through Controlling Pt Surface Composition, Strain, and Electronic Structure. *Elsevier*. (2017) 247: 958-96.

**O. X. Guerrero Gutiérrez**, O. Solorza Feria and P. B. Balbuena. First-principles investigation of Pd<sub>3</sub>Bi as a catalyst for the oxygen reduction reaction. Elsevier 2017 42: 30359-30363.

**J. L. Reyes Rodríguez**, J. Escorihuela, A. García Bernabé, E. Giménez and O. Solorza Feria. Proton conducting electrospun sulfonated polyether ketone graphene oxide composite membranes. RSC Advances. (2017) 1039-1048.

**M. M. Tellez Cruz**, M. A. Padilla Islas, M. Pérez González and O. Solorza-Feria. Comparative study of different carbon-supported Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Pt catalysts for oxygen reduction reaction. Environ Sci Pollut Res. (2017) 24: 25682-25692

**F. P. Garrido González** and T. Mancilla Percino. Synthesis, docking study and inhibitory activity of 2,6-diketopiperazines derived from alpha-amino acids on HDAC8. Bioorganic Chemistry 102: 1-10: 2020. <https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2020.104080>.

**C. Sánchez López**, G. Rossetti, L. Quintanar and P. Carloni. Structural Determinants of the Prion Protein N-Terminus and Its Adducts with Copper Ions. International Journal of Molecular Sciences 20: 18: 2019. <https://doi.org/10.3390/ijms20010018>.

**J. A. Domínguez-Calva**, C. Haasse-Pettingell, E. Serebryany, J. A. King and L. Quintanar. A histidine switch for Zn-induced aggregation of gamma-crystallins reveals a metal-bridging mechanism that is relevant to cataract disease. Biochemistry 57: 4959-4962: 2018. <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.biochem.8b00436>.

**J. A. Domínguez-Calva**, M. L. Pérez-Vázquez, E. Serebryany, J. A. King and L. Quintanar. Mercury-induced aggregation of human lens gamma-crystallins reveals a potential role in cataract disease. J. Biol. Inorg. Chem. 23: 1105-1118: 2018. <https://doi.org/10.1007/s00775-018-1607-z>.

**C. Sánchez-López**, C. O. Fernández and L. Quintanar. Neuroprotective alpha-cleavage of the human prion protein significantly impacts Cu(II) coordination at its His111 site. Dalton Trans. 47: 9274-9282: 2018. <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2018/dt/c7dt03400h>.

**C. Sánchez-López**, L. Rivillas-Acevedo, O. Cruz-Vásquez and L. Quintanar. "Methionine 109 plays a key role in Cu(II) binding to His111 in the 92-115 fragment of the human prion protein". Inorg. Chim. Acta 481: 87-97: 2018. <https://doi.org/10.1016/j.ica.2017.09.046>.

A. de la Lande, A. Álvarez-Ibarra, K. Hasnaoui, F. Cailliez, X. Wu, T. Mineva, J. Cuny, P. Calaminici, **L. López-Sosa**, G. Geudtner, I. Navizet, C. García Iriepa, D. R. Salahub and A. M. Köster. Molecular Simulations with indeMon2k QM/MM, a Tutorial Review. Molecules (24): 1653: 2019.

**L. López Sosa**, H. Cruz Martínez, O. Solorza-Feria and P. Calaminici. Nickel and copper doped palladium clusters from a first-principles perspective. Int J Quantum Chem 119: 13: 2019.

M. Boningnee Pfennig, K. Gopal Dongol, G. M. Romero Boston, S. Schmitz, R. Wartchow, **J. D. Samaniego-Rojas**, A. M. Köster and H. Butenschön. Trifluoromethyl-Substituted

Benzocyclobutenone and Benzocyclobutenedione: The Structure Anomaly of (Benzocyclobutenedione) tricarbonylchromium Complexes. *Organometallics* (38): 3039: 2019.

