

LICENCIATURA EN QUÍMICA
PROYECTOS TERMINALES (Proyectos de Investigación a seis meses).
Líneas de investigación para proyectos terminales.

ÁREA DE CATALISIS (UEA: 2141152 Proyecto Terminal I de FQ y 2141153 Proyecto Terminal II de FQ) o como Servicio Social.

GRUPO 1: Nancy Martín y Margarita Viniegra (R-212)

- 1) Procesos de síntesis de catalizadores a base de óxidos de metales de transición.
- 2) Estudio de las propiedades fisicoquímicas de catalizadores a base de óxidos mixtos de hierro, níquel o cobre, a través de las técnicas de caracterización siguientes: difracción de Rayos X (XRD), Microscopía Electrónica (ME) o análisis por Temperatura Programada de Reducción (TPR).
- 3) Evaluación de propiedades de actividad y selectividad en catalizadores a base de óxidos de metales de transición a través de la técnica de cromatografía de gases, en reacciones de oxidación, deshidrogenación o deshidratación de alcoholes en fase gas.
- 4) Monitoreo y Análisis de partículas de Pt en el aire de la ZMCDM a través de análisis por cromatografía de líquidos (HPLC) (en colaboración con el Instituto de Ecología).

GRUPO 2: Virineya Bertín (R-216)

- 1) Estudios teóricos de reacciones catalíticas sobre metales de transición como Au, Pt, Pd y Rh. Se aprende a usar programas con aproximaciones relativistas. Entre las reacciones están las de oxidación y reducción (CO, NO, N₂O, entre otros). Otro tipo de reacciones es la obtención de hidrógeno a partir, por ejemplo, de CH₄ u otro hidrocarburo.

ÁREA DE BIOFISICOQUÍMICA (UEA: 2141105 Proyecto Terminal I de BFQ y 2141106 Proyecto Terminal II de BFQ) o como Servicio Social.

GRUPO 1: Rafael Zubillaga y Ponciano García (R-209)

El objetivo general de nuestro grupo de investigación es identificar y optimizar moléculas con actividad inhibitoria de enzimas de interés farmacológico, principalmente de parásitos y agentes infecciosos. Particularmente, nos interesa describir y comprender los procesos de asociación enzima-inhibidor a nivel atómico y determinar a la vez los parámetros termodinámicos de dichos procesos, para proponer modificaciones químicas que aumenten la afinidad del inhibidor. Para ello, hacemos uso de diversas herramientas computacionales de modelado molecular así como de técnicas espectroscópicas, calorimétricas y bioquímicas.

Proyectos:

- Determinar el sitio de unión de un ligando líder a su proteína diana mediante simulaciones de Dinámica Molecular.
- Caracterizar la termodinámica de unión de un ligando líder a su proteína diana utilizando Calorimetría de Titulación Isotérmica.
- Simular el acoplamiento molecular entre una enzima de interés farmacológico y una quimioteca de miles de compuestos, para identificar inhibidores potenciales.
- Implementar el método de Dicroísmo Circular inducido para determinar la afinidad de fármacos a ciclodextrinas.
- Determinar el tipo de inhibición de una enzima de interés farmacológico con ligandos líderes.

ÁREA DE ELECTROQUÍMICA: (UEA: 2141152 Proyecto Terminal I de FQ y 2141153 Proyecto Terminal II de FQ) o como Servicio Social.

Grupo 1: Ignacio González y Guadalupe Ramos (R-104)

Proyecto 1: Modificación de materiales de electrodo para Baterías Ion-Li (LIB)

La batería de Ion-Li (LIB) es una de las alternativas de mayor impacto para la producción y almacenamiento de energía eléctrica utilizando, la conversión de energía química. Aunque las LIB's tienen las mayores densidades energéticas (Wh/kg) de entre todas las baterías secundarias, esta densidad no es suficiente para proveer la autonomía necesaria (400 Km) a automóviles eléctricos. Esta limitación podría estar asociada a que los materiales de intercalación que se utilizan como electrodos, estén constituidos de una sola fase; sin embargo, la combinación de dos o más fases provoca cambios en las intercaras que proporcionan un funcionamiento más balanceado. En este proyecto se plantea la formación de electrodos mixtos con dos o más óxidos metálicos LiCoO_2 , Li_2CuO_2 y LiMn_2O_4 , a fin de aumentar la densidad energética de los materiales de electrodo. En este proyecto se utilizan métodos modernos de caracterización (EPR, Espectroscopía Mossbauer y XPS) para determinar el grado de interacción de los materiales en las intercaras resultantes, así como los cambios en la densidad energética de las LIB's, ensambladas con estos materiales mixtos. Ofrecemos una formación integral en métodos de caracterización y análisis químico y electroquímico de materiales y celdas, en un tema vibrante y novedoso.

Proyecto 2. Baterías Li-S el futuro en el almacenamiento de Energía renovable.

Las baterías Li-S son una alternativa interesante para el almacenamiento de energía a gran escala, el azufre es un elemento inocuo muy abundante en México que puede ser utilizado ampliamente en este tipo de baterías. La capacidad teórica del azufre sobrepasa considerablemente cualquier otro material catódico (2600 Wh/kg); sin embargo, durante la descarga el azufre pasa por diferentes etapas de reducción, donde se forman polisulfuros de Li con diferente relación S-Li, los cuales son solubles en el electrolito. El proceso de disolución tiene varias consecuencias, entre ellas a) la pérdida constante de material activo, b) la reducción de S en el electrodo de Litio, ocasionando la pasivación del electrodo y y la pérdida de eficiencia energética. En el grupo de investigación se están desarrollando metodologías para evitar estos procesos, mediante 1) La formación de composites carbono-azufre, mediante los cuales una estructura de porosidad controlada con alto contenido grafitico envuelva las partículas de azufre, evitando su disolución y pérdida de conductividad y 2) Desarrollo de electrolitos poliméricos donde sea la disolución de los polisulfuros sea despreciable, de tal forma que se evite la pérdida de capacidad y de eficiencia. Los participantes de este proyecto recibirán una formación integral en campos de síntesis química, caracterización espectroscópica/estructura y caracterización electroquímica de baterías.

