REPORTE DE RESULTADOS 2016

Solicitante: Esther Agacino Valdés

Dependencia: Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán

Modalidad del proyecto: Proyecto de Investigación Regular

1. PRODUCTOS ACADÉMICOS GENERADOS

1.1 Publicaciones

Para el 2016 se proyectó la publicación de un artículo y se publicaron dos, por lo que hubo sobrecumplimiento de la meta prevista:

- Lidia G. Ledesma‑Olvera, Esther Agacino‑Valdes, Rodolfo Gomez‑Balderas *"Stability constants of Cu(II) ‑piroxicam complexes in solution: a DFT study"* Theor Chem Acc (**2016**) 135(10):241.

- Emir A. Galvan‑Garcia1, Esther Agacino‑Valdes, Marco Franco‑Perez, Rodolfo Gomez‑Balderas "*[Cu(H2O)n]2+ (n = 1–6) complexes in solution phase: a DFT hierarchical study*", Theor Chem Acc (**2017**) 136 (3):29.

1.2 Trabajos presentados en Congreso

Para el 2016 se proyectó presentación de 2 trabajos en el 51° Congreso de la Sociedad Química de México y/o la XV Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica y se presentaron dos trabajos en la *XV Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica*, por lo que se cumplió con la meta prevista:

- Oyuki Camacho, Esther Agacino y Sandy María Pacheco, "*Estudio de similitud molecular en productos de oxidación de la guanina*" XV Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Cd. de Mérida, Yuc. México, 17-19 de Noviembre de **2016**.

- Delmi Guadalupe Cabrera Aragón, Sandy María Pacheco Ortín y Esther Agacino ValdésEstudio preliminar de la estabilidad de cúmulos $Au_M Ir_N$ (M+N =4) XV Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Cd. de Mérida, Yuc. México, 17-19 de Noviembre de **2016**.

1.3 Tesis de Licenciatura concluidas

Para el 2016 se proyectó la conclusión de tres tesis de Licenciatura de los estudiantes relacionados más abajo; las tres tesis están concluidas y en proceso de escritura, por lo que esperamos que para este año 2017 se realicen los correspondientes exámenes profesionales. Los estudiantes en proceso de escritura de sus tesis son.

- Cinthya Susana Olmedo Martínez
- Yol Tan Pinto Correa
- Oyuki Camacho González

Es importante también señalar que la tesis de Licenciatura de la estudiante Lydia Gabriela Ledesma Olvera que en el reporte pasado estaba en proceso de obtener los votos

aprobatorios, fue defendida exitosamente como se muestra a continuación. Además se defendió una tesis que se encontraba atrasada de un proyecto anterior.

- Título: "*Estudio teórico de la interacción Cu(II)-Piroxicam*"
  Estudiante: Lydia Gabriela Ledesma Olvera
  Carrera: Química
  Fecha de examen: 17 de Marzo de **2016**

- Título: "*Estudio químico cuántico de un cúmulo de grafeno dopado con nitrógeno y boro como posible sensor químico del monóxido de carbono*"
  Estudiante: Leslie Fernanda Velázquez López
  Carrera: Química
  Fecha de examen: 1° de Septiembre de **2016**

2. DESCRIPCIÓN DE OBJETIVOS GENERALES Y ESPECIFICOS PARA ANALIZAR AVANCES.

Los productos relacionados anteriormente pertenecen al proyecto: "*Estudios teóricos de moléculas de interés bioquímico*" con CLAVE: PIAPI C23, proviene de las CATEDRAS DE PROGRAMAS INTERNOS DE APOYO A PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN con dos líneas; este proyecto concluyó el pasado año.

Línea (a2.1) "*Bases químicas de las transversiones que producen daño oxidativo del ADN y estudio de los productos de oxidación que las inducen*"

OBJETIVO GENERAL
Estudiar las bases químicas de las transversiones G:C→T:A y G:C→C:G, inducida por la presencia de la 2-imino-5,5-spirodihidantoina (Sp), para el caso de la primera transversión y de la 2-aminoimidazolona (Iz) y la 5-guanidinohidantoina (Gh), para la segunda transversión y establecer la posible semejanza estructural y topológica entre la Sp y T e Iz y G, estableciendo la naturaleza química de este tipo de mutación.

Líneas de investigación:

Línea (a2.1) "*Bases químicas de las transversiones que producen daño oxidativo del ADN y estudio de los productos de oxidación que las inducen*"

Objetivo General
Estudiar las bases químicas de las transversiones G:C→T:A y G:C→C:G, inducida por la presencia de la 2-imino-5,5-spirodihidantoina (Sp), para el caso de la primera transversión y de la 2-aminoimidazolona (Iz) y la 5-guanidinohidantoina (Gh), para la segunda transversión.

Objetivos Específicos
(a2.1.2) Investigar las posibles semejanzas estructurales y/o electrónicas entre el POG genera la transversión y la BN* insertada por error para evaluar su semejanza estructural

(a2.1.3) Modelar y calcular los pareamientos BN:BN y POG:BN*, para encontrar sus posibles semejanzas estructurales y/o electrónicas.

(a2.1.4) Alternativamente evaluar algunos descriptores moleculares tipo QSAR/QSPR.

(a2.1.5) Establecer el mecanismo de formación de los productor de oxidación 2-imino-5,5-spirodihidantoina (Sp) y de la 2-aminoimidazolona (Iz), para confirmar además, si los mismos se generan de la oxidación de la Guanina directamente o pasan por la 8-oxo-guanina.

El objetivo (a2.1.1) no se relaciona, porque ya fue cumplido en 2014.

VALORACIÓN DE AVANCES y/o CUMPLIMIENTO DE OBJETIVOS:

Los objetivos (a2.1.2 al a2.1.4) corresponden a la tesis de la estudiante Oyuki Camacho González, la cual está concluida y se encuentra en proceso de escritura; además, se presentó un trabajo en congreso y el correspondiente artículo se encuentra en proceso de escritura con un 25% de avance.

El resto de las tesis en proceso de escritura y los artículos publicados corresponden a objetivos de 2015 de esta misma cátedra.

En un próximo proyecto se continuará con éstos objetivos (a2.1.2 al a2.1.4).