**R. Quintero-Monsebaiz**, I. Mitxelena, M. Rodríguez-Mayorga, A. Vela and M. Piris. Natural orbital functional for spin-polarized periodic systems. *Journal of Physics-Condensed Matter* 31: 14042-14047: 2019.

**R. I. Delgado Venegas**, P. Calaminici and A. M. Köster. Mixed Second and Third Energy Derivatives from Auxiliary Density Perturbation Theory. *Molecular Physics* (114): 1367: 2019.

**A. Albavera-Mata**, J. L. Gázquez, S. B. Trickey, A. Vela and C. M. Zicovich-Wilson. Long-range exchange limit and dispersion in pure silica zeolites. *Theoretical Chemistry Accounts* 137(26): 1-9: 2018.

**U. Orozco-Valencia**, J. L. Gázquez and A. Vela. Reactivity of Idoles through the Eyes of a Charge-Transfer partitioning Analysis. *Acta Phys. -Chim. Sin.* 34(6): 692-698: 2018.

**U. Orozco-Valencia**, J. L. Gázquez and A. Vela. Global and local charge transfer in electron donor-acceptor complexes. *Journal of Molecular Modeling* 24: 250: 2018.

**U. Orozco-Valencia**, J. L. Gázquez and A. Vela. Role of Reaction Conditions in the Global and Local Two parabolas Charge Transfer Model. *The Journal of Physical Chemistry A* 122: 1796-1806: 2018.

W. H. Blades, A. C. Reber, S. N. Khanna, **L. López Sosa**, P. Calaminici, P. and A. M. Köster. Evolution of the Spin Magnetic Moments and Atomic Valence of Vanadium in VCu<sub>x</sub>434343, VAg<sub>x</sub>434343, and VAux<sub>x</sub>434343 Clusters (x=3-14). *J. Phys. Chem. A.* (2017) (121): 2990.

H. Cruz Martínez, **L. López Sosa**, O. Solorza-Feria and P. Calaminici. First-principles investigation of adsorption and dissociation of molecular oxygen on pure Pd, Ni-doped Pd and NiPd alloy clusters. *Int. J. of Hydrogen Energy.* (2017) (42): 30310. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2017.08.041.

**U. Orozco-Valencia**, J. L. Gázquez and A. Vela. Global and Local Partitioning of the Charge Transferred in the Parr-Pearson Model. *Journal of Physical Chemistry A.* (2017) 121: 4019-4029.

**U. Orozco-Valencia**, J. L. Gázquez and A. Vela. Donation and back-donation analyzed through a charge transfer model based on density functional theory. *Journal of Molecular Modeling.* (2017) 23: 207-215.

**F. Herrera-Castro** and L. A. Torres. Study of the solvation process of some pyrazole derivatives in three different solvents by solution calorimetry and IR spectroscopy: Unravelling solute-solvent interactions. *Journal of Molecular Liquids* 311, 2020, 113275.

**U. Galindo-García** and L. A. Torres. Crystal Structure at the Origin of the Thermal Stability and Large Enthalpy of Fusion and Sublimation Values of Calixarenes. *Cryst. Growth Des.* 2020, 20, 1302–1310.. <https://dx.doi.org/10.1021/acs.cgd.9b01562>.



**F. Herrera-Castro** and L. A. Torres. "Understanding the solvation process and solute-solvent interactions of imidazole compounds in three different solvents through solution calorimetry and  $^1\text{H}$  NMR". Journal of Molecular Liquids 2019(284): 232-240: 2019.

## Capítulos de Investigación Original publicados en extenso en libros especializados:

**C. Cruz-Hernández**, J. M. Landeros and E. Juaristi. Synthesis of Diazaphosphol-2-oxides and Their Derivatives: Applications in Asymmetric Synthesis. Italian Chemical society: Roma Italia 23: 324-339: 2019. Capítulo 16.

**J. L. Reyes Rodríguez**, H. Cruz Martínez, **M. M. Téllez Cruz**, A. Velázquez Osorio and O. Solorza-Feria. Fuel Cell Technologies. Sustainable Energy Technologies: 229-244: 2018. ISBN 9781138034389.

