

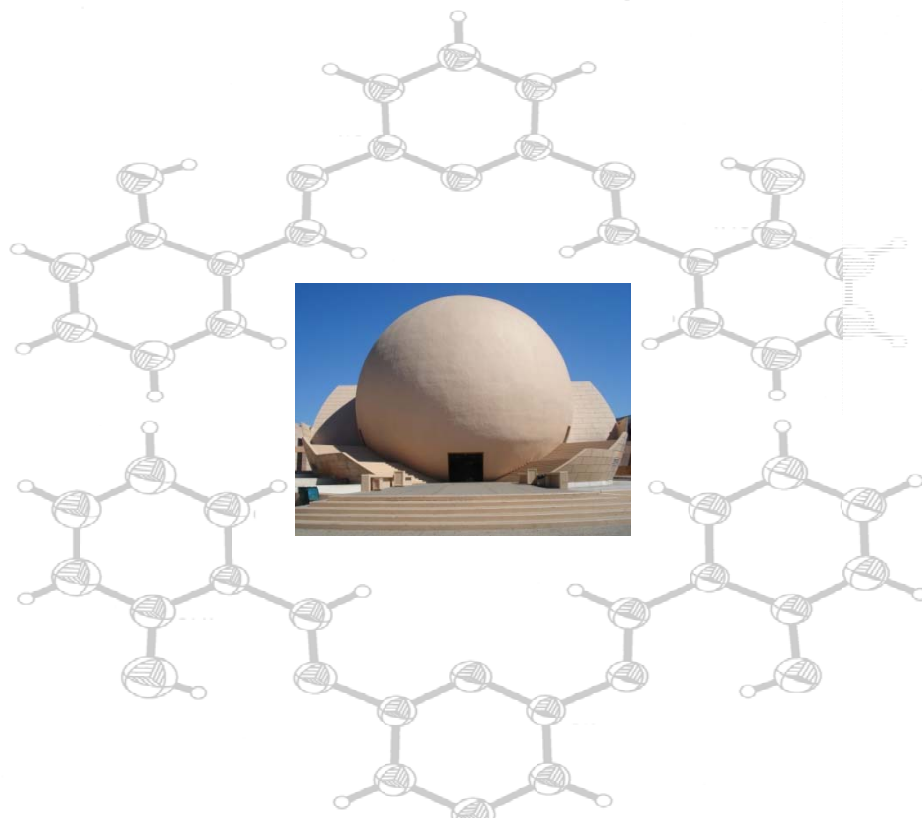


SECRETARÍA DE  
EDUCACIÓN PÚBLICA

SEP

# Instituto Tecnológico de Tijuana

## Centro de Graduados e Investigación en Química



## VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera

17, 18 y 19 de noviembre de 2009  
Tijuana, B. C.

INSTITUTO TECNOLÓGICO DE TIJUANA  
Centro de Graduados e Investigación

**MEMORIAS**

**VII SIMPOSIO INTERNACIONAL:  
INVESTIGACIÓN QUÍMICA EN LA FRONTERA**

17, 18 y 19 de noviembre de 2009 Tijuana, B. C. México

**COMITÉ ORGANIZADOR**

**Gerardo Aguirre Hernández**

Presidente

**José Guerrero Guerrero**

Organización y Finanzas

**Mercedes T. Oropeza Guzmán**

Coordinador Académico

**Arbitraje de Resúmenes**

Mercedes T. Oropeza Guzmán

Daniel Chávez Velasco

Miguel Parra Hake

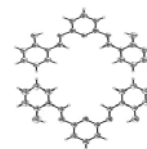
**Edición de Resúmenes**

Daniel Chávez Velasco

Miguel Parra Hake



VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.



## INSTITUTO TECNOLÓGICO DE TIJUANA

### DIRECTORIO

***Ing. Enriqueta González Aguilar***

Director

***Lic. Juliana Cervantes Castro***

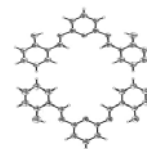
Subdirector Académico

***M. en C. José Guerrero Guerrero***

Jefe del Centro de Graduados e Investigación



VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.

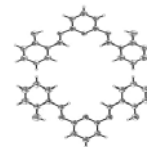


## PATROCINADORES



**SPECTRAMEX, S.A. DE C.V.**  
VENTA Y SERVICIO DE EQUIPOS ANALITICOS POR RAYOS-X





## PRESENTACIÓN

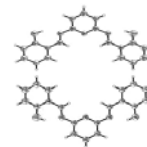
A 38 años de su creación, el Instituto Tecnológico de Tijuana continúa siendo una de las instituciones educativas más importantes no sólo de la Ciudad de Tijuana, sino del estado de Baja California. A su vez, el ahora Centro de Graduados e Investigación, sigue cumpliendo con su cometido de formar recursos humanos de alta calidad a nivel posgrado con especialidad en Ciencias Químicas desde hace 28 años.

En 1995, con motivo del XV Aniversario del Posgrado en Química, se llevó a cabo el Primer Simposio Internacional: “Investigación Química en la Frontera”, con el propósito de reunir a los investigadores de la química de ambos lados de la frontera. Dado el éxito del primer simposio, nos propusimos llevar a cabo el mismo tipo de reunión de investigadores en forma periódica. Así, en 1998, 2000, 2002, 2004 y 2006 se han desarrollado el II, III, IV, V y VI Simposio Internacional, respectivamente, contando con colegas, colaboradores y estudiantes interesados en la investigación en diferentes áreas de la química.

Como parte de la celebración del XXXVIII Aniversario de la fundación del Instituto Tecnológico de Tijuana y el XXVIII Aniversario del Posgrado en Ciencias en Química, en esta ocasión hemos organizado el VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera. En ésta, como en ocasiones anteriores, los límites geográficos han sido expandidos y contamos con la participación de renombrados investigadores de alto nivel de México, Estados Unidos y Europa.

Para el VII Simposio nos complace contar con un incremento notable en el número de instituciones participantes, tanto nacionales como del extranjero, con sus trabajos de investigación que serán presentados en tres conferencias plenarias, siete invitados especiales, 45 trabajos cortos orales y 40 trabajos en cartel.

A nombre del Instituto Tecnológico de Tijuana y el Comité Organizador, damos la más cordial bienvenida al VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera. Agradecemos especialmente a los participantes que con sus contribuciones científicas darán relevancia a este evento, y a todos aquellos que con su presencia nos animan a seguir adelante con nuestra misión como educadores y científicos.



## INSTITUCIONES PARTICIPANTES

### *Del extranjero*

Canadian Neutron Beam Centre, National Research Council, Chalk River, Ontario, Canada

Computational Sciences Research Center, San Diego State University, San Diego, CA, USA

Departamento de Química Física y Analítica, Universidad de Oviedo, Oviedo, España

Department of Chemistry and Biochemistry, San Diego State University, San Diego, CA, USA

Department of Chemistry and Biochemistry, University of California, La Jolla, CA, USA

Department of Chemistry, University of California, Riverside, CA, USA

Department of Pharmacology, Creighton University School of Medicine, Omaha, NE, USA

Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Comenius University, Bratislava, Slovakia

Faculty of Pharmacy, Comenius University, Bratislava, Slovakia

Georgia Institute of Technology, Georgia, USA

Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry. Dresden University of Technology, Dresden,  
Alemania

Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba

Laboratoire Léon Brillouin (CEA/CNRS), CEA-Saclay, Gif-sur-Yvette Cedex, France

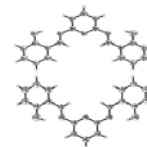
Laboratory of Molecular and Macromolecular Electrochemistry, University of Rennes, Rennes, France

Medicinal and Natural Products Chemistry, The University of Iowa, Iowa City, Iowa, USA

National Biomedical Computation Resource, University of California, San Diego, CA, USA

Scripps Institute of Oceanography, University of California San Diego, La Jolla, CA, USA

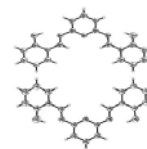
Stanford University, Department of Chemical Engineering, Stanford, CA, USA



## INSTITUCIONES PARTICIPANTES

### *De México*

- Centro de Graduados e Investigación en Química, Instituto Tecnológico de Tijuana, Tijuana, B. C.
- Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada(CICESE), Ensenada, B. C.
- Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S. C. Apodaca, N. L.
- Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Instituto Politécnico Nacional, México, D. F.
- Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Instituto Politécnico Nacional, Unidad Saltillo, Saltillo, Coah.
- Centro de Investigación y Estudios de Posgrado/FCQ, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, SLP
- Centro de Investigaciones en Ciencias de la Tierra y Materiales, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Pachuca, Hgo.
- Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, Mor.
- Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Ensenada, B. C.
- Centro Universitario de Vinculación de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, Puebla
- CISALUD, Universidad Autónoma de Baja California, Unidad Valle de las Palmas, Tijuana, B. C.
- CITEC, Universidad Autónoma de Baja California, Unidad Valle de las Palmas, Tijuana, B. C.
- Departamento de Ciencias Químico Biológicas, Universidad de Sonora, Hermosillo, Son.
- Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa, México, D. F.
- Departamento de Ingeniería Química y Bioquímica, Instituto Tecnológico de Tijuana, Tijuana, B. C.
- Departamento de Ingeniería Química, Instituto Tecnológico de Los Mochis, Los Mochis, Sin.
- Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, Hermosillo, Son.
- División de Estudios de Posgrado e Investigación del Instituto Tecnológico de Zacatepec, Zacatepec, Mor.
- División de Estudios de Posgrado e Investigación, Ingeniería en Materiales, Instituto Tecnológico de Querétaro, Qro.
- Departamento de Estudios de Posgrado e Investigación, Instituto Tecnológico de Cd. Madero, Cd. Madero, Tam.
- División de Estudios de Posgrado e Investigación, Instituto Tecnológico de Tijuana, Tijuana B. C.
- Escuela de Ciencias Biológicas, Instituto Politécnico Nacional, México, D. F.
- Facultad de Ciencias Marinas, Universidad Autónoma de Baja California, Ensenada, B. C.
- Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma de Baja California, Tijuana, B. C.
- Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Nuevo León, Monterrey, N. L.



## **INSTITUCIONES PARTICIPANTES**

### ***De México (continuación)***

Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Autónoma Benito Juárez de Oaxaca, Oaxaca, Oax.

Facultad de Ciencias Químico Biológicas. Universidad Autónoma de Sinaloa, Culiacán, Sin.

Facultad de Medicina, Universidad Autónoma de Baja California, Tijuana, B. C.

Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, México, D. F.

Ing. Nanotecnología, Instituto Tecnológico de Tijuana, Tijuana, B. C.

Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, México, D. F.

Instituto Tecnológico de Mexicali, Mexicali, B. C.

Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Azcapotzalco, México, D. F.

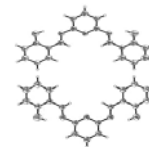
Universidad del Noreste, Tampico, Tam.

Universidad Politécnica de Pachuca, Pachuca, Hgo.





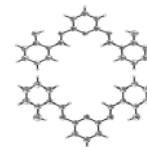
*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.



## CONFERENCIAS PLENARIAS

## PLENARY LECTURES





## **MECHANISMS OF HYDROCARBON CONVERSION CATALYSIS: REGIOSELECTIVITY, STEREOSELECTIVITY, AND ENANTIOSELECTIVITY**

Prof. Francisco Zaera

*Department of Chemistry, University of California, Riverside, CA 92521, USA*

Achieving high selectivities is arguably the main challenge in heterogeneous catalysis in the 21st century: more selective catalysis may not only be cheaper because it does not waste reactants or require expensive separation procedures, but also greener, avoiding the generation of polluting byproducts.<sup>1,2</sup> Control of selectivity in heterogeneous catalysis has traditionally been hampered by both a lack of understanding of the molecular details that define such selectivity and the limited range of synthetic tools available to make catalysts with the specific properties required. However, progress in surface science as well as in nanotechnology and self-assembly synthesis is changing that.

Here we report on studies from our laboratory using model systems to pinpoint the mechanistic factors that define selectivity in a number of increasingly subtle hydrocarbon hydrogenation and dehydrogenation reactions. The first examples show how the regioselectivity of hydrogen elimination from alkyl species adsorbed on metals is affected by the electronic properties of the surface: while nickel promotes the extraction of hydrogen atoms from the carbon directly bonded to the surface, a step that leads to undesirable cracking reactions, platinum allows for dehydrogenation further down the hydrocarbon chain and therefore facilitate more desirable isomerization processes.<sup>3</sup>

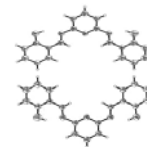
In a second set of examples, the issue of selectivity in alkene isomerizations involving either double-bond migrations or cis-trans interconversions is addressed. In those cases the key mechanistic steps require hydrogen abstraction from a beta carbon in the hydrocarbon chain (the second from the surface), and selectivity is defined by steric considerations around the different hydrogens available at those positions. A particular exciting observation from our work in this area is the unique ability that close-packed surfaces of platinum have in promoting the thermodynamically unfavorable but highly

desirable conversion of trans alkenes to their cis counterparts;<sup>4</sup> new shape-controlled catalysts were prepared to take advantage of that behavior.<sup>5</sup>

Finally, the more subtle issue of enantioselectivity is discussed. Chiral compounds can be produced via hydrogenation of so called prochiral reactants such as asymmetric ketones, but regular metal catalysts are achiral and therefore lead to the production of racemic mixtures. However, chirality can be bestowed on catalytic surfaces by the adsorption of chiral modifiers. Individual molecules of these modifiers may be able, by themselves, to provide the required chiral environment on the surface for such enantioselectivity, as is the case with cinchona alkaloids,<sup>6,7</sup> but simpler molecules may also assemble into chiral supramolecular structures held together by the surface; in both cases, a specific surface chiral site is produced with the help of molecular adsorbates.<sup>7</sup> The examples to be discussed in this presentation not only highlight the need to design and prepare heterogeneous catalysts with sophisticated surface sites in order to promote reactions selectively, but also hint at some of the tools available to accomplish that task.

## References

1. F. Zaera, *Acc. Chem. Res.* **42(8)**, 1152–1160 (2009).
2. F. Zaera, *J. Phys. Chem. B* **106**, 4043-4052 (2002).
3. F. Zaera, *Catal. Lett.* **91(1-2)**, 1-10 (2003).
4. I. Lee, F. Delbecq, R. Morales, M. A. Albiter, and F. Zaera, *Nature Mater.* **8**, 132-138 (2009).
5. I. Lee, R. Morales, M. A. Albiter, and F. Zaera, *Proc. Nat. Acad. Sci.* **105(40)**, 15241-15246 (2008).
6. J. Lai, Z. Ma, L. Mink, L. J. Mueller, F. Zaera, *J. Phys. Chem. B* **113(34)**, 11696–11701 (2009).
7. F. Zaera, *J. Phys. Chem. C* **112(42)**, 16196-16203 (2008).

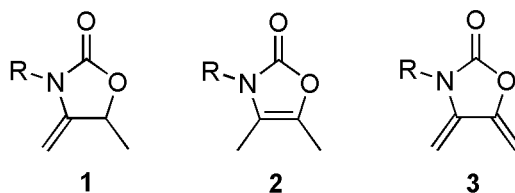


## SYNTHESIS AND APPLICATIONS OF HETEROCYCLES

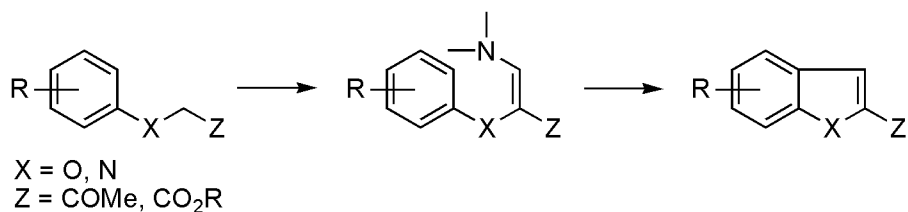
Prof. Joaquín Tamariz

*Escuela Nacional de Ciencias Biológicas. Instituto Politécnico Nacional. Prol. Carpio y Plan de Ayala S/N, Col. Casco Sto. Tomás, 11340, México.  
E mail: jtamariz@woodward.enb.ipn.mx.*

Los heterociclos han jugado un papel muy importante como sintones en el desarrollo de metodología sintética. En particular, los dihidrooxazoles,<sup>1</sup> las oxazolidinonas,<sup>2</sup> los ditanos<sup>3</sup> y los 1,3-dioxanos<sup>4</sup> han sido un referente para la construcción de importantes moléculas como lactonas, alfa-dicetonas y ácidos carboxílicos funcionalizados, e hidroxiaácidos. En años recientes, hemos enfocado nuestra atención en sistemas electrónicamente deslocalizados dentro o como parte del heterociclo. Es así que 4-alkiliden-1,3-oxazolidin-2-onas,<sup>5</sup> 1, 4-oxazolin-2-onas,<sup>2,6</sup> y dienos exocíclicos de 1,3-oxazolidin-2-onas,<sup>7,3</sup> han sido preparadas mediante una metodología en cascada en una sola etapa de reacción. Estos compuestos fueron empleados en la construcción de novedosos heterociclos a través de reacciones de adición/ciclización en cascada<sup>6</sup> o de cicloadición de Diels-Alder.<sup>8</sup> Esta última permitió llevar a cabo la síntesis total de carbazoles naturales.<sup>9</sup>



Hemos desarrollado también una nueva metodología para la construcción de benzoheterociclos de cinco miembros, tales como benzofuranos e indoles,<sup>10</sup> a partir de enaminonas (Esquema 1). Esta estrategia se ha empleado en la síntesis de diversos productos naturales.<sup>11</sup> Asimismo, esta metodología ha sido útil en la síntesis de benzoheterociclos de seis miembros como cumarinas naturales, tales como Escopoletina, Escoparona y Citropteno.