ÁREA DE Q. INORGÁNICA: (UEA: 2141158 Proyecto Terminal I de Quim. Orgánica y 2141159 Proyecto Terminal II de Quim. Orgánica) o como Servicio Social.

Grupo 1: Eduardo González y Alejandro Islas (R-101)

Proyecto 1. Síntesis rápida de poliheterociclos con posible actividad biológica por reacciones de multicomponentes.

En la actualidad existen una gran variedad de productos naturales con grandes propiedades biológicas. Un factor importante de estos productos naturales, es que tienen una similitud en sus estructuras, por ejemplo, las estructuras de la Isoindolina y la Isoindolin-1-ona, forman parte esencial de la estructura de algunas moléculas como la Chilenina, Lennoxamina, Neuvamina, Magallanesina, falipalmil, entre otras. La actividad biológica que presentan muchas de las moléculas que contienen el esqueleto de la Isoindolin-1-ona son variadas y de mucha importancia (antihipertensivos,² antiinflamatorios,³ antiulcerosos,⁴ vasodilatadores,⁵ antivirales,⁶ antileucémicos⁷), de ahí el gran interés de los investigadores en sintetizar dichas moléculas. Por otro lado, el crecimiento de la industria farmacéutica y su interés por encontrar nuevos y mejores fármacos, ha traído consigo la búsqueda de alternativas para realizar su síntesis en menor tiempo y con menos etapas. Para ello, una opción ha sido el uso de "Reacciones de Multicomponentes", lo que ha permitido sintetizar, de manera rápida y eficaz, una gran cantidad de nuevos compuestos (quimiotecas) con pequeñas variaciones en su estructura, lo cual representa una alternativa atractiva para la generación de nuevos fármacos. La posibilidad de combinar la metodología de reacciones de multicomponentes y post-condensaciones, permite la formación de nuevos compuestos altamente funcionalizados en un mínimo de etapas, con productos de partida simples, en un ambiente amigable, simplemente formando moléculas pequeñas (agua, metanol, etc.) como producto de condensación con rendimientos excelentes y en algunos casos, preparados bajo un proceso ONE-POT. Nuestro grupo de

investigación, empleando esta metodología ha logrado generar diferentes quimiotecas de nuevos compuestos con excelentes rendimientos; Aza-análogos de Nuevamina, Beozoxazinas, Benzofuranos, 2-Imino benzopiranos, isoquinolin-pyrrolopyridinones, tetrahydroquinolines, fenantrolinas entre otros.

Proyecto 2. Síntesis de ligantes para la preparación de MOFs y su evaluación en la captura de CO₂. Las redes metal orgánicas o MOFs (Metal-Organic Frameworks) son uno de los materiales más prometedores para la captura de CO₂ debido a su selectividad de adsorción. La optimización de las interacciones fisicoquímicas entre las MOFs y las moléculas de CO₂ es la clave para aumentar la capacidad de captura. Una nueva tendencia para la captura de CO₂ es la construcción de MOFs híbridas mediante el confinamiento de agua dentro de los poros. Este trabajo revisa los progresos más recientes en esta área. En efecto, la pre-adsorción de pequeñas cantidades de agua dentro de los poros de estos materiales (construidos con grupos funcionales hidroxilo, μ 2-OH), favorece la captura de CO₂. El calentamiento global es un hecho innegable y la actividad humana ha influido de manera importante al aumento de las temperaturas con la constante emisión de CO₂. Para resolver este problema, se han propuesto diferentes tecnologías para remover el exceso de CO₂ en la atmósfera. Dentro de estas tecnologías se encuentra la familia de los procesos de Captura y almacenamiento de carbono (CCS, por sus siglas en inglés). Las redes metal-orgánicas MOFs, también conocidas como Polímeros de Coordinación Porosos (PCPs), son uno de los materiales más prometedores dentro de esta tecnología. Esto es debido a su selectividad de adsorción, la cual puede ser ajustada en función de la topología y composición química de sus poros⁹. Para mejorar la captura de CO₂ en las MOFs es imprescindible optimizar las interacciones fisicoquímicas de las moléculas de CO₂ y la superficie interna del material. Para ello se utilizan distintas técnicas: (i) la introducción de grupos funcionales con alta polaridad (ej. -OH, -CN, -NO₂, -SH, etc); (ii) la generación de sitios metálicos insaturados, y (iii) la funcionalización química de los poros con grupos que actúen como bases de Lewis (ej. triazol¹¹, aminas¹² y tetrazol). La principal desventaja de las MOFs es su vulnerabilidad ante la presencia de agua, cuya presencia es inevitable en los procesos de separación de CO₂; ya que las moléculas de agua pueden competir por los sitios activos o bien provocar el colapso de la estructura. Sin embargo, la gran diversidad de técnicas sintéticas ha permitido crear MOFs cuya estructura es estable al agua. Esto ha permitido desarrollar una nueva técnica de captura de CO₂, la cual consiste en una pre-adsorción de agua para favorecer la captura.