## Trabajos presentados en Congresos:

*Los siguientes trabajos fueron presentados en la 6a Reunión de Resonancia Magnética Nuclear Experimental, modalidad virtual 2020-11-12 - 2020-11-13 Oaxaca, México:*

**A. Hernández Tanguma** y A. Ariza Castolo. Aplicaciones recientes de los métodos de Coherencia Cuántica Múltiple Intermolecular (IMQC).

A. Ariza Castolo y **O. J. Quintana Romero**. Experimentos foto-CIDNP en RMN.

*Memorias publicadas en extenso en las Memorias del XXXIV Congreso de la Sociedad Mexicana de Electroquímica 2019-06-02 - 2019-06-06 Querétaro, Querétaro.*

**D.E. Ramírez Chan** y F.J. González Bravo. Influencia del catión del electrolito de soporte sobre la modificación covalente de superficies de carbono con grupos nitrofenilo. p. 1367-1376

**D.E. Ramírez Chan** y F.J. González Bravo. Formación de películas electrocatalíticas sobre carbono mediante la autooxidación de iones ferrocenoheptanoato. p. 1428- 1438.

*Los siguientes trabajos fueron presentados en la 5a. Reunión de Resonancia Magnética Nuclear Experimental Escuela Internacional de RMN 2019-09-05 - 2019-09- 06 Cuernavaca Morelos, México:*

**A. Hernández Tanguma** y A. Ariza Castolo. Medición de las constantes de acoplamiento  $1J_{\text{CH}}$  de 1,3-dibencil-2- (3-nitrofenil)imidazolidina mediante métodos en una dimensión.

A. F. Cano Pérez, K.Mota Díaz, A. Portillo Morales, J. Camacho Ruiz, **A. Hernández Tanguma** y A. Ariza Castolo. Demostración por RMN de puentes de hidrógeno, equilibrio tautomérico e inclusión.

*Los siguientes trabajos fueron presentados en el 54° Congreso Mexicano de Química y 38° Congreso Nacional de Educación Química 2019-09-30 - 2019-10-03 Complejo Cultural Universitario BUAP, Puebla, Puebla México:*

**A. E. Cruz-Jiménez**, P. E. Hernández-González y J. A. Lujan-Montelongo. Desoxianación de compuestos 1,3-dicarbonílicos utilizando cianoformatos de alquilo. p. 183-187.

**C. Silva Cuevas** and J. A. Luján Montelongo. Studies towards the installation of quaternarized stereocenters on nitriles. p. 199-202.

**O. A. Valle González**, R. Sánchez López y **J. A. Luján Montelongo**. Tioacetatos como S-nucleófilos subyugados en reacciones tipo Mannich. p. 203-238.

**J. L. Silva Sánchez** y M. J. Rosales Hoz. Estudio Experimental de Reactividad de Cúmulos Trinucleares de Rutenio con Ligantes Derivados de Furanos y Tiofenos.

**F. P. Garrido González** y T. Mancilla Percino. Reconocimiento molecular por docking entre una serie de 2,6-piperazindionas derivadas de (S)-alfa-aminoácidos y los residuos de aminoácidos del sitio catalítico de la HDAC8. p. 70-75.

**J. E. Guzmán Ramírez** y T. Mancilla Percino. Síntesis, caracterización de N-aminoftalimidias derivadas de alfa-aminoácidos y su evaluación teórica como inhibidoras de la historia desacetilasa 8 (HDAC8). p. 76-81.

*Los siguientes trabajos fueron presentados en el 10° Encuentro de Química Inorgánica (EQI 2019) 2019-06-25 - 2019-06-28 Ixtaczoquitlán, Veracruz, México:*

**P. Montes-Tolentino**, S. A. Sánchez-Ruiz, T. O. Villaseñor-Granados y A. Flores-Parra. Síntesis y análisis estructural de la tris(5-metil- [1,3,5]-ditiazinan-2-il)estibina y bisditiazinanilsulfuro y selenuro.