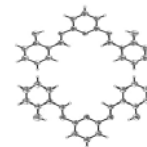


### Esquema 1

Más recientemente, se ha incursionado en la funcionalización de compuestos furánicos y en la síntesis total de productos furánicos de origen natural, tales como las Rehmanonas A-C<sup>12</sup> o los metabolitos de *Gastrodia elata* y *Morinda citrifolia*.<sup>13</sup>

### References

1. Meyers, A. I. et al. *J. Am. Chem. Soc.* 1980, 45, 2792.
2. Evans, D. A. *J. Am. Chem. Soc.* 1982, 104, 1737.
3. Dauben, W. G. et al. *J. Org. Chem.* 1981, 46, 1103
4. Seebach, D. et al. *Helv. Chim. Acta* 1986, 69, 1147.
5. Martínez, R.; Tamariz, J. et al. *Tetrahedron* 2000, 56, 3857.
6. Santoyo, B.; Tamariz, J. et al. *Eur. J. Org. Chem.* 2009, 2505.
7. (a) Mandal, A. B.; Tamariz, J. et al. *J. Org. Chem.* 1997, 62, 4105. (b) Martínez, R.; Tamariz, J. et al. *Helv. Chim. Acta* 2002, 85, 464.
8. Martínez, R.; Tamariz, J. et al. *Tetrahedron* 2003, 59, 481.
9. (a) Zempoalteca, A.; Tamariz, J. *Heterocycles* 2002, 57, 259. (b) Benavides, A.; Tamariz, J. *Synthesis* 2004, 2499. (c) Bernal, P.; Tamariz, J. *Helv. Chim. Acta* 2007, 90, 1449.
10. (a) Cruz, M. C.; Tamariz, J. *Tetrahedron Lett.* 2004, 45, 2377. (b) Cruz, M. C.; Tamariz, J. et al. *Synlett* 2006, 749.
11. (a) Cruz, M. C.; Tamariz, J. *Tetrahedron* 2005, 61, 10061. (b) Correa, C.; Tamariz, J. et al. *Austr. J. Chem.* 2008, 61, 991.
12. Quiroz, H.; Tamariz, J. et al. *Synthesis* 2008, 1023.
13. Quiroz-Florentino, H.; Tamariz, J. et al. *Nat. Prod. Res.* 2009, 23, 1355.



## **ELECTROMEMBRANE DEVELOPMENT WORKS AT CENTRO DE GRADUADOS E INVESTIGACION EN QUIMICA, DEL INSTITUTO TECNOLOGICO DE TIJUANA**

Shui Wai Lin Ho\*<sup>1</sup>, Rosa María Félix Navarro<sup>1</sup>, Sergio Pérez Sicaicos<sup>2</sup>, José Heriberto Espinoza Gómez<sup>3</sup>, Fernando Javier López<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Centro de Graduados e Investigación, Instituto Tecnológico de Tijuana;* <sup>2</sup>*Universidad Autónoma de Sinola;* <sup>3</sup>*Universidad Autónoma de Baja California*

Membrane separation systems have become increasingly important for industrial, environmental and domestic applications in recent years.<sup>1,2</sup> All of membrane separation systems suffer a serious problem, which is the membrane fouling.<sup>3,4</sup> Membrane fouling is caused mainly by foulents plugging pore openings of the membrane, by bacteria on attachment and by electrostatic interactions.<sup>5</sup> Our works focus on enhancements of the performance of membrane separation systems by modification of the membrane surface properties and by incorporating electrochemical actions to improve the efficiency of the membrane separation. Samples of our past and current research activities are given below.

### 1) Oil-water separation via modified rotating membrane separation system

Rotating membrane separation system was selected for oil-water separation because of its low membrane fouling due to high share force. The membrane permeate flows were observed to increase greatly with increase negative membrane surface charge (i. e. increase hydrophilicity), this is due to the fact that oil and water do not mix; this results in less membrane fouling. With our new design of the rotating membrane system, we can recover the energy wasted by the centrifugation force acting against the permeate flow during the oil-water separation operation

### 2) Enhance arsenic removal by electro-oxidation/modified NF membrane

The main factor that affects the performance of the arsenic removal from water is its oxidation state. It is known that As(III) is more difficult to remove than As(V) due to the fact that  $H_3AsO_3$  is non-ionic ( $pK_1 = 9.22$ );  $H_3AsO_4$  dissociates readily with a  $pK_1 = 2.25$ . In the oxygen-poor environment like in groundwater, arsenic exists mainly as As(III). For higher degree of removal of arsenic, it is necessary to oxidize the As(III) to As(V) prior to other

treatment processes. In this work an electrochemical reactor having an anode made from reticulated vitreous carbon of 100 pores per inch (100 ppi), was used to oxidize As(III) to As(V); this eliminates the need of adding more chemical substances to the treatment system. The performance of this special designed electrochemical reactor was evaluated at various applied cell voltages, reaction time, concentrations of the supporting electrolyte (NaCl), flow rate of the arsenic (As(III)) contaminated water through the electrochemical reactor and the pH of the aqueous media. Our experimental results indicated that for an aqueous solution containing 1.0 ppm in As(III) and at 3.0 volts applied cell potential with a flow rate at 10 mL/min and 0.10 M NaCl, the percentage of oxidation of As(III) to As(V) was closer to 100%.

### 3) Effects of electric field and electric field switching on membrane separation process

Efforts are being undertaken in our group in areas like changing the membrane negative surface charge density by subjecting the membrane to a high electric field; the groups like carboxylic acid in the polymer may dissociate to form carboxylate under a strong applied electric field. Since carboxylate bears a negative charge, the membrane tends to be hydrated; this results in membrane swelling, which in turn changes the pore size of the porous membrane. The phenomena will be discussed in more detail in the presentation.

## References

1. Patterson, J.W. Industrial wastewater treatment technology. Butterworth Publisher, USA, Second Edition, 1985.
2. Mulder, M. Basic Principles of Membrane Technology; Kluwer: London, 1996.
3. Krehbiel, D. K.; Scamehorn, J. F.; Ritter, R.; Christian, S. D.; Tucker, E. E. Separation Sci. & Tech. 1992, 27, 1775.
4. L. E. Applegate, Membrane Separation Process, Chemical Engineering, 1984.
5. Han, W.; Gregor, H. P.; Pearce, E. M. J. Appl. Polym. Sci. 1999, 74, 1271.

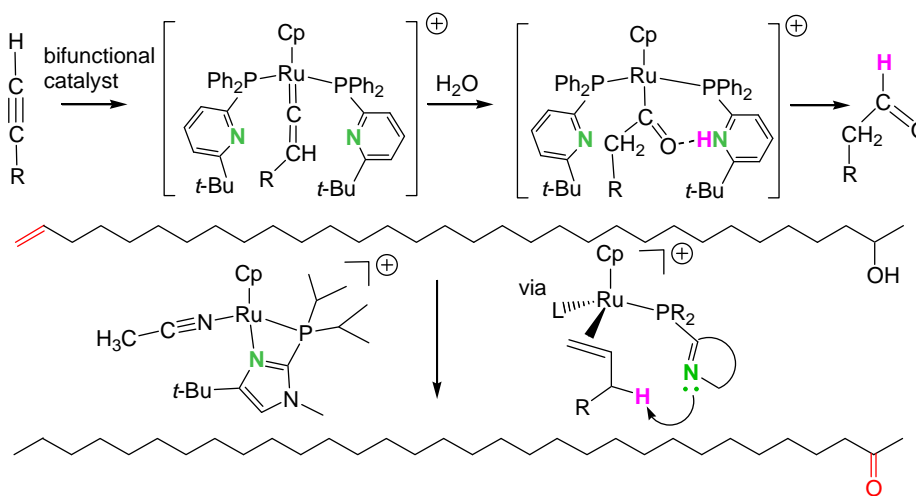


## PROTON TRANSFER AND HYDROGEN BONDING IN ORGANOMETALLIC STRUCTURE AND CATALYSIS

Prof. Douglas B. Grotjahn

*Department of Chemistry and Biochemistry, 5500 Campanile Drive, San Diego State University, San Diego, CA 92182-1030.*

Nature's enzymatic catalysts often rely on exquisite control of proton transfer or hydrogen bonding to accelerate reactions. Organometallic catalysts can benefit in a similar manner. Our laboratory focuses on metal complexes with ligands containing nitrogen bases or their conjugate acids. In this presentation, both published<sup>1</sup> and recent, ongoing work from our group will be discussed.



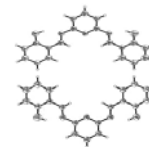
### References

1. Miranda-Soto, V.; Grotjahn, D. B.; DiPasquale, A. G.; Rheingold, A. L., *J. Am. Chem. Soc.* 2008, 130, 13200-13201. Grotjahn, D. B.; Larsen, C. R.; Gustafson, J. L.; Nair, R.; Sharma, A., *J. Am. Chem. Soc.* 2007, 129, 9592-9593.





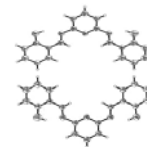
*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.



CONFERENCISTAS INVITADOS

INVITED LECTURES





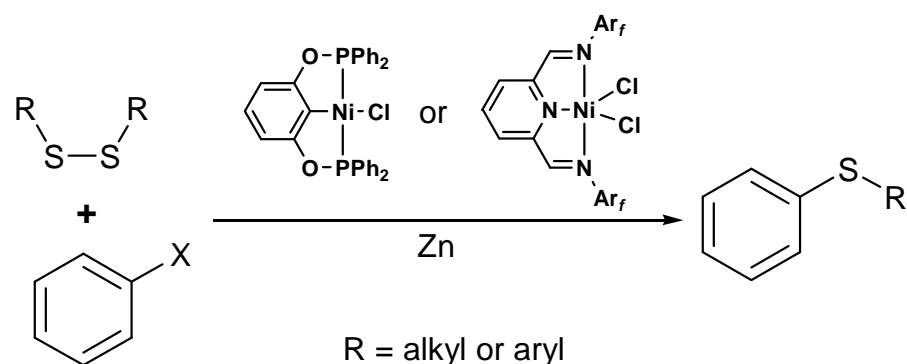
## ALKYL- AND ARYL THIOLATION OF ARYL HALIDES CATALYZED BY NICKEL(II) Pincer Complexes

Prof. David Morales-Morales

*Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Cd. Universitaria, Circuito exterior. Coyoacán, 04510, México, D. F. E mail: damor@unam.mx.*

The increasing interest in the use and applications of diarylthioethers and alkylarylthioethers has led in recent years to the design of efficient and high yield methods for their synthesis.<sup>1</sup> Moreover, the scope and application of organosulfur chemistry in organic synthetic reactions has increased tremendously since sulfur-containing groups serve as an important auxiliary function in synthetic sequences.<sup>2</sup> Additionally, arylsulfides are a common functionality found in a number of drugs commonly used for the treatment of diabetes, Alzheimer's, and Parkinson's diseases.<sup>3</sup> On the other hand, transition metal complex-catalyzed reactions have made a great contribution to the recent growth of organic synthesis. Moreover, in recent years several useful transformations of sulfur containing compounds using transition metal catalysts have been developed.<sup>4</sup> In the particular case of arylsulfides, their metal-catalyzed synthesis has included the cross coupling of thiols with aryl halides using copper compounds under basic conditions or palladium catalysts.<sup>5</sup> Nevertheless, the metal catalyzed thiolation of arylhalides with disulfides has been scarcely studied.<sup>6</sup>

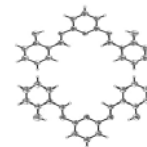
Thus, in the present talk we would like to report our recent developments in the use of Ni(II) pincer complexes as efficient and selective catalysts for the cross coupling of (RS)<sub>2</sub> and halobenzenes. Insights into the isolation of potential intermediates in this process and the proposal of a plausible reaction mechanism will also be discussed.



*Acknowledgements: The support of this research by CONACYT (F58692) and DGAPA-UNAM (IN 227008) is gratefully acknowledged.*

## References

1. See for instance: a) S. V. Ley, A. W. Thomas. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2003**, *42*, 5400. b) T. Kondo, T. Mitsudo. *Chem. Rev.* **2000**, *100*, 3205.
2. A. Thuillier, P. Metzner. *Sulfur Reagents in Organic Synthesis*; Academic Press. New York, **1994**.
3. See for instance: S. F. Nielsen, E. Ø. Nielsen, G. M. Olsen, T. Liljefors, D. Peters. *J. Med. Chem.* **2000**, *43*, 2217.
4. See for instance: *Transition Metal Sulfur Chemistry. Biological and Industrial Significance*. E. I. Stiefel, K. Matsumoto. Eds. ACS Symposium Series 653. Washington, D.C. **1996**.
5. See for instance: a) C. G. Bates, R. K. Gujadhur, D. Venkataraman. *Org. Lett.* **2002**, *4*, 2803. b) F. Y. Kwong, S. L. Buchwald. *Org. Lett.* **2002**, *4*, 3517.
6. See for instance: a) T. Nishino, Y. Nishiyama, N. Sonoda. *Chem. Lett.* **2003**, *32*, 918. b) N. Taniguchi. *J. Org. Chem.* **2004**, *69*, 6904.



## CHEMICAL FUNCTIONALIZATION OF CARBON NANOTUBES: PRINCIPLES AND APPLICATIONS

Prof. Carlos Velasco-Santos

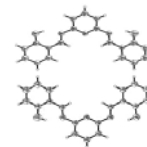
*Departamento de Metal Mecánica, División de Estudios de Posgrado e Investigación, Ingeniería en Materiales, Instituto Tecnológico de Querétaro, Av. Tecnológico s/n, Col. Centro, Santiago de Querétaro, Querétaro 76000, MÉXICO. Email carlosv@fata.unam.mx, cvelasco@itq.edu.mx*

Carbon nanotubes represent one of the most important materials in nanoscience and nanotechnology today. The exceptional properties that these materials possess open new fields in science and engineering. Additionally, the chemistry associated to these materials starts to play an important role, inasmuch, new moieties inserted by different chemical routes, inside and outside of carbon nanotube surfaces, have shown to be able to modify their structure and properties. To this date, new properties have been found in chemically-modified nanotubes and diverse potential applications are suggested for these materials.<sup>1,2</sup> One of the most frequent applications for these carbon materials is their inclusion as reinforcement in polymer matrices, due to the amazing structural, mechanical, electrical, chemical and thermal properties that carbon nanotubes possess, suggesting that these materials are ideal to produce new polymer nanocomposites.<sup>3,4</sup> In this lecture the principles of carbon nanotubes and chemical functionalization of these materials are presented. Basic and novel modifications developments in carbon nanotubes by our research group are shown. The chemical functionalizations considered are: oxidation, silanization, grafting of synthetic and natural polymers and modification with amines. Advantages of covalent and non covalent bonds with polymers in carbon nanotubes surfaces are also discussed. In addition, the properties and interface of polymer nanocomposites using carbon nanotubes after chemical functionalization are compared with nanocomposites developed with unmodified carbon nanotubes. The new challenges to create a new age of multifunctional composite materials, another possible applications and current and future research are also discussed.

## References

1. Tasis, T.; Tagmatarchis, N.; Bianco, A.; Prato, M. Chemistry of carbon nanotubes. *Chem. Rev.* 2006, 106, 1105.
2. Velasco-Santos C., Martínez-Hernández A. L. and Castaño V. M., "Chemical functionalization of carbon nanotubes" in "Focus on nanotubes research", Edited Martin D. A., Nova Science Publishers Inc. 2006, Vol. I, 97.
3. Ruan, S.L.; Gaob, P.; Yangb, X.G.; Yu, T.X. Toughening high performance ultrahigh molecular weight polyethylene using multiwalled carbon nanotubes. *Polymer.* 2003, 44(19), 5643-5654
4. .Martínez-Hernández A. L. Velasco-Santos C., and Castaño V. M., " Polymer- Carbon Nanotube Composites: Synthesis Properties and Applications" in "Chemistry of Carbon Nanotubes", Edited Basiuk V., Baisuk E., American Scientific Publishers. 2008, Vol. II, 161.





