Dra. Ana María Martínez Vázquez
Investigadora Titular C, TC. Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM
SNI nivel 3, PRIDE D
Tel: 56 22 45 96. Email: martina@unam.mx

Informe de Proyecto Regular, Año 2016

Estudio teórico de la reactividad química

Resumen:

El proyecto contempla el estudio teórico de la reactividad química de diversos materiales, que van desde cúmulos metálicos hasta fulerenos y polímeros. En este proyecto estudiamos propiedades como la capacidad antioxidante de los materiales, las reacciones de catálisis para disminuir contaminantes atmosféricos y la capacidad de atrapar radicales libres. Los sistemas que hemos estudiado son cúmulos mixtos de carbono y bismuto, nano-aleaciones de oro con bismuto, moléculas como la silibina y compuestos que reaccionan con el CO_2 para producir sustancias funcionales.

Descripción de los avances:

En este año se realizó una investigación sobre las propiedades de la astaxanthina interaccionando con cúmulos metálicos. La principal idea era investigar la capacidad de atrapar radicales libres de este sistema. La astaxanthina es una sustancia que se reconoce como una buena atrapadora de radicales libres, y la hipótesis era que con la presencia de cúmulos metálicos esta propiedad se iba a fortalecer. Se comprobó la hipótesis y los resultados se publicaron en una revista de circulación nacional con factor de impacto de 2.333. Además este compuesto es un material potencial para construir celdas fotovoltaicas.

También se realizó una investigación con fulerenos y bismulenos, y se determinó como la mezcla de carbono y bismuto en estructuras parecidas a los fulerenos, cambian las propiedades de manera muy interesante. Para esto se utilizaron diversos índices de reactividad. El trabajo se publicó en una revista con factor de impacto igual a 2.883

Otro material que se estudió fueron los glucósidos. Se investigaron sus propiedades antioxidantes. Este trabajo se hizo en colaboración con investigadores del Instituto de

Biotecnología y de la Facultad de Química de la UNAM, que son quienes hacen los experimentos. También participaron los estudiantes Yanet Romero y Miguel Reina. Los resultados se publicaron en una revista con factor de impacto igual a 3.84

Como parte de su trabajo de maestría, el alumno Miguel Reina Tapia estudió la capacidad de atrapar radicales libres de los componentes de la silibarina, que es una mezcla de sustancias que se encuentra en el cardo mariano. Encontró que su actividad se debe principalmente a la mezcla *per se* ya que todos los componentes de la misma tienen capacidad similar para atrapar radicales libres. El trabajo se publicó en una revista con factor de impacto igual a 3.302.

Además, como parte del trabajo de doctorado de Miguel Reina, se investigó la influencia de átomos y cúmulos metálicos enlazados a la silibina. El trabajo se publicó en una revista con factor de impacto igual a 1.403.

En colaboración con el grupo experimental del Dr. Illich A. Ibarra, del Instituto de Investigaciones en materiales, se investigaron las propiedades de materiales con Indio, en particular la capacidad de capturar CO_2. Este trabajo se publicó en una revista con factor de impacto igual a 6.567

En colaboración con el grupo experimental de la Dra. Sandra Rodil del Instituto de Investigaciones en Materiales se realizó una investigación sobre las propiedades de películas delgadas de bismuto. El trabajo está aceptado para su publicación en una revista con factor de impacto igual a 3.014

Cálculos realizados:

Para cada sistema que se analiza se realizan cálculos de estructura electrónica utilizando la teoría de Funcionales de la Densidad, que comienzan con la optimización de las geometrías. Se tiene que encontrar la estructura que represente el mínimo en la Superficie de Energía Potencial, para lo cual se tienen que probar muchas geometrías iniciales. Una vez que se tiene la estructura basal se hacen cálculos de distintas propiedades, como la

energía de ionización, la afinidad electrónica, las energías libres de Gibbs, el potencial electrostático, el gap HOMO-LUMO, la dureza, el potencial químico y las funciones de Fukui. Con estos parámetros es posible analizar la reactividad química de estos materiales.

Software utilizado:

Todos los cálculos se realizan con el código Gaussian 09.

Recursos utilizados:

777571.63 horas-CPU de los 900000 horas-CPU solicitados

Lista de colaboradores:

1- Sandra E. Rodil (IIM-UNAM)
2- Illich A. Ibarra (IIM-UNAM)
3- José Pedraza-Chaverri (FQ-UNAM)
4- Miguel Reina (IIM-UNAM)
5- Yanet Romero (IIM-UNAM)
6- Agustín López-Munguía (IBT-UNAM)
7- Edmundo Castillo (IBT-UNAM)

Lista de artículos publicados:

En 2016 se publicaron los siguientes artículos, que dan reconocimiento a la DGTIC porque se realizaron con el uso de la supercomputadora Mitzli:

1- Ana Martínez. *Astaxanthin interacting with metal clusters: free radical scavenger and photovoltaic materials*. Theoretical Chemistry Accounts 135(5), 1-15 **(2016)** (FI = 2.233)

2- Jorge González-Ríos, José Pedraza-Chaverri, Omar N. Medina-Campos, Miguel Reina, Yanet Romero, **Ana Martínez**, Agustín López-Munguía, Edmundo Castillo. *The influence of the carbohydrate anomeric linkage on the free radical scavenging activity of enzymatically-synthesized phenolic glycosides*. RSC Advances 6(51) 45452-45461 **(2016)** (FI = 3.84)

3- Miguel Reina, **Ana Martínez**. *Is Silybin the Best Free Radical Scavenger Compound in Silymarin?* Journal of Physical Chemistry B 120 (20) 4568-4578 **(2016)** (FI = 3.302)

4- Ilich A. Ibarra, Vojtech Jancik, Eduardo González-Zamora, **Ana Martínez**, Heriberto Pfeiffer, Jorge Balmaseda, Ricardo Peralta, Alberto Campos-Reales-Pineda, J.Raziel Alvarez, Diego Martínez-Otero, Antonio Zarate. *CO_2 capture enhancement in InOF-1 via a bottleneck effect of confined ethanol*. Chemical Communications 52, 10273-10276 **(2016**) DOI: 10.1039/C6CC04734C (FI = 6.567)

5- **Ana Martínez.** *Reactivity Indexes of Fullerene and Bismullene Mixed Clusters: How the Intruders Modify the Properties?* Journal of Physical Chemistry A 120, 8680-8685 **(2016)** (FI = 2.883)

6- Miguel Reina, **Ana Martínez**. *How the presence of metal atoms and clusters can modify the properties of Silybin? A computational prediction*. Computational and Theoretical Chemistry 1099, 174-184 **(2017)** (FI = 1.403)

7- Osmary Depablos-Rivera, Juan C. Medina, Monserrat Bizarro, **Ana Martínez**, Andreas Zeinert, Sandra E. Rodil. *Synthesis and properties of $Bi_5Nb_3O_{15}$ thin films prepared by dual co-sputtering.* Journal of Alloys and Compounds (**2016)** aceptado (FI = 3.014)

Lista de alumnos graduados:

1- Yanet Romero Nava. Doctorado. Fecha de obtención de grado: 5 de enero de 2016.
2- Miguel Reina Yapia- Maestría. Fecha de obtención del grado: 28 de enero de 2016.

La alumna Emma Belem Andrade Hernández terminó su tesis de licenciatura y defendió su trabajo el 22 de octubre de 2015. Ahora está realizando su trabajo de maestría en este proyecto. El alumno Miguel Reina Tapia realiza sus estudios de doctorado bajo mi tutoría.

Lista de participantes en congresos:

No se presentaron trabajos en congresos.