T. O. Villaseñor Ganados, **G. Rodríguez López** y A. Flores Parra. Elucidación computacional del mecanismo de reacción en la condensación A3 para la generación de propargilaminas catalizada por carbenos de plata.

*Los siguientes trabajos fueron presentados en la XV Reunión de la Academia Mexicana de Química Orgánica 2019-04-08 - 2019-04-12 Cuernavaca, Morelos, México*

**O. J. Quintana Romero**, A. J. Ballesteros, M. Guerrero Vélez, I. León López y A. Ariza Castolo. (Diacetoxiyodo)benceno, desde fotocatalizadores hasta reacciones de oxidación.

*Los siguientes trabajos fueron presentados en el 53° Congreso Mexicano de Química y 37° Congreso Nacional de Educación Química 2018-10-02 - 2018- 10-05 Instituto Politécnico Nacional. Ciudad de México, México:*

E. Cortés-Román, **C. Silva-Cuevas** and J. A. Luján-Montelongo. Design and synthesis of nitrilic building blocks derived from the chiral pool. p. 840-842. ISSN: 2448-914X.

A. Salazar-Bello, **O. A. Valle-González** and J. A. Luján-Montelongo. Sulfonylnitrile-based Olefination for Accessing Structurally Diverse Alkenyl Nitriles. p. 855-856. ISSN: 2448-914X.

C. Silva-Cuevas, H. L. Mendoza-Figueroa, A. C. Sánchez-Chávez, L. A. Polindara-García, S. Oliveros-Cruz, M. D. Torres-Cardona and J. A. Luján-Montelongo. A Regioselective Synthesis of Lutein Monoesters. p. 683-685. ISSN: 2448- 914X.

**O. A. Valle-González** and J. A. Luján-Montelongo. Stereoselective Synthesis of Alkenylisonitriles through Ramberg-Bäcklund olefination. p. 905-908. ISSN: 2448- 914X.

**J. L. Silva Sánchez**, M. J. Rosales Hoz, J. Nochebuena, U. Orozco Valencia y A. M. Vela Amieva. Estudio teórico y experimental de reactividad de cúmulos trinucleares de rutenio y osmio con ligantes derivados de furanos y tiofenos.

*Los siguientes trabajos fueron presentados en la XIV Reunión de la Academia Mexicana de Química Orgánica 2018-03-22 - 2018-03-23 Mérida, Yucatán:*

**O. J. Quintana Romero** y A. Ariza Castolo. Método fácil y simple para obtener acetoxicetonas.

Los siguientes trabajos fueron presentados en el 4a Reunión de Resonancia Magnética Nuclear Experimental "Escuela Internacional de RMN" 2018- 09-06 - 2018-09-08 Mineral de la Reforma, Hgo., México:

A.Ariza Castolo y **O. J. Quintana Romero**. Experimentos de resonancia magnética nuclear óptico.

*El siguiente trabajo fue presentado en el XVIII International Congress of the Mexican Hydrogen Society 2018-09-18 - 2018-09-23 ESIQIE-IPN:*

**M. M. Téllez Cruz**, M. A. Padilla Islas, H. Cruz Martínez, H. M. Alfaro López, M. G. Salinas Juárez and O. Solorza-Feria. Pt3Fe/C bimetallic alloy nanoparticles as electrocatalysts with improved activity for the oxygen reduction reaction.

*Los siguientes trabajos fueron presentados en el 52º Congreso Nacional de Química que tuvo lugar en Puerto Vallarta, Jal, México del 26 al 29 de septiembre de 2017.*

P. E. Hernández-González, A. Tapia-Pineda, **C. Silva Cuevas** y J. A. Luján Montelongo. A green approach for the deoxygenation of sulfoxides. p. 87-88.

**C. Silva-Cuevas** y J. A. Lujan-Montelongo. Stereochemical evaluation on alkylations of a potentially chiral nitrile building block. p. 89-90.