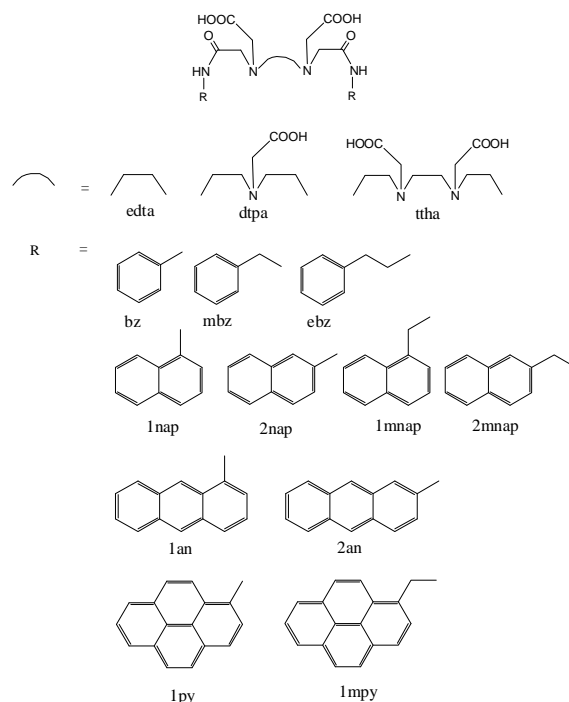
**DERIVADOS BISCROMOFÓRICOS DE ÁCIDOS  
POLIAMINOPOLICARBOXÍLICOS: NUEVOS QUIMIOSENSORES  
FLUORESCENTES DE METALES Y MOLÉCULAS ORGÁNICAS BIOACTIVAS  
EN SOLUCIÓN ACUOSA.**

Profa. Lorena Machi Lara

*Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora.  
Apartado Postal 130, Hermosillo, Sonora 83000, México.*

En la actualidad, la síntesis de quimiosensores fluorescentes para la detección y cuantificación de analitos en solución es un área de investigación en constante desarrollo dentro del ámbito de la química supramolecular. Una de las estrategias más novedosas para el diseño de estos compuestos es la unión de dos grupos aromáticos idénticos a través de cadenas de interconexión flexibles que contengan sitios de unión a metales.<sup>1-11</sup> La distancia entre las unidades aromáticas se modifica con la coordinación y permite monitorear la unión con el catión a través de cambios en la razón de intensidades excímero-monómero ( $I_E/I_M$ ). Este método radiométrico es de gran valor analítico ya que permite la auto-calibración de las diferentes técnicas fluorimétricas. En los últimos años, uno de los intereses de nuestro grupo de investigación ha sido la síntesis de receptores fluorescentes biscromofóricos, derivados de los ácidos poliaminopolicarboxílicos edta, dtpa y ttha, funcionalizados con grupos aromáticos benceno, naftaleno, antraceno o pireno (Esquema I).<sup>9-11</sup> Los compuestos obtenidos son solubles en agua y presentan novedosas respuestas fluorescentes al pH, con perfiles de intensidad tipo encendido-apagado que correlacionan con los diferentes estados de protonación de las unidades poliaminocarboxílicas. Los cambios en la longitud de la cadena de interconexión y en el tipo de grupos aromáticos incorporados han permitido observar diferentes modos de respuesta a la coordinación metálica, los cuales incluyen incremento o disminución en la intensidad de emisión del excímero y, en algunos casos, respuestas radiométricas lineales en función de la concentración del metal. En la presentación se mostrarán los principales resultados del estudio de las propiedades fluorescentes, ácido-base y de coordinación metálica del grupo

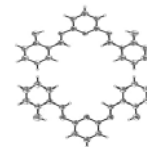
de compuestos preparados en este trabajo.



Esquema I

## References

1. J. Kawakami, Y. Komai, T. Sumori, A. Fukushi, K. Shimozaki, S. Ito, J. Photochem. Photobiol. A 139 (2001) 71.
2. J. Kawakami, A. Fukushi, S. Ito, S. Chem. Lett. 28 (1999) 955.
3. Y. Kakizawa, T. Akita, H. Nakamura, Chem. Lett. (1993) 1671.
4. J.-S. Yang, C.-S. Lin, C.-Y. Hwang, Org. Lett. 3 (2001) 889.
5. Y. Suzuki, T. Morozumi, H. Nakamura, M. Shimomura, T. Hayashita, R.A. Bartsh, J. Phys. Chem. B 102 (1998) 7910.
6. J.A. Sclafani, M.T. Maranto, T.M. Sisk, S.A. Van Arman. Tetrahedron Lett. 37 (1996) 2193.
7. F. Sancenón, A.B. Descalzo, J. M. Lloris, R. Martínez-Máñez, T. Pardo, M. J. Seguí, J. Soto, Polyhedron 21 (2002) 1397.
8. S. A. Van Arman, T.M. Sisk, D.M. Zawrotny, Lett. Org. Chem. 2 (2005) 54.
9. L. Machi, H. Santacruz, M. Sánchez, M. Inoue, Supramol. Chem. 18 (2006) 561.
10. L. Machi, H. Santacruz, M. Sánchez, M. Inoue, Inorg. Chem. Comm. 10 (2007) 547.
11. L. Machi, I.C. Muñoz, R. Pérez-González, M. Sánchez and M. Inoue, Supramol. Chem. (2009) DOI: 10.1080/10610270802709360.



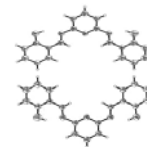
## **ENABLING LOW ENERGY INTENSIVE LARGE SCALE SEPARATIONS VIA ADVANCED MEMBRANE PROCESSES**

Prof. William J. Koros

School of Chemical & Biomolecular Engineering  
Georgia Institute of Technology  
*Atlanta, Georgia 30332-0100*

In energy-intensive industries like those in the petrochemical sector, most large-scale separations still rely upon thermally driven operations such as distillation. Energy intensity and carbon dioxide emissions associated with such separations could be reduced by more than a full order of magnitude in cases where thermally driven separation processes can be eliminated. While understandable in thermodynamic terms, a new generation of separation materials and devices is required to implement such a vision. Nanostructured membranes have emerged as the leading candidates to enable a fundamental reduction in energy intensity for large scale separations. To have a major impact, the full spectrum of nanostructured materials ranging from pure inorganics and carbons to pure organic polymers must be included. Hybrid materials containing low volume percentages of molecular sieve nanoscopic dispersed phases in a polymer continuous phase have already shown promising results. Such work, however, must be extended greatly to achieve the precise separations required to impact the full range of high energy intensity separations relevant to bulk commodity separations impacting global energy consumption. Identifying and pursuing practical approaches to achieve these and other revolutionary materials requires cooperation of chemical engineers with materials scientists and systems modelers. Based on this perspective, a path forward is proposed to the next generation of membranes suitable for processing the challenging feed streams that must be handled to significantly improve the efficiency of energy use in large scale separations.





## LA OXIDACIÓN ANÓDICA DE LOS CARBOXILATOS COMO MÉTODO DE FUNCIONALIZACIÓN DE ELECTRODOS DE CARBONO

Prof. Felipe J. González-Bravo

*Departamento de Química del Centro de Investigación y Estudios Avanzados del IPN,  
Av. IPN 250., Apdo. Postal 1166. C.P. 07360, D.F., México  
E mail: fgonzale@cinvestav.mx.*

La idea de generar electrodos químicamente modificados surgió de la necesidad de controlar las propiedades químicas de su superficie, esperando que ésta adquiriera las características de las moléculas ancladas. Aunque se han empleado diferentes substratos para la preparación de esta clase de electrodos, los materiales a base de carbono son particularmente interesantes debido a sus propiedades físicas y químicas.

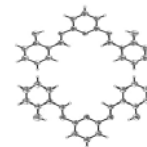
La modificación de superficies de carbono se abordó preliminarmente en pretratamientos de electrodos en medio acuoso y bajo condiciones drásticas de oxidación, lo que permitió la introducción no selectiva de una amplia variedad de grupos funcionales oxigenados sobre la superficie. Este inconveniente fue parcialmente superado con estrategias electroquímicas alternativas que conducen a la inmovilización covalente de monocapas o multicapas de grupos orgánicos bien definidos.<sup>1,2</sup> De esta forma, en las últimas dos décadas, se han diseñado varios métodos electroquímicos de modificación de superficies de carbono, por ejemplo, por reducción de cationes de aril-diazonio, reducción de sales de iodonio, oxidación de aminas, oxidación de alcoholes y por oxidación de arilacetatos. Actualmente, el método más aludido para la modificación de superficies de carbono es la reducción de sales de arildiazonio; sin embargo, debido a la mayor accesibilidad de los ácidos carboxílicos, y consecuentemente de sus sales, la ruta de oxidación promete ser más simple, diversa y podría resultar económicamente mas viable para alguna aplicación futura.<sup>3</sup> Bajo esta perspectiva, este trabajo se enfoca a profundizar en el conocimiento de la ruta oxidativa de los carboxilatos y a la búsqueda de métodos alternativos que funcionen bajo un principio similar.

La oxidación anódica de los carboxilatos es uno de las herramientas más importantes y útiles para la preparación de una gran variedad de compuestos orgánicos derivados de una química radicalica (reacción Kolbe) o carbocatiónica (reacción Non-Kolbe). Aunque la reacción ha sido extensamente estudiada desde un punto de vista sintético, su análisis mecanístico mediante técnicas electroquímicas, sólo se ha llevado a cabo para algunos casos. La aplicación del método para la preparación de electrodos modificados tampoco se ha desarrollado mucho y sólo se ha enfocado al caso de arilacetatos substituidos o arilalquilcarboxilatos, lo que ha permitido la inmovilización eficiente de capas de grupos arilmetilo y arilalquilo sobre las superficies de carbono.

En el caso particular de los carboxilatos alifáticos, la oxidación conduce principalmente a productos en solución derivados de una química carbocatiónica (acilamidas y acetamidas). Sin embargo, dado que en este caso el proceso de funcionalización superficial no procedió, se implementó una ruta indirecta utilizando mediadores redox organometálicos como el ferroceno y sus derivados. Como resultado de esto, se favoreció una ruta radicalica, lo que permitió funcionalizar superficies de carbono para los casos en los que la ruta de oxidación directa no lo permite.<sup>4</sup> La generalidad de las rutas de oxidación de carboxilatos, directa e indirecta, ha permitido vislumbrar una extensión de los métodos de modificación oxidativos a otro tipo de compuestos orgánicos aniónicos.

## References

1. Downard A. J. *Electroanalysis* 2000, 12, 1085.
2. MacCreery R. L. *Chem. Rev.* 2008, 108, 2646.
3. Andrieux C. P; González F. J.; Savéant, J-M.; *J. Am. Chem. Soc.* 1997, 119, 4292.
4. Astudillo P. D.; Galano A.; González F. J. *J. Electroanal. Chem.* 2007, 610, 137.



## POLÍMEROS EN BIOSISTEMAS

Prof. Roberto Olayo

*Departamento de Física. Universidad Autónoma Metropolitana- Iztapalapa. Apdo. Postal 55-534. México, D. F. 09340, México. E mail oagr@xanum.uam.mx.*

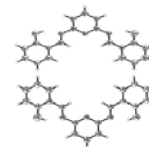
El desarrollo de la investigación en materiales ha logrado avances importantes en México en los últimos años. Se han abierto una gran cantidad de centros de investigación de excelente nivel, particularmente en los estados. La vinculación con el sector social ha sido uno de los principales objetivos, tanto de estos centros, como de los ubicados en la capital del país; sin embargo, ésta ha sido incipiente. La presente plática propone la vinculación de los centros de materiales con el sector salud. Trabajando en biosensores, biomateriales y materiales para medicina regenerativa. El sector salud tiene la infraestructura y las necesidades que permiten esta interacción y el impacto social que puede tener este tipo de investigación, justifica el que se invierta esfuerzo en conseguir esta vinculación. Se presentan varios proyectos en los que ha trabajado el autor colaborando con diferentes instituciones del sector salud y los grupos de diferentes centros de investigación, se presentan resultados en biopolímeros,<sup>1</sup> biosensores,<sup>2</sup> medicina regenerativa<sup>3</sup> e ingeniería de tejidos.

### Referencias

1. Alonso, D.; Gimeno, M.; Olayo, R.; Vázquez-Torres, H.; Sepulveda-Sánchez, J. D.; Shirai, K.; Carbohydrate Polymers 2009, 77, 536
2. Castillo-Ortega, M. M.; Rodríguez, D. E.; Encinas, J. C.; Plascencia, M.; Méndez-Velarde, F. A.; Olayo, R.; Sensors & Actuators: B. Chemical, 2002, 85, 19.
3. Olayo, R.; Ríos, C.; Salgado-Ceballos, H.; Cruz, G. J.; Morales, J.; Olayo, M. G.; Alvarez, A. L.; Lozano, R.; Morales, J. C.; Diaz-Ruiz, A.; J. of Materials Sci.-Mat. in Med. 2008, 19, 817.





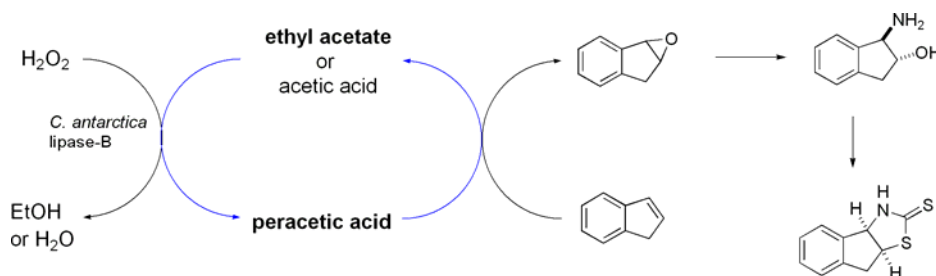


## SYNTHESES OF ANTI-TUBERCULOSIS DITERPENE EROGORGIAENE EMPLOYING AN INDENE-BASED CHIRAL AUXILIARY

Horacio F. Olivo,\* Moises Romero-Ortega, Adam Tordoff, Luis Hernandez-Garcia and Sena Dzakuma.

*Medicinal and Natural Products Chemistry, The University of Iowa, Iowa City, Iowa 5242.  
E mail: horacio-olivo@uiowa.edu.*

The worldwide spread of *Mycobacterium tuberculosis* and emergence of multi drug resistant (MDR) strains creates a demand for new anti tubercular agents with distinct mode of action. Twenty plants from the Northeast part of Mexico commonly used to treat respiratory diseases were screened for activity against *M. tuberculosis*. Two plants showed activity. Bioessay-guided fractionation of *Leucophyllum frutescens* provided a diterpene with

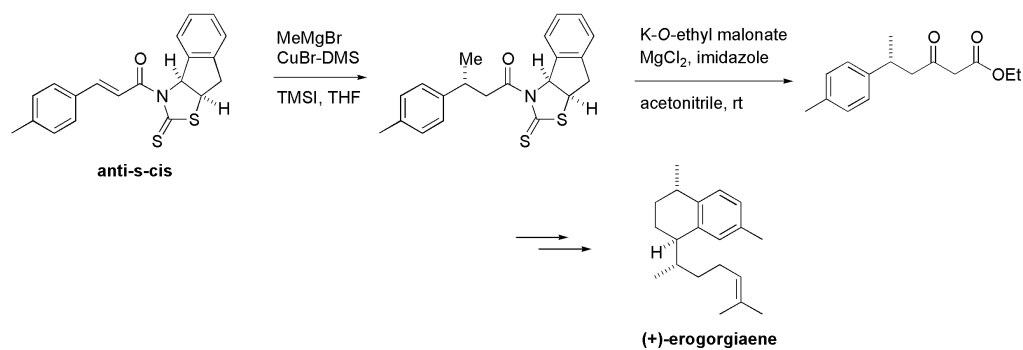


structure similar to erogorgiaene, isolated from the West Indian sea whip *Pseudotergorgia elisabethae*. We are interested in determining the exact stereochemical features of the new diterpene by chemical synthesis. To achieve our goal, we have designed a synthetic strategy that will allow us to prepare different isomers of these diterpenes. These diterpenes will be tested and their biological activity compared to the natural ones.

Chiral auxiliaries are valuable tools for asymmetric synthesis. The ideal chiral auxiliary has the following characteristics: readily attached, highly diastereoselective transformation, easily removed without racemization, separable from product and recyclable. We have recently developed an indene-based thiazolidinethione chiral auxiliary with these properties.<sup>1-3</sup> The synthesis of this chiral auxiliary requires a chemo-enzymatic epoxidation

of indene (Scheme I). We are investigating the acceleration of this reaction using conventional heating and microwave irradiation.

We are currently investigating the asymmetric 1,4-conjugate addition of organocuprate reagents to *N*-enoyl thiazolidinethiones, oxazolidinethiones, and thiazolidinones (Scheme II). This reaction will be highly valuable in a practical synthesis of diterpenoids with anti-tuberculoid activity. These chiral auxiliaries will allow us to have a short synthesis of erogorgiaene and analogs to be tested against *M. tuberculosis*.



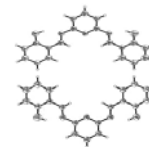
Scheme I

## References

1. Osorio-Lozada, A.; Olivo, H. F. *Org. Lett.* 2008, 10, 617-620.
2. Tello-Aburto, R.; Olivo, H. F. *Org. Lett.* 2008, 10, 2191-2194.
3. Osorio-Lozada, A.; Olivo, H. F. *J. Org. Chem.* 2009, 74, 1360-1363.



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.

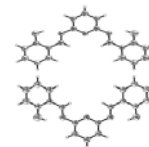


TRABAJOS ORALES

ORAL CONTRIBUTIONS

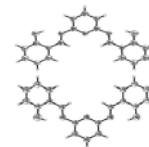


*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.





*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.

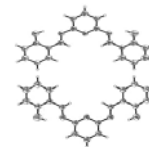


CATÁLISIS

CATALYSIS



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.



## HIDROGENACIÓN HOMOGÉNEA DE IMINAS FLUOROAROMÁTICAS CON COMPUESTOS DE NIQUEL

Ana L. Iglesias,<sup>1</sup> Juventino J. García<sup>2\*</sup>

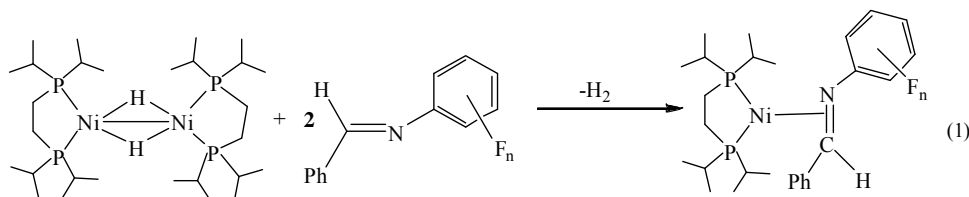
(1) CITEC, UABC Unidad Valle de las Palmas, Tijuana B.C.

(2) Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria 04510, México, D. F.

La aminas fluoradas son importantes bloques de construcción en el área farmacéutica, así como en la industria de la química fina; por lo tanto, la hidrogenación de iminas es una reacción importante en química sintética.<sup>1</sup> La principal desventaja, es la baja reactividad que presenta el enlace C=N hacia la adición nucleofílica u otro tipo de transformación orgánica, de ahí que su activación a través de metales de transición, sea una área de investigación atractiva.

