Informe de trabajo 2017

Síntesis curricular

El Dr. Thangarasu Pandiyan obtuvo su doctorado en ciencias químicas en la universidad de Bharathidasan, India. Como parte de su tesis doctoral, trabajó en el comportamiento redox de compuestos modelo para las proteínas de cobre. En la actualidad, trabaja en enfoques nanotecnológicos de química bio-inorgánica y fisicoquímica-inorgánica para resolver problemas ambientales y biológicos. Ha publicado numerosos artículos en revistas internacionales arbitradas y en actualidad se desempeña como editor en jefe de la revista Journal of Environmental Protection (JEP).

Dentro de sus líneas de investigación, tiene amplia experiencia en síntesis de ligantes basados en bezimidazol-imidazol para la formación de complejos metálicos. Así mismo, es uno de los pocos investigadores que analiza las estructuras de los complejos formados a través de simulaciones teórico cuánticas basadas en la teoría del funcional de la densidad, (DFT). Por otro lado, ha estudiado la degradación de diferentes compuestos aromáticos a través de oxidantes químicos como el dióxido de cloro (ClO2) y el radical hidroxilo (OH) así como por medio de nano catalizadores basados en dióxido de titanio (TiO2). En ambos casos, ha estudiado el comportamiento cinético así como el mecanismo de reacción a través de cálculos teóricos donde se determina la energía de activación en cada uno de los pasos de reacción.

Informe de trabajo últimos años

Durante el periodo 2016 se han publicado 5 diferentes artículos en diversas revistas internacionales arbitradas gracias a los recursos de cómputo otorgados por DGSCA. Así mismo, se ha consolidado un grupo de trabajo en el que se confrontan datos experimentales con los resultados teóricos obtenidos a través de simulaciones teóricas en el equipo Miztli. Dentro de las líneas de investigación en las que se trabaja actualmente están los cálculos teóricos de optimización y energía de moléculas orgánicas e inorgánicas así como su interacción con cúmulos metálicos; se han estudiado también las propiedades magnéticas y espectroscópicas (IR, UV, RMN, etc.) de estos compuestos y por otro lado, se están estudiando los mecanismos de

reacción en la degradación de contaminantes aromáticos por diferentes oxidantes como los radicales OH producidos a través de fotocatálisis heterogénea y el dióxido de cloro. Durante este periodo, diferentes complejos de Rutenio fueron optimizados y se analizo su foto sensibilidad a través de cálculos teóricos. Los resultados de estos estudios fueron finalmente publicados. Dentro los proyectos que actualmente se trabajan, hay importantes colaboraciones con diferentes instituciones entre las que se encuentran la Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo (UAEH), la Universidad Politécnica del Valle del Estado de México (UPVEM) y la Universidad de Campeche.

Artículos recientes:

1. Publicaciones internacionales arbitradas

1. Phenol oxidation through its adduct formation with chromium complex of 1,4,8,11-tetrakis(2-pyridylmethyl)-1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane: A theoretical study, Jayanthi Narayanan a, Hern_andez J. Guadalupe b, Pandiyan Thangarasu, *J. Mol. Struct,* 1133 (2017) 111-121. (impact factor: 1.78)

2. Fluorescent organic nanoparticles (FONs) for the selective recognition of Zn2+: Applications to multi-vitamin formulations in aqueous medium, C. A. Huerta-Aguilar, Thangarasu Pandiyan, Pushap Raj, Narinder Singh, Rodolfo Zanella, *Sensor and Actuators B: 223,* 59-67 (2016). Impact factor: 4.75)

3. Development of a predictive model for corrosion inhibition of carbon steel by imidazole and benzimidazole derivatives, Evelin Gutiérrez, José A. Rodríguez, Julián Cruz-Borbolla, José G. Alvarado-Rodríguez, Pandiyan Thangarasu, *Corros. Sci., 108*, 23-35 (2016). (impact factor: 5.15)

4. Fluorescent Organic Nanoparticles (FONs) for selective recognition of Al^{3+}: Application to bio-imaging for bacterial sample. C. A. Huerta-Aguilara, Pushap Raj, Pandiyan Thangarasu, N. Singh, *RSC Adv., 6*, 37944-37952 (2016). (Impact factor: 3.28)

5. Benzimidazole ligands in the corrosion inhibition for carbon steel in acid medium: DFT study of its interaction on Fe30 surface. E. Garcia-Ochoa, S.J. Guzmán-Jiménez, J. Guadalupe Hernández, Thangarasu Pandiyan, José M. Vásquez-Pérez, Julián Cruz-Borbolla. *J. Mol. Struct. 1119*, 314-324 (2016). (Impact factor. 1.78)

Formación de Recursos Humanos

Alumnos titulados recientemente

A nivel Maestría

1. I. Q. Alejandra Itztani Cervantes Macias; *Título de la tesis*: Degradacion de compuestos sulfurados aromaticos por medio de reacciones foto catalíticas utilizando materiales de oxido de Zinc. Programa de Maestría y Doctorado en Ingenieria Ambiental. *Fecha:* Febrero 2017 (en tramites fecha de examen programado)

A nivel Licenciatura

2. Scarlette Yesenia Garcia Gutierrez **;** *Título de la tesis*: degradación de ciprofloxacino por nps de TiO_2 y TiO_2-Ag bajo luz visible: análisis espectral de ciprofloxacino como quimiosensor para la detección de Al^{3+} y Cu^{2+}. ; *Institución / grado obtenido*: Facultad de Química / UNAM/ Licenciatura. *Fecha:* Febrero de 2017 (en tramite de fecha de examen)