*Los siguientes trabajos fueron presentados en el IV Congreso Internacional de Química e Ingeniería Verde. Monterrey, N.L. México. (2017):*

**L. A. Obregón-Zúñiga**, M. Milán y E. Juaristi. Mejorando la Actividad Organocatalítica de la (S)- Prolina en Reacciones Aldólicas Asimétricas Empleando Líquidos Iónicos Solvato.

**L. A. Obregón-Zúñiga** y E. Juaristi. Nuevos Líquidos Iónicos Quirales de Imidazolio como Organocatalizadores en la Reacción Michael Asimétrica y en la Reacción Cascada Michael-Aldólica.

*Los siguientes trabajos fueron presentados en el Tercer Simposio de Tendencias Actuales en la Búsqueda y Desarrollo de Fármacos. Facultad de Química de la UNAM, Ciudad de México. (2017):*

**J. E. Guzmán Ramírez** y T. Mancilla Percino,. Síntesis, caracterización de tert-butoxiacetamidas derivadas de alfa-aminoácidos y su evaluación teórica como inhibidoras de la histona desacetilasa 8 (HDAC8). p. 84-86 y 87-89.

**J. E. Guzmán Ramírez**, C. R. Trejo Muñoz, E. Mera Jiménez y T. Mancilla Percino. Síntesis, caracterización de nuevos compuestos de boro derivados de isoindolinas y evaluación

*El siguiente trabajo fue presentado en la 18th International Conference on Biological Inorganic Chemistry (ICBICI8). Florianópolis, Brasil. (2017):*

**J. A. Domínguez-Calva**, E. Serebryany, C. Haasse-Pettingell, J. A. King y L. Quintanar. Copper- and zinc- induced aggregation of the human gamma crystallin proteins: Relevance to the bioinorganic chemistry of cataracts disease. Presentación de cartel. Premio al mejor cartel.

*Los siguientes trabajos fueron presentados en el 6º. Congreso de la rama de Fisicoquímica, Estructura y Función de Proteínas que tuvo lugar en Durango, México del 6 al 10 de noviembre de 2017:*

E. Martínez-Jurado, **J. A. Domínguez-Calva**, E. Serebryany, C. Haasse-Pettingell, J. A. King y L. Quintanar. Copper-induced aggregation of the human gamma C- and S-cystallin proteins: Relevance to cataracts disease.

**E. E. Rodríguez**, **T. Arcos-López**, L. Trujano-Ortiz, C. O. Fernández, F. J. González, A. Vela y L. Quintanar. Spectroscopic and redox studies of Cu(II) complexes at the N-terminal of alpha and beta synuclein proteins.

*Los siguientes trabajos fueron presentados en el 8º Encuentro de Química Inorgánica (EQI 2017) que tuvo lugar en Sonora, México del 5 al 8 de septiembre de 2017:*

A. Burgos-Pech, I. Ramos-García, **G. Rodríguez-López** y A. Flores-Parra, A. Síntesis de nuevas 1,3-(2- cloroalquil)-[1,3,2]-diazaborolinas.

B. López-Vázquez, I. Ramos-García, **G. Rodríguez-López** y A. Flores-Parra. Nuevas 1,3-dialquil-2- cloro-[1,3,2]-diazafosfolidinas: Síntesis y reactividad. p. 100

**P. Montes-Tolentino**, J. García-Escobar, S. A. Sánchez-Ruiz y A. Flores-Parra. Nuevos organofosforos y organoestibina multipodales derivados del 5-metil-[1,3,5]-ditiazinano. p. 33.

I. Ramos-García, **G. Rodríguez-López** y A. Flores-Parra. Síntesis y estudio de la reactividad de  $\beta$ -difencilfosfino-diazaborolidinas con compuestos del grupo principal. p. 105.

T.O. Villaseñor-Granados, **G. Rodríguez-López** y A. Flores-Parra. Estudio computacional de las interacciones intramoleculares débiles en heterociclos de nitrógeno y sus complejos con plata y boro. p. 30.