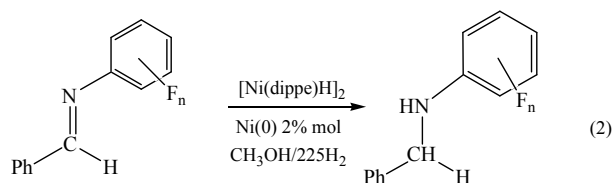
La hidrogenación de iminas normalmente se realiza a través de metales de transición como Rh,<sup>2</sup> e Ir,<sup>3</sup> en la cual se propone un intermedio  $\pi$  coordinado al centro metálico en el ciclo catalítico de estos metales.<sup>3,4</sup> Sin embargo, el modo preferente de coordinación del enlace C=N es  $\sigma$  ( $\eta^1$ ); aunque poco común, la coordinación  $\eta^2$ -C,N se ha reportado en algunos sistemas mono y bimetálicos.<sup>4</sup>

Nuestro grupo de investigación se ha interesado en la activación de enlaces C-CN,<sup>5</sup> reportando recientemente la síntesis y caracterización de una serie de complejos de Ni(0) con bases de Schiff fluoroaromáticas del tipo [(dippe)Ni( $\eta^2$ -C,N) PhHC=NR'Ph] (Ec. 1).<sup>6</sup>



Con el propósito de profundizar y explorar el potencial catalítico de este sistema, se llevó a cabo la hidrogenación catalítica de una serie de iminas fluoradas con [Ni(dippe)( $\mu$ -H)]<sub>2</sub> (Ec. 2). Se estudiaron diversas condiciones de reacción como tipo de disolvente,

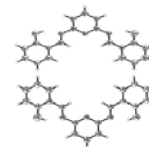
temperatura, presión de H<sub>2</sub> y tiempo de reacción. En general, se observa que la conversión depende de la polaridad del disolvente; se obtuvieron rendimientos excelentes en disolventes polares y próticos como metanol. La hidrogenación por transferencia de hidrógeno en estos substratos, se observó en condiciones estequiométricas, mientras que en condiciones catalíticas se necesita presión de H<sub>2</sub> para desplazar el equilibrio hacia la formación de la amina. En general, el rendimiento de reacción, aumenta en sustratos con mayor carácter electropositivo (mayor sustitución de flúor sobre la imina). Este es el primer ejemplo donde se observa la coordinación  $\eta^2$  del C=N, como intermedio en la hidrogenación de iminas.<sup>7</sup>



## References

1. a) Samec, J., Mony, S.M. Backvall, L., *Can. J. Chem.* **2005**, *83*, 909-916, b) Liu, X., Zhu, S., Wang, S. *Synthesis* **2004**, *5*, 683-691
2. Fryzuk, M. D., Piers, W. E. *Organometallics* **1990**, *9*, 986-998, b) Fryzuk, M. D. *Organometallics* **1988**, *7*, 2062-2065.
3. Longley, C. J., Goodwin, T. J., Wilkinson, G. *Polyhedron* **1986**, *5*, 1625-1628., b) Marcazzan, P., Patrick, B. O., James, B. R. *Inorg. Chem.* **2004**, *43*, 6838-6841.
4. Landeta, V. R., Peruzzini, M., Herrera, V., Bianchini, C., Sánchez-Delgado, R. A. *Organometallics* **2006**, *26*, 403-409, b) Jiang, X., Minnaard, A. J., Feringa, B. L., Andrien, J. G. O., Boogers, J. A. F., Vries, J. G. *Org. Lett.* **2003**, *5*, 1503-1506.
5. a) Acosta-Ramírez, A., Muñoz-Hernández, M., Jones, W. D., García, J. J. *J. Organomet. Chem.* **2006**, *691*, 3895-3091; b) Acosta-Ramírez, A., Muñoz-Hernández, M., Jones, W. D., García, J. J. *Organometallics*, **2007**, *26*, 5766-5769
6. Iglesias, A.L, Muñoz-Hernández, M. Garcia, J. J., *J. Organomet. Chem.* **2007**, *692*, 3498-3507
7. Iglesias, A. L, Garcia, J. J. *J. Molecular Catal. A: Chemical* **2009**, *298* 51-59.





## HETEROGENIZED HOMOGENEOUS CHIRAL LIGANDS AND THEIR APPLICATION IN ASYMMETRIC SYNTHESIS

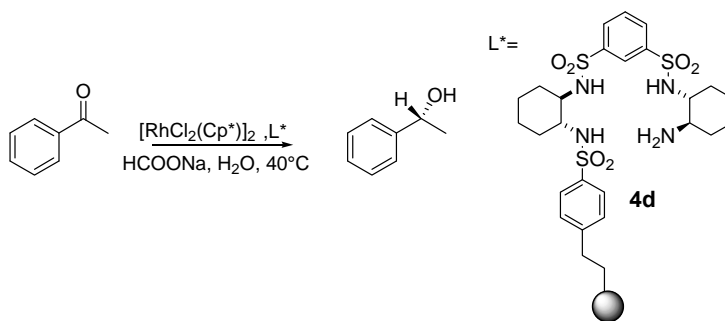
Norma A. Cortez,<sup>1</sup> Gerardo Aguirre,<sup>1</sup> Miguel Parra-Hake,<sup>1</sup> Jorge G. González,<sup>2</sup> Ratnasamy Somanathan<sup>1\*</sup>

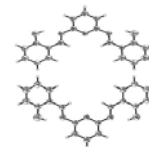
(1) Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22000, México.

(2) Facultad de Ciencias Químicas Universidad de Colima. Col. Villas San Sebastián. Colima 28045, México

Supported metal complexes as catalyst continuously attract the interest of a growing part of the scientific community for the advantages that they offer with respect to their soluble counterparts. Some of these advantages are the robustness, the increased air and moisture stability, ease of separation, and the potential recyclability, when used as heterogeneous catalyst. The main supports used for immobilization of homogeneous catalyst fall into two broad categories: organic and inorganic supports. The organic supports used for immobilization are generally soluble or insoluble polymer resins or dendrimers. The inorganic supports involve amorphous silica and mesoporous silica, such as MCM-41 and SBA-15 with well defined pore structures.

In this presentation immobilization of chiral mono and bisulfonamides onto resin, amorphous and mesoporous silica, and their application as catalyst in the asymmetric transfer hydrogenation and alkylation of carbonyl compounds will be discussed.



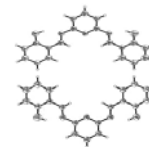


## References

1. Immobilized Chiral Metal Catalysts for Enantioselective Hydrogenation of Ketones. Somanathan, R., Cortez, N. A., Parra-Hake, M., Chávez, D., Aguirre, G. *Mini-Reviews in Organic Chemistry*, 5, 313-322 (2008).
2. Enantioselective addition of organozinc to aldehydes and ketones catalyzed by immobilized chiral ligands. R. Somanathan, L.Z. Flores-López, R. Montalvo-González, D. Chávez, M. Parra-Hake and G. Aguirre. *Mini-Reviews in Organic Chemistry*, 7, (2009) in press.



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.

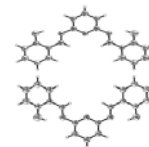


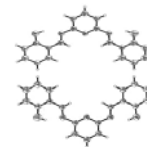
NANOTECNOLOGÍA

NANOTECHNOLOGY



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.





## **SÍNTESIS DE NANOPARTÍCULAS DE ORO Y PRUEBAS DE INTERACCIÓN CON DIFERENTES MOLÉCULAS.**

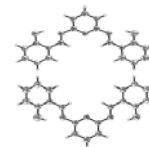
Edgar A. Reynoso,<sup>1</sup> Esteban Hernández,<sup>1</sup> Alfonso Fernández,<sup>2</sup> Marta E. Díaz,<sup>2</sup> Ignacio A. Rivero<sup>1\*</sup>

(1) *Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22000, México.*

*E mail: edgar\_alonso6@hotmail.com.*

(2) *Universidad de Oviedo, Departamento de Química Física y Analítica, Julián Clavería G. Planta 1ª, 33006, Oviedo, España.*

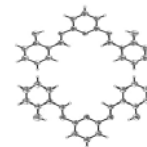
La nanotecnología está en un gran crecimiento, debido a las propiedades físicas y químicas únicas que presentan las nanopartículas (NPs) comparadas con el resto de los materiales. El prerrequisito principal para que exhiban propiedades ópticas, eléctricas, catalíticas y magnéticas, es que presenten una gran estabilidad ante la formación de agregados.<sup>1</sup> La vía más frecuente de síntesis en disolución es la reducción al estado elemental de un ión del metal dado en determinadas condiciones. Al comenzar a producirse átomos del metal, se inicia un proceso de aglutinación progresiva que provocaría la precipitación de macropartículas. Para evitarlo, la reducción se lleva a cabo en presencia de un agente estabilizador, que al adsorberse químicamente en la superficie de los “clusters”, evita su crecimiento excesivo, obteniéndose una suspensión estable de partículas coloidales. Como estabilizadores se emplean generalmente moléculas orgánicas con grupos tioles (-SH), dada la gran afinidad química de este grupo (base blanda de Pearson) por los metales nobles (ácidos blandos). Se han empleado una gran variedad de alcanotioles para derivatizar nanopartículas en disolución. La posibilidad de obtener suspensiones coloidales estables de partículas metálicas resulta muy prometedora en el campo de la catálisis, pues el área de contacto aumenta enormemente. Además, resulta interesante la posibilidad de emplear tioles con grupos funcionales en el otro extremo de la cadena carbonada, con el fin de obtener nanopartículas con propiedades útiles. Con este objetivo se han empleado dendrímeros, oligonucleótidos y moléculas receptoras capaces de establecer interacciones con sustratos adecuados, entre otras. Algunas de las aplicaciones de las NPs son 1) el



reconocimiento molecular, la derivatización de algunas de éstas NPs con aminas han sido aplicada a la identificación de iones, 2) en la determinación de secuencias específicas de DNA, además 3) en la detección de algunos aminoácidos mediante fluorescencia molecular; como la lisina utilizando nanopartículas derivatizadas con MUA (ácido 11-mercaptopundecanoico) que interactúan con europio.

La síntesis de las nanopartículas de oro se efectuó mediante el método de reducción química del tetracloroaurato en disolución acuosa empleando como agente reductor al citrato tribásico de sodio tanto para la obtención de nanopartículas sin funcionalizar como funcionalizadas con el colorante 4-(Dicianometileno)-2-metil-6-[*p*-(dimetilamino)stiril]-4*H*-pirano (DCM) ó ácido mercaptopundecanoico (MUA). El mecanismo de la reacción implica una oxidación del citrato tribásico de sodio para llevar a cabo la reducción de la sal metálica utilizada en este caso el tetracloroaurato para general las nanopartículas de oro y posteriormente funcionalizarlas.

En este trabajo se logró sintetizar nanopartículas de oro funcionalizadas y sin funcionalizar en medio acuoso con el colorante DCM y con el MUA empleando la síntesis por reducción química y el método de Brust-Schiffrin con un diámetro aproximado de 30 nm. Las nanopartículas sintetizadas fueron analizadas por XPS (Espectrometría fotoelectrónica de rayos X) la cual permite identificar el ambiente químico diferente que presentan las nanopartículas de oro al estar con un agente estabilizante como lo es el colorante DCM o estar sin funcionalizar. Las nanopartículas de oro sin funcionalizar y funcionalizadas fueron sometidas a pruebas de interacción con diferentes moléculas como son aminoácidos, compuestos de tipo tiol y compuestos con grupos nitrilo, obteniéndose que tienen mayor selectividad los compuestos que presentan grupos tiol o nitrilo. También se determinaron iones cianuro mediante fluorescencia molecular en una reacción de desplazamiento de los iones cianuro por el colorante DCM, logrando desarrollar un método para la determinación de este tipo de aniones en una concentración de  $1 \times 10^{-6}$  M.



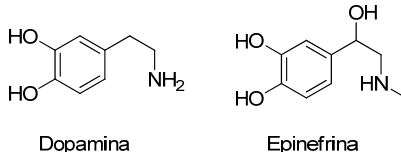
## SÍNTESIS DE NANOCOMPÓSITOS A BASE DE NANOTUBOS DE CARBONO Y NANOPARTÍCULAS METÁLICAS PARA LA DETERMINACIÓN ANALÍTICA DE CATECOLAMINAS

Edgar A. Reynoso,<sup>1</sup> Rosa María Félix,<sup>1\*</sup> Gabriel Alonso Núñez<sup>2</sup>

(1) Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22000, México, E mail: edgar\_alonso6@hotmail.com.

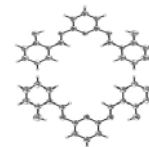
(2) Centro de Nanociencias y Nanotecnología. Km. 107 Carretera Tijuana-Ensenada. Apdo Postal 356 Ensenada, B. C. 22800, México.

Las catecolaminas son neurotransmisores muy importantes para la regulación del sistema nervioso central, relacionadas con algunos desordenes como son altos niveles de estrés y la obesidad. Las disfunciones de las vías catecolaminérgicas son trastornos bipolares y esquizofrénicos, provocando incluso deterioro de las funciones motrices. Dentro del grupo de las catecolaminas existe una gran variedad de compuestos dentro de los mas importantes se encuentran la dopamina y epinefrina.



La epinefrina es un importante neurotransmisor en el sistema nervioso central de los mamíferos y siendo posible su determinación *in vivo* electroquímicamente empleando electrodos a base de microfibras. Su determinación es importante ya que es empleada como medicamento en el tratamiento de la hipertensión, desordenes cardiacos y durante cirugías cardiacas. De igual manera la dopamina es un importante neurotransmisor el cual está involucrado en enfermedades como la esquizofrenia y parkinson<sup>3</sup>; debido a esto es importante desarrollar métodos selectivos y eficientes para su determinación. Muchos métodos se ha reportado para la determinación de catecolaminas por ejemplo electroquímicos, HPLC, electroforesis capilar y fluorimetricos debido a su alta sensibilidad.<sup>4</sup>

Una área importante de la ciencia que ha venido a revolucionar el desarrollo de sensores es



la nanotecnología la cual es la culminación de muchas facetas de la investigación son los materiales nanoestructurados ya que ofrecen un extraordinario potencial en el desarrollo de nuevas metodologías analíticas, como se ha venido demostrando en los últimos años con la síntesis de materiales molecularmente impresos, en el empleo de nanopartículas cuánticas, en la fabricación de sensores empleando nanotubos de carbono, etc.

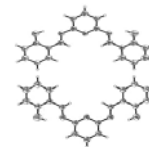
El descubrimiento de los nanotubos de carbono (CNTs) en 1991 por Iijima abrió un campo de investigación de enorme interés en Nanociencia y Nanotecnología.<sup>5</sup> Debido a su enorme potencial en aplicaciones relacionadas con el almacenamiento de hidrógeno, en la fabricación de transistores, diodos, sensores y actuadores, la síntesis y caracterización de los CNTs ha sido el objetivo de numerosos grupos de investigación en los últimos 15 años. Pero no sólo se han desarrollado materiales basados en carbono. Debido a las propiedades estructurales, mecánicas, eléctricas y su gran estabilidad las nanopartículas de metales nobles como Au, Pt, Pd se han considerado para desarrollar sensores electroquímicos para la determinación analítica de varias especies entre ellas las catecolaminas ya que debido a sus propiedades mecánicas y eléctricas pueden ser empleadas en la electrocatálisis.

En este trabajo se lleva a cabo la síntesis de nanopartículas y nanocompósitos a base de nanotubos de carbono y metales nobles como Au, Pd y Pt, empleando diferentes agentes reductores y condiciones de síntesis para la obtención de las nanopartículas y nanocompósitos, los cuales han sido caracterizados por espectrofotometría UV-Vis, Dispersión de Luz Dinámica (DLS), Microscopia Electrónica de Barrido (MEB), Microscopia Electrónica de Tunelaje (TEM) y Voltamperometría Cíclica (VC) para determinar la formación de las nanopartículas y los nanocompósitos midiendo el diámetro de las mismas y su actividad electrocatalítica en la determinación de dopamina.





*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.

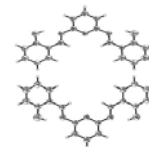


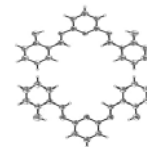
QUÍMICA ORGÁNICA

ORGANIC CHEMISTRY



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.





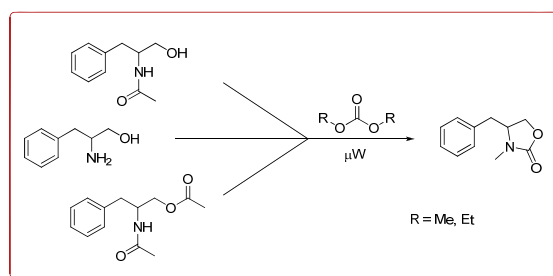
## SÍNTESIS EFICIENTE DE N-ALQUIL-2-OXAZOLIDINONAS ASISTIDAS POR MICROONDAS

Leticia Guerrero Rosales,<sup>1</sup> Adrián Ochoa Terán,<sup>1</sup> Ignacio A. Rivero Espejel<sup>1\*</sup>

(1) Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22500, México. E mail: [aochoat.itt@gmail.com](mailto:aochoat.itt@gmail.com)

El núcleo de 1,3-oxazolidin-2-ona es la estructura de un heterociclo muy popular en la química orgánica de síntesis desde el reporte en 1981 del uso de las oxazolidin-2-onas 4-susbstituídas enantioméricamente puras como auxiliares quirales en síntesis asimétrica.<sup>1</sup> Las oxazolidinonas también tienen una gran aplicación como grupos protectores para el sistema 1,2-aminoalcohol. Recientemente la introducción en el mercado farmacéutico de Linezolid,<sup>2</sup> un medicamento antibacterial basado en la oxazolidin-2-ona, atrajo el interés de científicos, dando como resultado la producción de diversas publicaciones. Para la construcción de este anillo de cinco miembros se han reportado una gran cantidad de rutas, una buena parte utiliza los 1,2-aminoalcoholes como substratos donde los carbonos C-4 y C-5 serán la base, los átomos de oxígeno y nitrógeno los soportes y el grupo carbonilo cerrará el anillo. El grupo carbonilo puede provenir de un reactante externo o estar presente en la molécula de inicio, como en el caso de los intermedios isocianatos. En general, los 1,2-aminoalcoholes pueden ser convertidos en carbamatos cíclicos utilizando fosgeno o sus equivalentes sintéticos un poco más seguros, tales como difosgeno, trifosgeno y urea. La alquilación posterior del grupo funcional NH implicaría la utilización de un halogenuro de alquilo y una base. Nuestro grupo de trabajo lleva tiempo estudiando por una parte las reacciones con carbonatos de dialquilo e irradiación de microondas,<sup>3</sup> considerando siempre la necesidad de métodos más rápidos, seguros y eficientes, y por otra parte la química de las oxazolidinonas.<sup>4</sup> En la exploración de nuevas alternativas de síntesis para la formación de oxazolidin-2-onas recientemente hemos logrado no sólo formar el anillo de cinco miembros característico de las oxazolidin-2-onas, sino también alquilar su grupo funcional NH en un solo paso de reacción, mediante el empleo de 1,2-

aminoalcoholes, carbonatos de dialquilo e irradiación de microondas (Esquema 1). Para aminoalcoholes en donde los grupos funcionales hidroxilo y amino fueron previamente mono o biprotegidos mediante una reacción de acilación hemos confirmado que la ciclación, alquilación y desprotección se obtiene en un solo paso de reacción generando la N-alkil-2-oxazolidinona correspondiente (Esquema 1). En el presente trabajo se describirán los avances obtenidos y la espectroscopia de IR y RMN de los productos obtenidos con esta nueva metodología.



**Esquema 1**

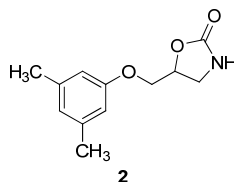
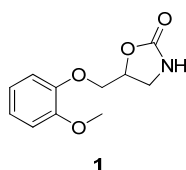
1. (a) Evans, D. A.; Takacs, J. M.; McGee, L. R.; Ennis, M. D.; Mathre, D. J.; Bartroli, J.; Pure Appl. Chem. 1981, 53, 1109 (b) Evans, D. A. C. Aldrichim. Acta 1982, 15, 23-32.
2. Barbachyn, M. R.; Ford, C.; Angew. W.; Chem. Int. Ed. 2003, 42, 2010-2023.
3. (a) Guerrero-R. Leticia. Estudio de reacciones con carbonatos asistidas por microondas. Tesis de Maestría en Ciencias en Química, Instituto Tecnológico de Tijuana, Centro de Graduados e Investigación, Tijuana, B. C., 2007. (b) Leticia Guerrero R. and Ignacio A. Rivero, Arkivoc 2008 (xi) 295-306. (c) Rivero, I. A.; Guerrero, L.; Espinoza, K. A.; Meza, M. C.; Rodríguez, J. R. Molecules 2009, 14, 1860-1868.
4. (a) Adrián Ochoa-Terán and Ignacio A. Rivero Arkivoc 2008 (ii) 235-242. (b) Adrián Ochoa-Terán and Ignacio A. Rivero Arkivoc 2008 (xiv) 330-343 Barker, J.; Kilner, M. Coord. Chem. Rev. 1994, 133, 219; Edelman, F. T. Coord. Chem. Rev. 1994, 137, 403.

## SÍNTESIS QUIMIOENZIMÁTICA DE 5-ARILOXIMETIL-1,3-OXAZOLIDINONAS ENANTIOPURAS

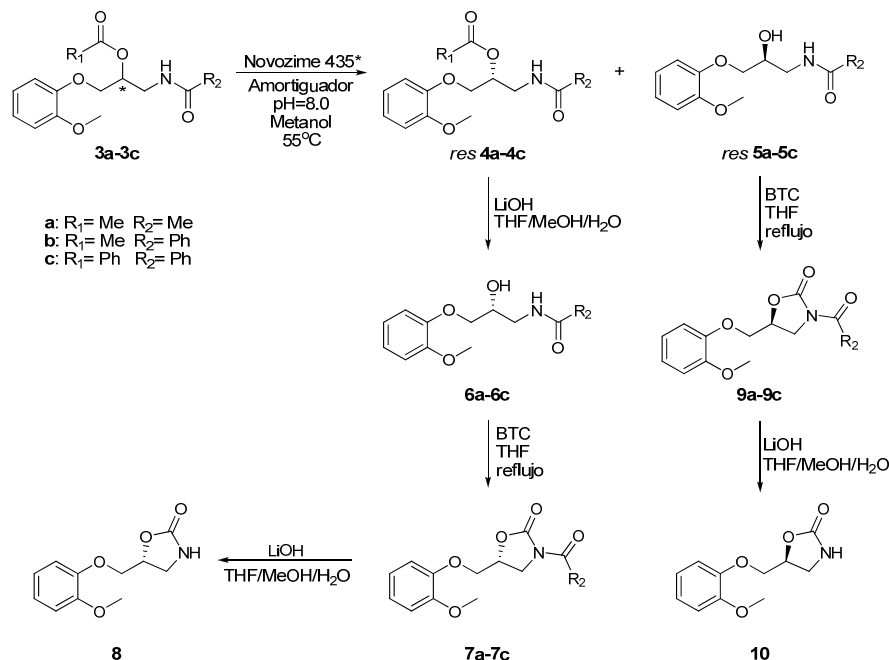
Adrián Ochoa Terán,<sup>1\*</sup> Ignacio A. Rivero Espejel,<sup>1</sup> Velia Osuna Galindo,<sup>1</sup> Jorge T. Escobedo Robledo<sup>2</sup>

- (1) Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22500, México. E-mail: aochoat.itt@gmail.com  
(2) Departamento de Ings. Química y Bioquímica del ITT. Calzada Tecnológico s/n Fracc. Tomás Aquino, Tijuana B.C., 22414. México.

Los compuestos de tipo 1,3-oxazolidin-2-ona son importantes debido al amplio espectro de propiedades biológicas que poseen. De manera especial, las 5-ariloximetil-1,3-oxazolidinonas son un grupo de compuestos que presentan actividad como agentes bloqueadores interneuronales o depresores de la transmisión sináptica central. Estos compuestos son generalmente antagonistas de la estricnina y se utilizan como relajantes musculares, anticonvulsivos y tranquilizantes. La mefenoxalona (Tripedone®) (**1**) es un relajante muscular y ansiolítico.<sup>1</sup>



La metaxalona (Skelatin®) (**2**) es un relajante muscular que actúa en el sistema nervioso central produciendo efectos relajantes musculares.<sup>1</sup> La síntesis de mefenoxalona y metaxalona fue reportada por Lundsford<sup>2</sup> en 1960 y existen solo algunos reportes en la literatura sobre la síntesis de estos compuestos. Aunque se ha descubierto que el enantiómero S es el que presenta actividad biológica, se han reportado pocos métodos para la preparación enantioselectiva de este producto.<sup>3</sup> Este grupo ha reportado una nueva ruta de síntesis para la obtención de mefenoxalona que se basa fundamentalmente en la adición de cianuro de trimetilsilano (TMSCN) al (o-metoxi)fenoxiacetaldehído y la ciclización con trifosgeno (BTC) del aminoalcohol correspondiente.<sup>4</sup>

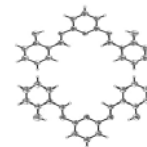


**Esquema 1.** Síntesis quimioenzimática de mefenoxalona (1).

En el presente trabajo se está desarrollando un modelo para la síntesis enantioselectiva de 5-ariloximetil-1,3-oxazolidin-2-onas como la mefenoxalona y metaxalona mediante la hidrólisis enzimática de aminoalcoholes diacilados **3A-C** seguido de una serie de reacciones de ciclización y desprotección (Esquema 1). Este método puede ser utilizado en la preparación de otros compuestos estructuralmente relacionados que son de importancia sintética y farmacológica.

## Referencias

1. Negwer, M.; Scharnow, H. G.; Organic Chemical Drugs and Their Synonyms, 8th Edn.; Wiley-VCH: Weinheim, 2001, 2760.
2. Lunsford, C. D.; Mays, R. P.; Richman, J. A.; Murphey, R. S.; J. Am. Chem. Soc. 1960, 82, 1166.
3. Bredikhin, A. A.; Bredikhina, Z. A.; Zakharychev, D. V.; Pashagin, A. V.; Tetrahedron: Asymmetry 2007, 18, 1239-1244.
4. Ochoa-Terán, A.; Rivero, I. A. ARKIVOC 2008, ii, 235-242.



## SÍNTESIS DE NUEVOS OXAAZACICLOFANOS COMO ANFITRIONES DE CATIONES ORGÁNICOS: ¿FORMACIÓN DE PSEUDOROTAXANOS?

Viviana Reyes Márquez,<sup>1</sup> Jorge Tiburcio,<sup>2</sup> Herbert Höpfl<sup>3</sup> y Karen Ochoa Lara<sup>1\*</sup>

(1) Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, 83000, Hermosillo, Son., México.

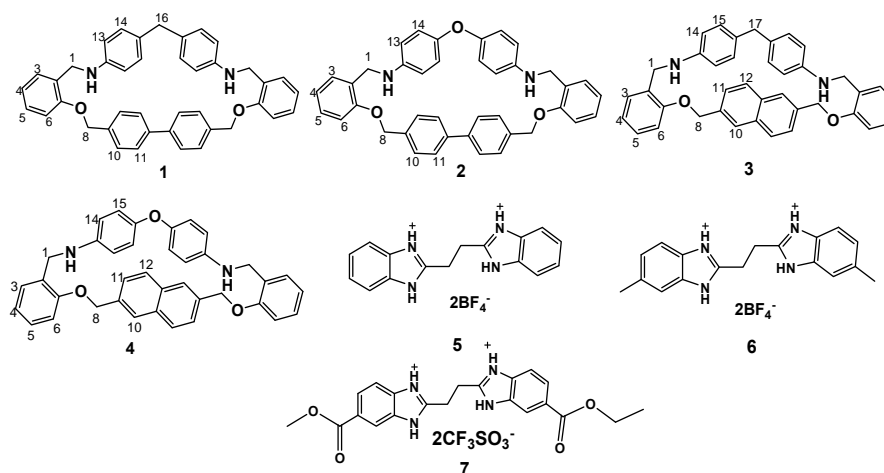
(2) Departamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, 07360, México D.F., México

(3) Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, 6221 Cuernavaca, Mor., México

Una familia de mucho interés en la química macrocíclica es la de los ciclofanos, los cuales se destacan por ser ampliamente utilizados como anfitriones de diferentes huéspedes. Al respecto, han sido reportados complejos de inclusión formados por ciclofanos y sistemas lineales (como ejes). A tales sistemas interconectados se les denomina pseudorotaxanos.<sup>1,2</sup>

En este trabajo se reporta la síntesis en buenos rendimientos de nuevos oxaazaciclofanos, empleando una ruta sintética previamente reportada por nuestro grupo<sup>3</sup> (ver compuestos **1-4** del Esquema 1). También se incluyen los estudios realizados para evaluar la habilidad de los macrociclos **3** y **4** de formar complejos estables en disolución en un sistema 50:50 CHCl<sub>3</sub>-MeCN con los ejes catiónicos **5**<sup>2+</sup>-**7**<sup>2+</sup> (Esquema 1), por las técnicas de RMN de <sup>1</sup>H y de UV/Vis. Las titulaciones realizadas por RMN de <sup>1</sup>H permitieron la construcción de las gráficas del desplazamiento químico de los protones de los macrociclos vs. la concentración del catión, observándose comportamientos hiperbólicos típicos de complejos de estequiometría 1:1. El ajuste de los datos de estas gráficas permitió la determinación de las constantes de asociación (del orden de 10<sup>2</sup>-10<sup>3</sup> M<sup>-1</sup>). Por otro lado, mediante la técnica UV/Vis se observó la aparición de un nuevo máximo de absorción, a aproximadamente 405 nm (color amarillo), tras la formación del complejo de transferencia de carga macrociclo-dicatió. Las titulaciones realizadas para algunos sistemas por dicha técnica, permitieron confirmar las constantes obtenidas por RMN de <sup>1</sup>H.

También fue posible elucidar mediante el método de JOB, que el complejo  $4-6^{2+}$  corresponde al de una estequiometría 1:1. Adicionalmente se realizaron estudios de complejación por la técnica de espectrometría de masas. Los resultados obtenidos indican la formación de un complejo macrociclo-dicación en una relación 1:1 en los sistemas estudiados.



**Esquema 1.** Estructura química de los oxazaciclofanos (**1-4**) reportados en este trabajo y de los dicaciones (**5-7**) estudiados como ejes para la formación de pseudorotaxanos.

Aunque hasta el momento se tienen evidencias indirectas que sugieren la formación de los complejos de inclusión, es necesario estudiarlos a mayor detalle y de preferencia obtener cristales de los complejos para estudiarlos por la técnica de difracción de rayos X.

## Referencias

- Schneider, H.; Yatsimirsky, A.; *Principles and Methods in Supramolecular Chemistry*. John Wiley and Sons, England, 2000 (y referencias citadas allí).
- Amabilino, D. B.; Stoddart, F.; *Chem. Rev.* 1995, 95, 2725-2828.
- a) Reyes, V.; Sánchez, M.; Höpfl, H.; Lara, K.; *J. Incl. Phen. Macro. Chem.*, 2009  
b) Reyes, V.; Lara, K.; Sánchez, M.; Gálvez, J. C.; *Arkivoc*, 2008, 115-123.

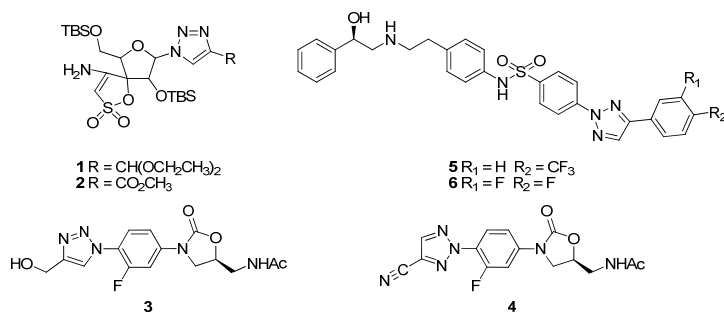


## SÍNTESIS DE TRIAZOLES A PARTIR DE AMINOÁCIDOS MODIFICADOS

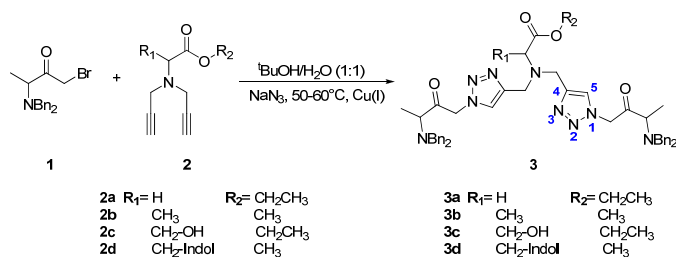
Juan I. Sarmiento-Sánchez, Adrián Ochoa-Terán, Ignacio A. Rivero\*

Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22500, México. E mail: irivero@tectijuana.mx

En los últimos años, los triazoles han recibido mucha atención debido a su amplia gama de aplicaciones en la química orgánica y medicinal. Específicamente, los 1,2,3-triazoles se han utilizado en productos farmacéuticos, agroquímicos, colorantes, materiales fotográficos y como inhibidores de la corrosión<sup>1</sup>. Existe un gran número de triazoles que presentan actividad biológica, por ejemplo actividad anti-VIH<sup>2</sup> (1 y 2), actividad antimicrobiana frente a bacterias Gram positivas (3 y 4),<sup>3</sup> y como receptores  $\beta$ -adrenérgicos (5 y 6).<sup>4</sup>



Se han descrito varios métodos para la síntesis de los 1,2,3-triazoles; comúnmente estos compuestos se sintetizan a partir de la cicloadición termoinducida de Huisgen<sup>5</sup> entre azidas y alquinos. Esta reacción de cicloadición usualmente genera mezclas de los regioisómeros 1,4- y 1,5-disustituidos. Recientemente, Sharpless y Meldal<sup>6</sup> reportaron que el regioisómero 1,4-disustituido se puede sintetizar utilizando un catalizador de cobre(I) a partir de azidas y alquinos. Nosotros llevamos a cabo la síntesis de bis 1,2,3-triazoles a partir de aminoácidos modificados con un grupo azida y un alquino. La azida orgánica empleada fue generada in situ a partir de la  $\alpha$ -bromometilcetona derivada de la L-alanina con azida de sodio.



Al analizar los espectros de resonancia magnética nuclear de <sup>13</sup>C de 3a-3d se observó que R1 tiene inducción sobre la formación de los compuestos, en el caso particular donde R1 es voluminoso 3d permite la distinción de ambos carbonos de cetona, así como de los C4 y C5 de los heterociclos de los triazoles. Esto puede deberse a que este compuesto no presenta un giro libre del enlace del centro estereogénico y por consiguiente los carbonos más cercanos a este punto se hacen diferentes.

## Referencias

1. Fan, W. Q.; Katritzky, A. R.; In *Comprehensive Heterocycle Chem. II*; Katritzky, A. R.; Rees, C. W.; Scriven, C. W. V. (Eds.); Elsevier Science: Oxford, UK, 1996, 4, 1–126.
2. Alvarez, R.; Elazquez, S. V.; San, F.; Aquaro, S.; De, C.; Perno, C. F.; Karlsson, A. Balzarini, J.; Camarasa, M. J. *J. Med. Chem.* 1994, 37, 4185.
3. Genin, M. J.; Allwine, D. A.; Anderson, D. J.; Barbachyn, M. R.; Emmert, D. E.; Garmon, S. A.; Graber, D. R.; Grega, K. C.; Hester, J. B.; Hutchinson, D. K.; Morris, J.; Reischer, R. J.; Ford, C. W.; Zurenco, G. E.; Hamel, J. C.; Schaadt, R. D.; Stapertand, D.; Yagi, B. H. *J. Med. Chem.* 2000, 43, 953
4. Brockunier, L. L.; Parmee, E. R.; Ok, H. O.; Candelore, M. R.; Cascieri, M. A.; Colwell, L. F.; Deng, L.; Feeney, W. P.; Forest, M. J.; Hom, G. J.; MacIntyre, D. E.; Tota, L.; Wyvratt, M. J.; Fisher, M. H.; Weber, A. E. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2000, 10, 2111
5. Huisgen, R.; Szeimies, G.; Mübius, L. *Chem. Ber.* 1967, 100, 2494.
6. (a) Rostovtsev, V. V.; Green, L. G.; Fokin, V. V.; Sharpless, K. B. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2002, 41, 2596; (b) Tornøe, C. W.; Christensen, C.; Meldal, M. *J. Org. Chem.* 2002, 67, 3057.

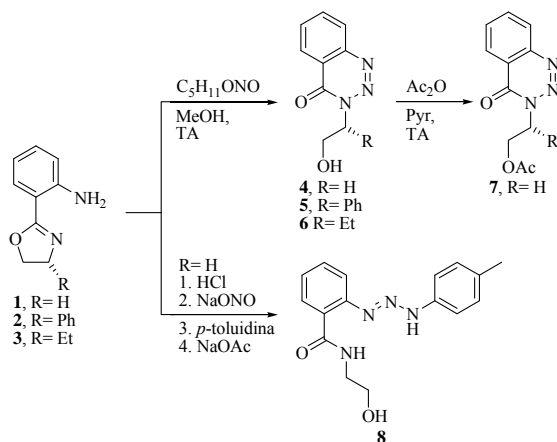
## SÍNTESIS DE COMPUESTOS NITROGENADOS A PARTIR DE 2-(OXAZOLINIL)ANILINAS Y AUTOENSAMBLAJE A TRAVÉS DE ENLACES DE HIDRÓGENO.

Fernando Rocha-Alonzo,<sup>1</sup> Gerardo Aguirre-Hernández,<sup>1</sup> Daniel Chávez,<sup>1</sup> David Morales-Morales,<sup>2</sup> Miguel Parra-Hake<sup>1\*</sup>

(1) Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22500, México.

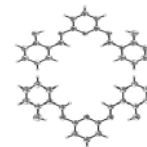
(2) Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Química, Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, México 04510, México. E mail: miguelhake@yahoo.com

El grupo de química inorgánica del Centro de Graduados e Investigación en Química ha enfocado su interés hacia la síntesis de compuestos nitrogenados con aplicación potencial en química de coordinación y catálisis. Durante estos estudios se logró obtener la síntesis de cuatro 1,2,3-triazinonas y de un 1,3-bis(aril)triazeno orto-substituido a partir de 2-(oxazolinil)anilinas (Esquema 1).



**Esquema 1.** Síntesis de compuestos nitrogenados a partir de 2-(oxazolinil)anilinas.

En relación a las 1,2,3-triazinonas, se ha reportado que esta clase de compuestos presentan una gran variedad de actividades biológicas. Por ejemplo, estos compuestos presentan actividad como agentes sedantes, diuréticos, anestésicos, antiartríticos y antitumorales.<sup>1</sup> De esta forma, el método de síntesis desarrollado en este trabajo resulta



relevante desde el punto de vista sintético.

Por otro lado, se llevó a cabo la caracterización por difracción de rayos X de la 1,2,3-triazinona **6** y del 1,3-bis(aril)triazeno **8** y se encontró que ambos compuestos forman arreglos de autoensamblaje a través de enlaces de hidrógeno en una y dos dimensiones, respectivamente. En la literatura se ha reportado un gran número de estructuras de autoensamblaje que incluyen arreglos a-, uni- y bi-dimensionales basados en interacciones como enlaces de hidrógeno, enlaces de coordinación, interacciones  $\pi$ - $\pi$  y efecto hidrofóbico, entre otras.<sup>2</sup> El autoensamblaje ha sido utilizado para crear cápsulas moleculares, polímeros supramoleculares y estructuras nanotubulares.<sup>3</sup> De esta manera, los compuestos nitrogenados **6** y **8** desarrollados en este trabajo presentan características en el estado sólido que los hacen importantes desde el punto de vista de la química supramolecular.

## Referencias

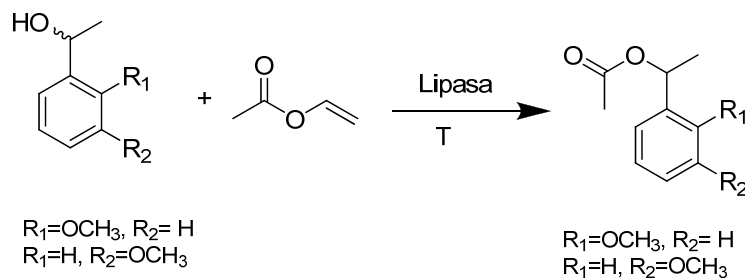
1. Okuzumi, T.; Nakanishi, E.; Tsuji, T.; Makino, S. *Tetrahedron Lett.* **2003**, *44*, 5539-5542. Le Diguarher, T.; Chollet, A. M.; Bertrand, M.; Henning, P.; Raimbaud, E.; Sabatini, M.; N. Guilbaud, N.; Pierré, A.; Tucker, G. C.; Casara, P. *J. Med. Chem.* **2003**, *46*, 3840-3852. Cholet, A. M.; Le Diguarher, T.; Kucharczyk, N.; Loynel, A.; Bertrand, M.; Tucker, G. C.; Guilbaud, N.; Burbridge, M.; Pastoureau, P.; Fradin, A.; Sabatini, M.; Fauchere, J. L.; Casara, P. *Bioorg. Med. Chem.* **2002**, *10*, 531-544. Vaisburg, A.; Bernstein, N.; Freccette, S.; Allan, M.; Abou-Khalil, E.; Leit, S.; Moradie, O.; Couchain, G.; Wang, J.; Woo, H. S.; Fournel, M.; Yan, P. T.; Tranchy-Bourget, M. C.; Kalita, A.; Beaulieu, C.; Li, Z.; MacLeod, A. R.; Besterman, J. M.; Delorme, D. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2004**, *14*, 283-287.
2. Ribas, J. Química de Coordinación. Eds. Omega, S. A. Barcelona, 2000, 153-154. Hosseini, M. W. *Acc. Chem. Res.* **2005**, *38*, 313-323.
3. Zubarev, E. R.; Sone, E. D.; Stupp, S. I.; *Chem. Eur. J.* **2006**, *12*, 7313-7327.

## ESTUDIO QUÍMICO ENZIMÁTICO DE REACCIONES DE TRANSESTERIFICACIÓN USANDO CALENTAMIENTO CONVENCIONAL Y MICROONDAS

Velia C. Osuna Galindo, Ignacio A. Rivero\*

*Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal  
1166. Tijuana, B. C. 22500, México.*

En la actualidad la metodología químioenzimática se ha convertido en una técnica estándar para la preparación de una amplia variedad de moléculas enantioméricamente puras. Las acilaciones y transacilaciones catalizadas por lipasas representan una clase importante de transformaciones enzimáticas en química orgánica. El uso de catalizadores biológicos para propósitos tecnológicos requiere de enzimas estables y funcionales en ambientes no fisiológicos. Las lipasas han sido ampliamente usadas en la preparación y resolución de ésteres quirales, así como también pueden catalizar la condensación de ésteres simples y funcionalizados con amidas en disolventes orgánicos con buenos rendimientos. En este trabajo se presentaran los resultados obtenidos al evaluar una serie de lipasas seleccionadas, que son: lipasa de *Pseudomona cepacia* soportada en diatomita y en ceramica, lipasa de *Pseudomona fluorescens*, lipasa de *Aspergillus niger*, lipasa de *Penicillium camemberti*, Novozyme 435 y Novozyme 735.



Al usar calentamiento clásico se observa que la lipasa de *Aspergillus niger* es más activa, desde las 2 h de reacción presenta una conversión del 94% manteniéndose hacia hasta las 24 h; en orden de reactividad le sigue *Pseudomona fluorescens* la cual a las dos horas alcanzó el 71% de conversión sin embargo debido a la naturaleza

reversible de las lipasas se observa que a las 6 h presenta una conversión del 49 % manteniéndose así a las 24 h; en la literatura se ha reportado actividad del microorganismo de *Aspergillus niger* en reacciones de reducción del feniletanol donde reportan que la conversión al feniletanol es de 44 % a las 48 h. i La PsDI presentó conversiones desde las dos horas de 38 % conservándose así hasta las 24 h.

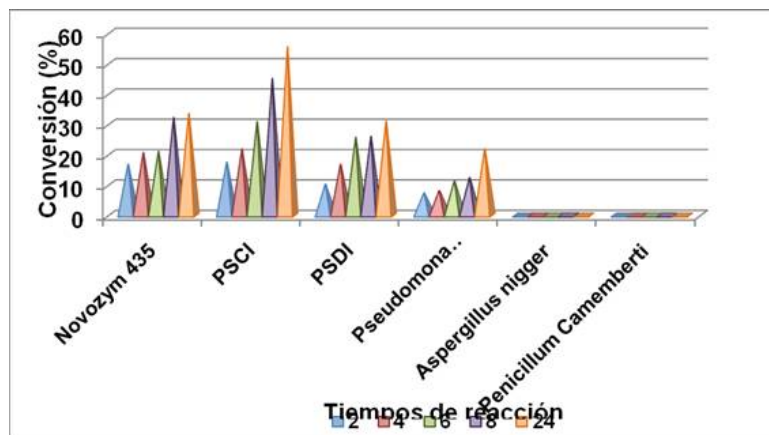
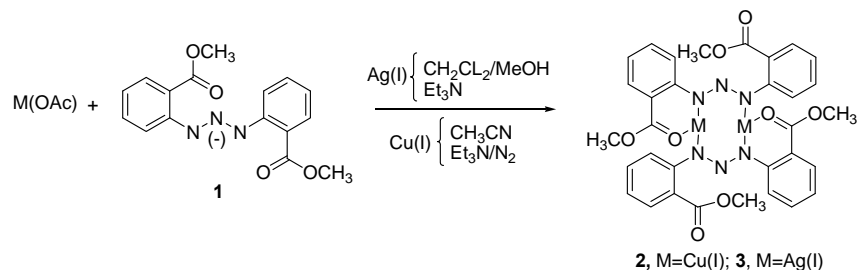
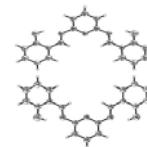


Fig. 1 Reacción de acetilación enzimática de la 1-(3-metoxi)etanol



## Referencias

1. Gallardo, R.; Rojas, A. ; Valerio, G.; Rev. Soc. Quim. Méx. 2004, 48, 300-304.
2. Gotor, V.; Bioorg. Med.Chem. 1998, 10, 2189-2197.
3. Eshabi B.; Kurbanoglu; Zilbeyaz, K.; Kurbanoglu, N.; Hamdullah, K.; Tetrahedron: Asymmetry, 2007, 18, 1159–1162



## SÍNTESIS DE DENDRÍMEROS MESILADOS, TOSILADOS Y BENZOILADOS

Berenice Vargas Coronel, Domingo Madrigal Peralta\*

*Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Blvd. Industrial s/n Tijuana, Baja California, México. madrigal@tectijuana.mx*

Los dendrímeros son macromoléculas altamente ramificadas, la estructura de estos materiales tiene un gran impacto en sus características físicas y químicas<sup>1</sup>. La utilidad potencial de los derivados dendriméricos se encuentra en sus tamaños controlables, su arquitectura interna ramificada, el acceso a su interior y la química tan variada existente en su superficie reactiva, encontrándose desde dendrímeros útiles en la fabricación de dispositivos ópticos y electrónicos a nivel de nanoescala,<sup>2</sup> dendrímeros con propiedades fotoluminiscentes, organometálicos y dendrímeros con propiedades medicinales<sup>3</sup>. Estas macromoléculas se construyen básicamente partiendo desde una molécula pequeña que constituye el núcleo del dendrímero y se efectúan sucesivas agregaciones de monómeros introduciendo nuevas generaciones y ramificaciones<sup>2</sup>. Al avanzar el número de generación, los tiempos de reacción se incrementan y las reacciones son cada vez más complicadas aumentando la posibilidad de obtener subproductos. Esta situación, hace que obtener los productos dendriméricos sea costoso, de tal manera que continuamente se buscan nuevos materiales dendriméricos que puedan prepararse fácilmente. La síntesis de compuestos dendriméricos en fase sólida es una opción importante, sin embargo se han tenido algunas limitantes inherentes a los problemas de análisis de productos e intermedios de reacción soportados en fase sólida.

En este trabajo se presentan los resultados de las síntesis de dendrímeros efectuada en solución y en fase sólida, y se comparan los resultados. Se reporta la síntesis en solución los dendrímeros mesilado, tosilado, benzoilado y bromoacetilado del pentaeritritol, los cuales fueron caracterizados por IR y RMN <sup>1</sup>H y <sup>13</sup>C. Además se prepararon dendrímeros soportados en fase sólida utilizando como soporte polimérico la resina de Merrifield. En una primer etapa se hizo reaccionar el pentaeritritol con hidruro

de sodio para formar el alcóxido del pentaeritritol que posteriormente se hizo reaccionar con la resina y formar el dendrímero soportado en fase sólida PS3OH (Figura 1), este se trató con cloruro de mesilo y cloruro de tosilo, para formar los dendrímeros tosilado y mesilado, por otra parte se trató PS3OH con cloruro de benzoilo para formar PS3OPh y con Bromuro de bromo acetilo para formar PS3OBr, Los dendrímeros soportados en fase sólida fueron caracterizados por IR y fluorescencia. Habiendo usando la misma metodología en fase sólida y solución, y de acuerdo al IR coinciden con la obtención de los dendrímeros tanto en solución como en fase sólida.

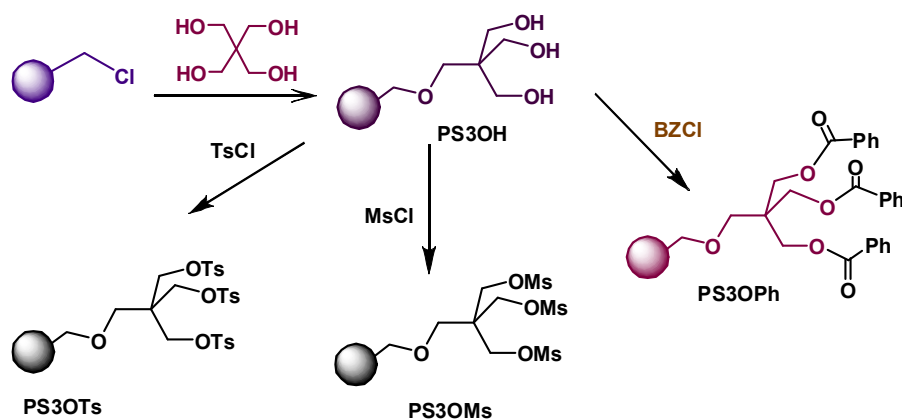
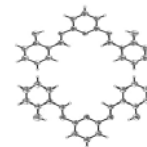


Figura 1. Síntesis de dendrímeros en fase sólida.

## Referencias

1. Klajnert B.; Bryszewska M.; *ActaBiochimicaPolonica*, 2001, 1, 199-208.
2. Hu, S. Q.; Pugh V.; Sabat M.; Pu, L.; *J. Org. Chem.* 1999, 64, 7528-7536.
3. Lebreton, S.; Monaghan, S.; Bradley, M.; *Aldrichimica Acta*. 2001, 34, 75-102.





## SÍNTESIS DE ANÁLOGOS DE PIRIDIN-2(1H)ONA

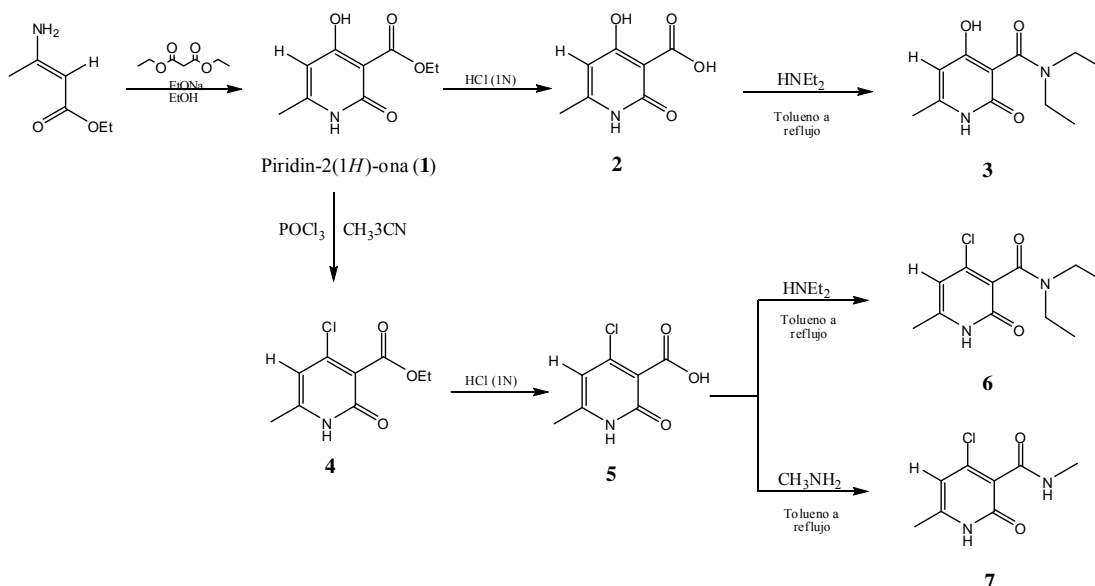
Héctor Reyes, Gerardo Aguirre, Ratnasamy Somanathan, Daniel Chávez\*

*Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22000, México. E mail: dchavez@tectijuana.mx; dchavezv@hotmail.com*

El sida es una enfermedad que se caracteriza por causar un debilitamiento del sistema inmunológico y se adquiere mediante el contacto directo con el VIH (virus de inmunodeficiencia humana), miembro de la familia de los retrovirus cuya característica principal es la necesidad de convertir su ARN en ADN provírico mediante una enzima denominada transcriptasa inversa. Para aliviar esta enfermedad se usa el tratamiento antirretroviral de gran actividad (TARGA) que consiste en la prescripción de tres o más fármacos antirretrovirales que combaten al VIH y permite que las personas demoren el desarrollo de la enfermedad por varios años y mejoren su calidad de vida.<sup>1</sup>

Investigaciones actuales se enfocan a la búsqueda de nuevos compuestos inhibidores no nucleósidos de la transcriptasa inversa (INNTI) basados en el núcleo de piridinona, con miras a una prometedora actividad, incluso contra cepas mutantes resistentes.<sup>2</sup> Se ha determinado por modelado molecular que en los INNTI, los sustituyentes 5-etil, 6-metil y grupos polares en C-3 potencian la actividad biológica, así como la importancia de la remoción del grupo aromático en C-4 del anillo de piridinona para evitar la resistencia al fármaco.

Este trabajo se enfoca a la síntesis de análogos del núcleo de piridin-2(1H)-ona que contengan un grupo enamida en la posición C-3 utilizando una ruta de síntesis sencilla como la que se muestra en la Figura 1. Los tres híbridos de piridinona-enamida (**3**, **6** y **7**) se caracterizaron por métodos espectroscópicos y espectrométricos y se consideran híbridos porque contienen el núcleo de piridin-2(1H)-ona y son enamidas cíclicas debido a que el doble enlace que forma parte del anillo esta conjugado al grupo carbonilo de la amida.



**Figura 1.** Síntesis de análogos de piridinona.<sup>2-4</sup>

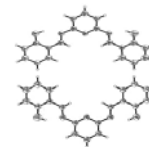
Los híbridos piridinona-enamida (**3**, **6** y **7**) contienen un grupo polar en C-3, lo que indica una potencial actividad en contra de la enzima transcriptasa inversa del VIH. El híbrido **3** al tener un grupo hidroxilo en C-4 y los híbridos **6** y **7** al tener un cloro en C-4, podrían ser modificados químicamente con algún grupo funcional que les confiera mayor potencialidad en la actividad en contra de la transcriptasa inversa del VIH.

## Referencias

1. Informe sobre la epidemia mundial del sida 2008, [http://www.unaids.org/es/KnowledgeCentre/HIVData/GlobalReport/2008/2008\\_Global\\_report.asp](http://www.unaids.org/es/KnowledgeCentre/HIVData/GlobalReport/2008/2008_Global_report.asp). 10 de febrero de 2008.
2. Dollé, V.; Fan, E.; Nguyen, C. H.; Aubertin, A.M.; Kirn, A.; Andreola, M. L.; Gordon Jamieson, G.; Tarrago-Litvak, L.; Bisagni, E.; J. Med. Chem. 1995, 38, 4679-4686.
3. Medina-Franco, J. L.; Martínez-Mayorga, K.; M.; Juarez-Gordiano, C.; Castillo, R. ChemMedChem, 2007, 2, 1141-1147.
4. Ovalle, J. O.; Sáenz, A.; Pérez, C.; Barajas, L.; López, L.; I. Simposio de metrología 2008, M238, 1200-1-1200-2.



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.

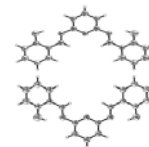


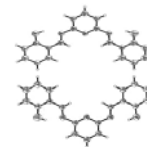
QUÍMICA AMBIENTAL

ENVIRONMENTAL CHEMISTRY



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.





## LA ELECTRO-INCINERACIÓN UNA ALTERNATIVA AL TRATAMIENTO DE EFLUENTES INDUSTRIALES CON MATERÍA ORGÁNICA RECALCITRANTE

Edgar J. Butrón Vargas, Mercedes T. Oropeza Guzmán\*

*Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22500, México. E mail: j\_butron@yahoo.com.mx*

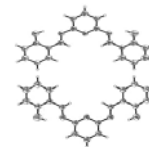
El crecimiento poblacional y el desarrollo industrial ha ocasionado en los últimos años que el tema de la contaminación del agua cada día llama más la atención de la sociedad en general, debido a la disminución de la calidad del agua como resultado de la cantidad de contaminantes que día con día son vertidas a cuerpos de agua receptores.

La resolución a estos problemas de contaminación, considera el empleo de procesos físico-químicos y biológicos acoplados, sin embargo, es importante mencionar que en algunos casos, estos tratamientos suelen ser poco efectivos; debido, a que ciertos contaminantes solo pueden ser oxidados parcialmente, generando sustancias más tóxicas que los contaminantes originales.<sup>1</sup>

En los últimos años, la electro-incineración empleando electrodos de diamante dopados con boro (BDD, por sus siglas en inglés), ha mostrado ser un proceso muy eficiente para la oxidación de la materia orgánica hasta CO<sub>2</sub>. Esta oxidación se lleva a cabo por oxidación indirecta, a través de la formación del radical hidroxilo (OH●) formado in-situ, durante la oxidación del agua en la superficie del BDD. Este OH● tiene propiedades únicas que permiten oxidar diversos compuestos orgánicos hasta CO<sub>2</sub>.<sup>2</sup>

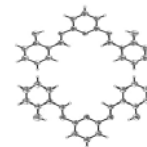
Nava et al., reportaron la oxidación de diversos compuestos orgánicos presentes en aguas residuales (o y p-fenol, colorante índigo textil y vinazas) empleando electrodos BDD en un electrolizador FM01-LC, donde se obtuvieron mineralizaciones superiores al 90%, para los cuatro efluentes tratados electroquímicamente.<sup>3</sup>

Es importante destacar que a pesar de que la electro-incineración ha mostrado ser un proceso muy eficiente para el tratamiento de materia orgánica recalcitrante, su aplicación es muy escasa.



## Referencias

1. Zhi, J. F.; Wang, H. B.; Nakashima, T.; Rao, T. N.; Fujishima, A.; *J. Physical Chemistry B*. 2003, 107, 13389.
2. Cominellis, Ch.; *J. Appl. Electrochem.* 1996, 673.
3. Nava, J. L.; Butrón, E.; González, I.; *J. Environ. Eng. Manage.* 2008, 18, 83.



## PHOTOCATALYTIC REDUCTION OF HEXAVALENT CHROMIUM USING TiO<sub>2</sub> PREPARED BY SOL-GEL METHOD, INFLUENCE OF pH AND CALCINATION TEMPERATURE.

M. Malibrán-Domínguez,<sup>1\*</sup> G. Sandoval-Robles,<sup>1</sup> R. García-Alamilla,<sup>1</sup> E. Moctezuma-Velázquez<sup>2</sup>

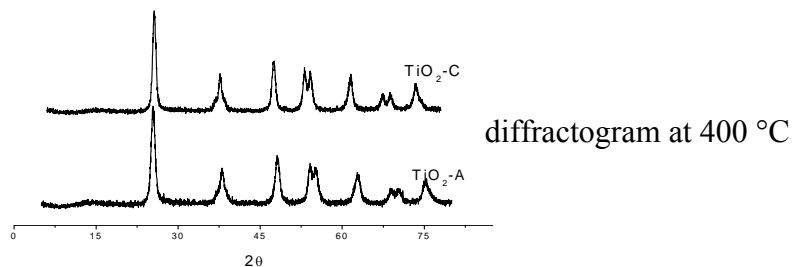
(1) Depto. de Ingeniería Química. Instituto Tecnológico de Cd. Madero. J. Rosas y J. Urueta. Col. Los Mangos, Cd. Madero Tamaulipas, México. Tel.01 (833) 2 15 85 44.  
(2) Centro de Investigación y Estudios de Posgrado/FCQ, UASLP. Av. Dr. Manuel Nava No. 6, Zona Universitaria, San Luis Potosí, SLP, México.  
E-mail [melymalibran@hotmail.com](mailto:melymalibran@hotmail.com), [rgalamilla@aol.com](mailto:rgalamilla@aol.com)

The use of heterogeneous photocatalysis applied to the reduction of chromium (VI) has attracted attention recently. In the present work TiO<sub>2</sub> materials were prepared by the sol-gel method used as precursors: titanium (IV) isopropoxide (Aldrich 97 %) and 2-propanol (JT Baker 99%), in an inert atmosphere of N<sub>2</sub> and controlled hydrolysis, once the hydrolysis completed, the sol was stirred for an hour and aged for 48 hours at 120 °C obtaining a gel. The gel was dried and calcined at temperatures of 400°C (TiO<sub>2</sub>-A), 430°C (TiO<sub>2</sub>-B), 480°C (TiO<sub>2</sub>-C) and 530°C (TiO<sub>2</sub>-D).<sup>1</sup> It was characterized by XRD, BET and TGA.

The materials were analyzed by DTA-TGA, which determines the physical and chemical changes of solid materials synthesized according to the temperature applied under a controlled gas atmosphere. The X-ray diffraction shows the characteristic peaks of anatase phase in the materials found as shown in Figure 1.

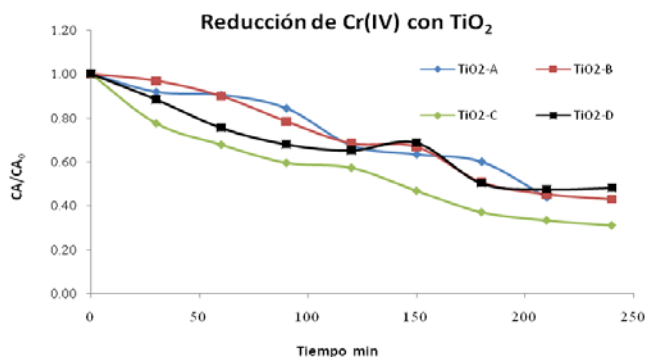
The materials obtained were used in the reduction of hexavalent chromium using scavenger agent citric acid as organic compound,<sup>2</sup> the reactions were carried out in a stirred intermittent reactor. The total volume was 300 mL and catalyst concentration was 0.3 g / L. The reactor was irradiated with UV lamp of 15 W. Samples were taken every

**Figure 1.** TiO<sub>2</sub>  
and 480 °C.



30 min for 4 hours to measure the reduction of chromium. The hexavalent chromium was determined by the 1,5-diphenylcarbazide method.

The results indicated that the material calcined at 480 °C had 69 % of reduction of chromium (VI) while the catalyst calcined at 530 °C showed only a reduction of 50% (Figure 2) . The pH influence was determined with the TiO<sub>2</sub> -C catalyst at pH 2, 5, and 7. The chromium (VI) reduction was greater at pH 2 with a conversion of 74%.



**Figure 2.** Chromium reduction with TiO<sub>2</sub>

## References

1. Ki Hyun Yoon, Jung Sok Noh, Chul Han Kwon, Mamoun Muhammed, *Material Chemistry and Physics*, 95 (2006) 79-83.
2. L. Wang et al., Photocatalytic reduction of Cr(VI) over different TiO<sub>2</sub> photocatalysts and the effects of dissolved organic species, *J. Hazard. Mater.* (2007)



## PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF METHYL ORANGE USING AS CATALYST $\text{TiO}_2$ BY PRECIPITATION OF $\text{TiCl}_4$ .

T. J. Del Ángel-Sánchez,<sup>1\*</sup> R. García-Alamilla,<sup>1\*</sup> E. Moctezuma-Velázquez,<sup>2</sup> G. Sandoval-Robles<sup>1</sup>

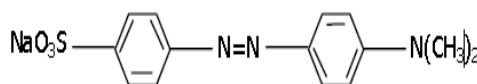
(1) Depto. de Ingeniería Química. Instituto Tecnológico de Cd. Madero. J. Rosas y J. Urueta. Col. Los Mangos, Cd. Madero Tamaulipas, México. Tel.01 (833) 2 15 85 44.

(2) Centro de Investigación y Estudios de Posgrado/FCQ, UASLP. Av. Dr. Manuel Nava No. 6, Zona Universitaria, San Luis Potosí, SLP, México.

\*E-mail: rgalamilla@aol.com, tere\_delangel@hotmail.com

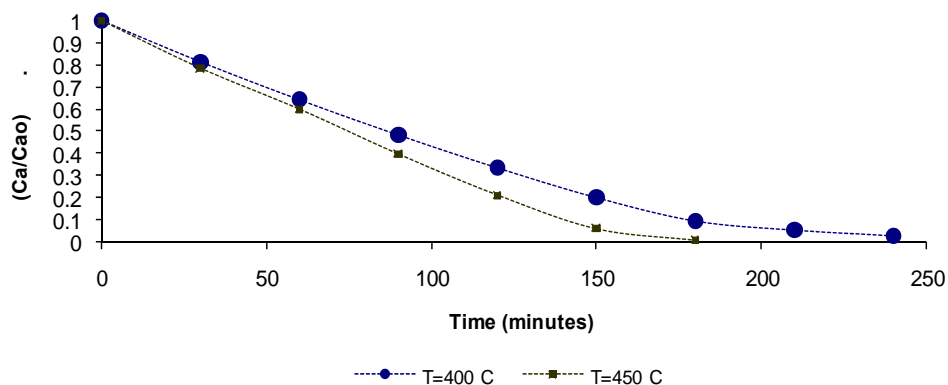
The titanium dioxide ( $\text{TiO}_2$ ) has interesting physical and chemical properties which have been studied as catalysts support. Now has been reported that  $\text{TiO}_2$  nanoparticles have real advantages in relation to the photocatalytic activity [1], with the finality of improving the activity of this material have been developed a variety of methods for synthesis of nanostructured  $\text{TiO}_2$  such as sol-gel process, hydrothermal and precipitation methods [2]. Moreover, photocatalysis is an alternative method in terms of wastewater treatment is concerned, that process has been investigated in recent years mainly using  $\text{TiO}_2$  as catalyst.

The catalysts were prepared by the method of precipitation of  $\text{TiCl}_4$  [3] and calcinated at 400 and 450°C. The materials were characterized by X-ray diffraction, Uv-vis spectroscopy, BET surface area, FT-IR spectroscopy and tested in the photocatalytic degradation of an aqueous solution of methyl orange (Figure 1). The characteristics of the catalysts are listed in Table 1.



**Figure 1.** Chemical formula of Methyl Orange.

Catalytic activity. The photodegradation of methyl orange (MO) has conducted in a discontinuous reactor illuminated with UV light. A solution of 20 ppm methyl orange and 0.5 g/liter of catalyst were used in all tests. Reaction samples were taken every 30 minutes and analyzed by UV spectroscopy. Figure 2 depicts the profile of degradation of methyl orange dye using materials synthesized by two temperatures of calcination.

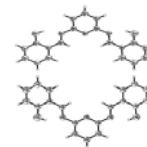


**Figure 2.** Degradation of methyl orange using TiO<sub>2</sub> for precipitation method.

The figure display that all the materials degraded the methyl orange. The high activity was obtained with the catalyst calcinated at 450 °C.

## References

1. Sung-Yeon Kim, Tae-Ho Lim, Tae-Sun Chang, Chae-Ho Shin. *Catal. Lett.*, Vol. 117. (2007)
2. Yin Zhao, Chunzhong Li, Xiuhong Liu, Feng Gu, Haibo Jiang, Wei Shao, Ling Zhang and Ying He. *Mat. Lett.* 61 (2007).
3. Jian-hua Xu, Wei-Lin dai, Jingxia Li, Yong Cao, Hexing Li, Heyong He, Kangnian Fan. *Catal. Comm.* 9 (2008).



## **ELECTROKINETIC REMOTION OF LEAD ON SANDY SOILS: NEW PERSPECTIVE FOR RESTORATION OF SOILS POLLUTTED WITH MINING WASTES**

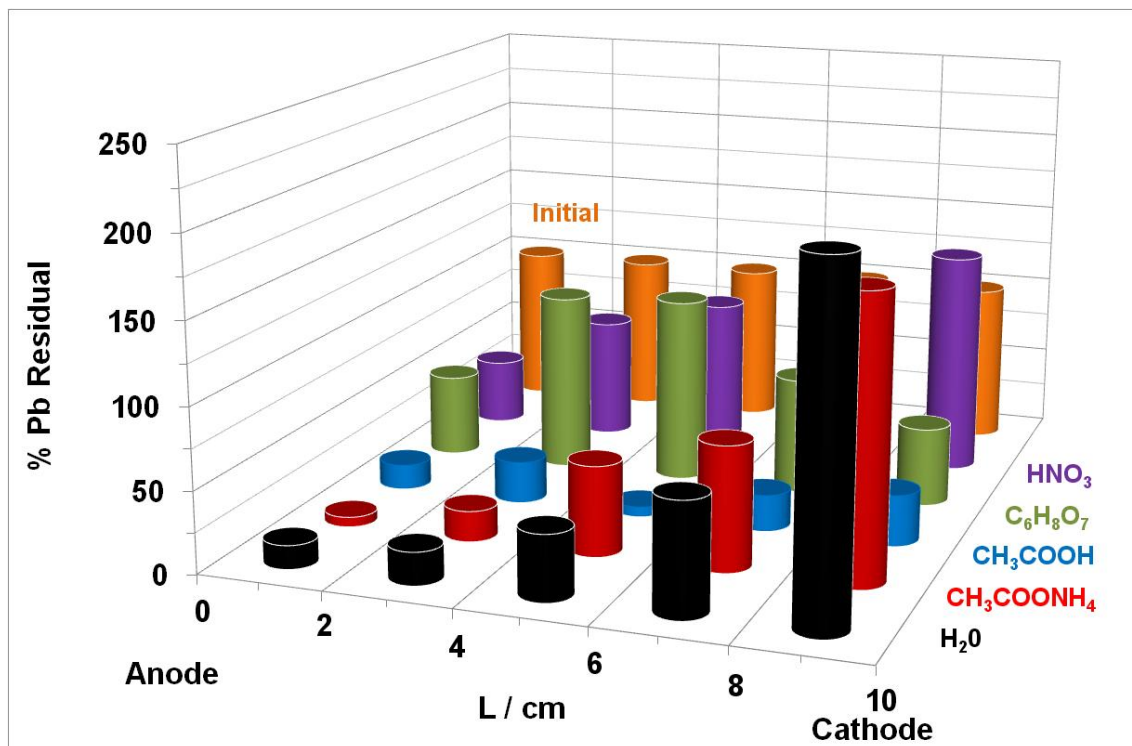
Bayardo Murillo-Rivera,<sup>1</sup> Rosa Flor Cleto González,<sup>2</sup> Israel Labastida-Núñez,<sup>1</sup> Ignacio González,<sup>1\*</sup> Emigdia Sumbarda-Ramos,<sup>3</sup> Mercedes Teresita Oropeza-Guzmán<sup>3</sup>

- (1) *Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa. Av. San Rafael Atlixco 186 Col Vicentina C Postal 09340 México, DF, México. E mail: igm@xanum.uam.mx.*
- (2) *Instituto Politécnico Nacional, Escuela de Ciencias Biológicas. Prol. Carpio y Plan de Ayala C.P 11340 México, DF, México.*
- (3) *Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22500, México*

Considering that mining waste and the natural soils have similar physico-chemical properties (conductivity, adsorption capacity, low permeability and porous structure); the electrokinetic remediation appears as appropriate alternative treatment for reclaim sites that have been contaminated with mining waste and potentially toxic elements like lead

In this paper we studied the influence of electrolyte hydration solution and the applied current density on the removal of lead in sandy soil polluted with  $\text{PbCO}_3$ . The experiments allowed establishing the main electrokinetic phenomena that allow remove lead

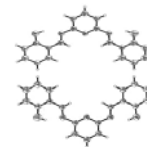
The concentration of lead at the end of the electrokinetic treatment, confirm the best conditions for extraction of this metal (Figure 1). Results from electrokinetic experiments indicate that ammonium acetate and acetic acid were the best electrolyte solutions that ensure greater remotion of lead on sandy soil. The analysis of variables such: electrical conductivity and pH, of soil; and, potential drop through the electrokinetic cell, ensure better control of electrokinetic phenomena on the metal removal.



**Figure 1.** Residual lead percent in soil after electro-kinetic experiments using different electrolytes solutions,  $J_{ap1} = 31.4 \text{ mAcm}^{-2}$ .

### References

1. Ongley L. K., Sherman L. et al. Environ. Pollution 2007, 145, 793.
2. Hansen H K, A Rojo Electrochim. Acta 2007, 52, 339.
3. Ongley L. K., Armienta A., Mango H. J. Phys. 2003, 107, 983.



## NATURAL ORGANIC MATTER (NOM) REMOTION USING ULTRAFILTRATION MEMBRANE.

Heriberto Espinoza-Gómez,<sup>1\*</sup> Eduardo Rogel-Hernández,<sup>1</sup> Shui Wai Lin-Ho<sup>2</sup>

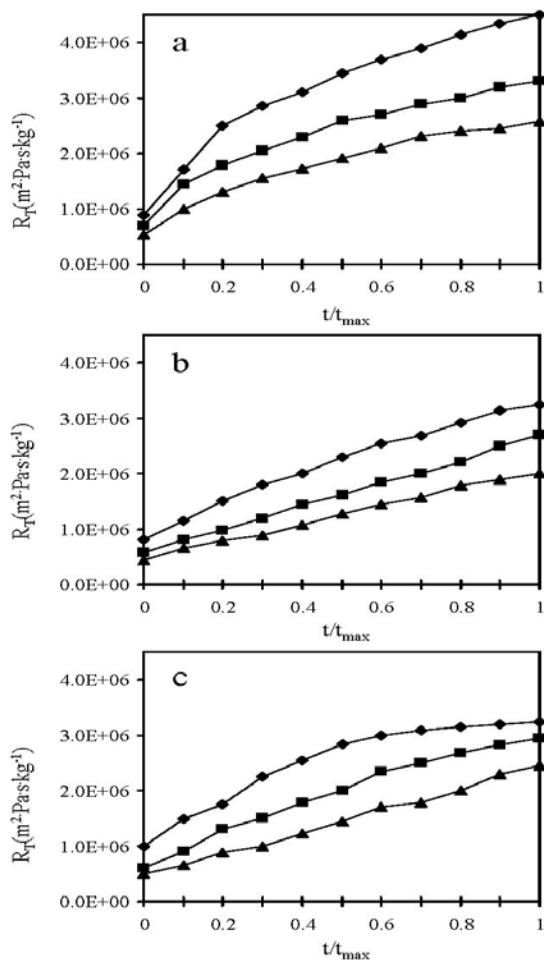
(1) *Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería. Universidad Autónoma de Baja California. Calzada Universitaria s/n. Tijuana, B.C. México. jhespinoza@uabc.mx.*

(2) *Centro de Graduados del Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166.*

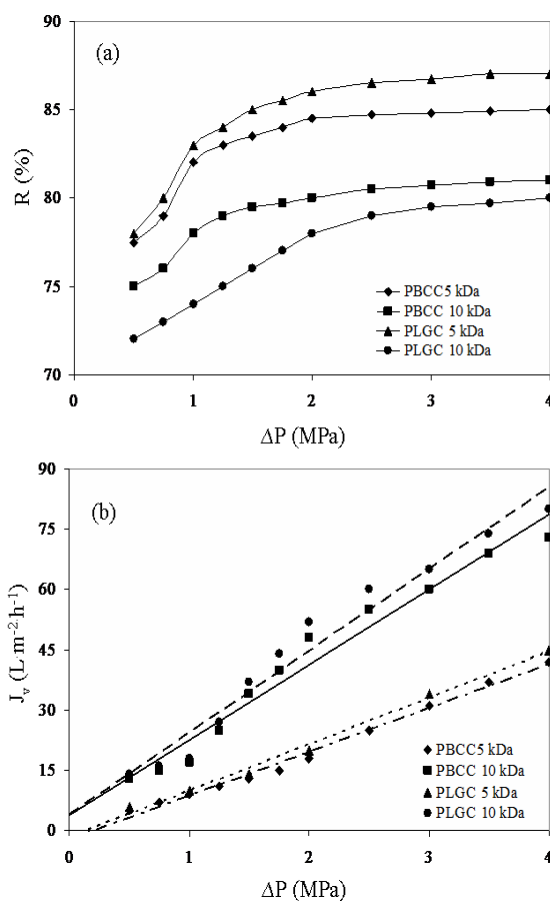
Organic fouling is usually discussed in terms of adsorption of various natural organic materials on and in the membrane. Many studies suggested that natural organic matter (NOM) was the most important foulant.

Natural organic matter (NOM) is a complex matrix of organic compounds present in natural surface water sources.<sup>1</sup> The presence of natural organic matter in water is associated with a number of problems including the undesirable taste, odor, and color of drinking water and the formation of harmful by-products (especially trihalomethanes) on chlorination. One particular group of contaminants that is present in water supplies and which has brought about concern in the water industry is humics substances (HS). There are three substances which make up HS and they are; humin which is completely insoluble; humic acid (HA) which is insoluble at a pH of 1 and fulvic acid (FA) which is soluble at any pH. HS are known to be the most aromatic NOM fraction. HA and FA are anionic polyelectrolytes with carboxyl functional groups and phenolic groups. The HA constitute the major part of NOM therefore these substances should be extracted from water before its chlorination.

The main objective of this research is to investigate the effect of the polymer molecular weight in the efficiency of HA removal from aqueous solutions by ultrafiltration (using cellulose acetate copolymer ultrafiltration membrane), and complexation-ultrafiltration (using poly(diallyl dimethylammonium chloride)).



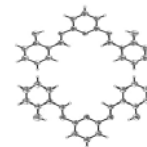
**Figure 1.** Effect of membrane MWCO on the development of total resistance as a function of  $t/t_{max}$ ; [NOM]=mg/L: (a) 140; (b) 70; (c) 280.



**Figure 2.** The rejection of HA (a), and membrane flux (b) versus operating pressure at filtration of HA solution of concentration of 20 mg/L.

## References

1. Howe, KJ; Clark, MM. *Environ. Sci. Technol.*, 36 (2002) 3571–3576.
2. Aoustin, E; Schäfer, AI; Fane, AG; Waite, TD. *Sep. Purif. Technol.* 63 (2001) 22-23.
3. Garcia, C; Rogel-Hernández, E; Lin-Ho, SW; Espinoza-Gómez, H. *Desal. Water Treatm. Sci. Engin.* 1 (2009) 150-156.



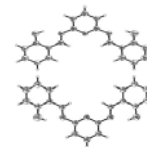
## FACTORES DETERMINANTES EN LA DESCONTAMINACIÓN DE SUELOS POR ELECTROCINÉTICA

Emigdia G. Sumbarada-Ramos,<sup>1</sup> Mercedes T. Oropeza-Guzmán,<sup>1\*</sup> Shui W. Lin-Ho,<sup>1</sup> Ignacio González- Martínez,<sup>2</sup> Oscar Guerrero-Gutiérrez,<sup>3</sup> Manuel Cornejo-Bravo,<sup>3</sup> Víctor Guerrero<sup>2</sup>

- (1) Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22000, México.
- (2) Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco, No. 186, Col. Vicentina, C.P. 09340, México D.F.
- (3) Universidad Autónoma de Baja California – Tijuana. Calzada Universidad No. 14418. Mesa de Otay, C.P. 22390. Tijuana, B.C., México F.

En nuestro país existen diversos sitios contaminados con hidrocarburos y/o metales pesados que representan un problema para la salud pública y requieren atención para detener el avance de este daño<sup>1</sup>. Dentro de las posibles medidas de solución se encuentra el tratamiento electrocinético, este método es trascendente por el hecho de ser un proceso no destructivo que se puede realizar in-situ. Los costos netos son cercanos a 50 USD/m<sup>3</sup> <sup>2</sup>. El tratamiento de suelos por electrocinética es un método fisicoquímico que requiere de la generación de campos eléctricos a fin de orientar el desplazamiento de los contaminantes. Durante el proceso electrocinético se presentan tres fenómenos de transporte principales: electro-migración (movimiento de iones), electroforesis (movimiento de partículas coloidales en suspensión en solución de suelo) y electro-osmosis (movimiento de agua) <sup>3-4</sup>. Cuando se inicia el diagnóstico de un tratamiento electrocinético, es necesario el estudio de las interacciones fisicoquímicas suelo-contaminante y del efecto de las propiedades de la fase acuosa para comprender los fenómenos de transporte que ocurren.

Las interacciones suelo-contaminante dependen de variables como el potencial zeta y el pH, que a su vez influyen sobre el flujo electro-osmótico de agua a través del suelo. La eficiencia de remoción de contaminantes en un proceso electrocinético depende entonces del conocimiento de las propiedades fisicoquímicas del suelo y del medio fluido



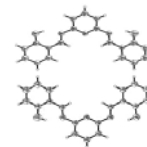
que se transporta de un extremo al otro de una celda electrocinética. Mediante el análisis de las propiedades que influyen directamente en la interacción suelo-contaminante-solución de suelo, se obtiene información en cualquier etapa del proceso electrocinético. Por otra parte, es necesario considerar que al aplicar un tratamiento electrocinético se busca generar condiciones favorables para inducir la desorción de contaminantes y que los contaminantes sean solubles y se encuentren en la fase de solución de suelo.

Existen factores bien identificados que determinan la extracción de contaminantes cuando se realiza un tratamiento por electrocinética, estos son: tipo y concentración de contaminante, tipo de suelo, pH de solución de suelo, capacidad de amortiguación ácido/base del suelo, potencial zeta del suelo, dirección del flujo electro-osmótico, parámetros de operación (electrodos, voltaje de celda y corriente), y adición de agentes surfactantes y/o complejantes que incrementan la eficiencia de remoción <sup>5</sup>. Considerando estos factores, en este trabajo se presentan los resultados de la caracterización fisicoquímica de suelo y su relación con la movilidad de contaminantes al aplicar el tratamiento electrocinético. Se analizaron suelos contaminados procedentes de sitios reales y suelos modelo contaminados en laboratorio con  $\text{PbCO}_3$ , se utilizan soluciones electrolíticas seleccionadas en base al valor de potencial Z del suelo disperso, se observa el efecto de propiedades del suelo como: capacidad amortiguadora, potencial Z y textura sobre la movilidad de contaminantes por electrocinética

### Referencias

1. <http://www.profepa.gob.mx>
2. Volke-Sepúlveda, T.; Tecnologías de remediación para suelos contaminados; México: INE-SEMARNAT, 2002, 64 pp.
3. Page, M.; Page C.; J. Environ. Eng. 2002; 259-272.
4. Yeung, A.; J. Hazard. Mater. 2005, 55, 221-237.
5. Yeung, A.; Environ. Eng. Sci. 2006, 23, 202-224.





## **EFFECT OF ELECTROLYTE CONCENTRATION IN THE ELECTROKINETIC REMEDIATION FROM SOIL CONTAMINATED WITH HYDROCARBONS**

Víctor Escobar-Guerrero,<sup>2</sup> Arturo Cadena-Ramírez,<sup>1</sup> Ignacio González Martínez<sup>1</sup>

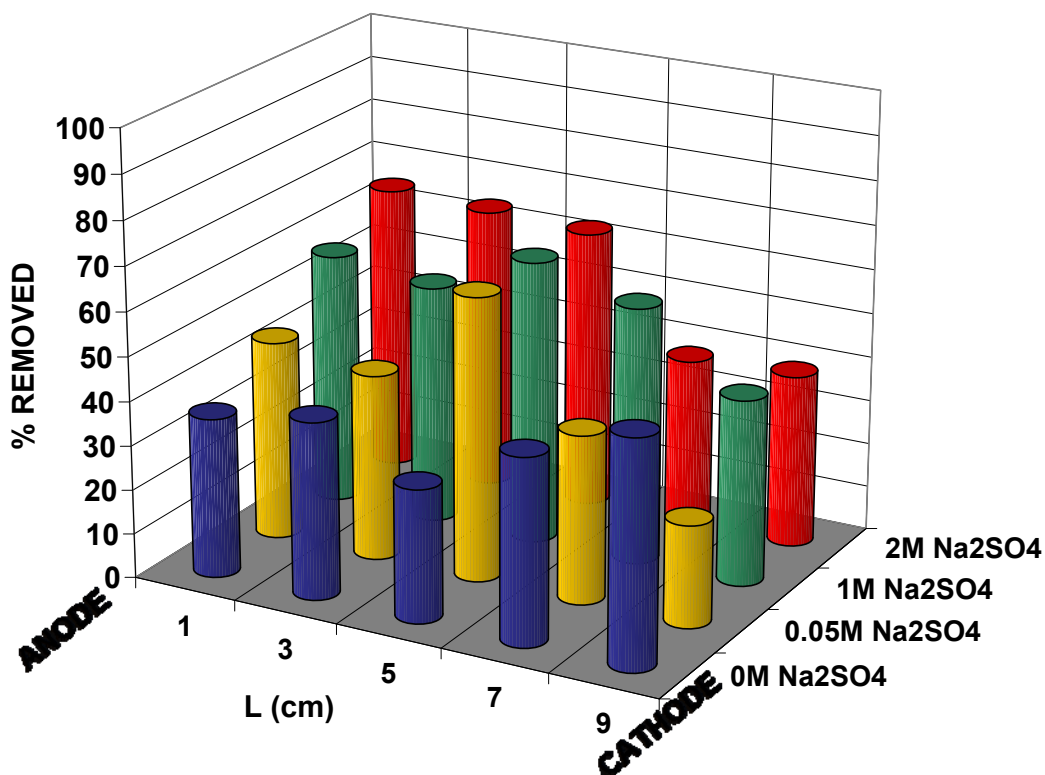
(1) *Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa. Av. San Rafael Atlixco 186 Col Vicentina C Postal 09340 México DF, México. E mail: igm@xanum.uam.mx.*

(2) *Universidad Politécnica de Pachuca . Ex-Hacienda de Santa Bárbara, Zempoala Hgo. Carretera Pachuca-Cd. Sahagún Km. 20 C.P 43830 México D.F., México.*

Numerous sites in Mexico are contaminated with petroleum hydrocarbons due to accidents. An example is the "ex-refinería 18 of Marzo" in Mexico City where the technologies to treat such contaminants are very limited in soils with low hydraulic conductivity, very elevated concentrations of contaminants and very low depths; the electrokinetic remediation appears as an appropriate alternative treatment to reclaim sites that have been contaminated with hydrocarbons and another potentially toxic elements.

In this paper we studied the influence of electrolyte hydration solution and the applied current density on the removal of hydrocarbons in soil coming of the "Ex-refinería 18 de Marzo". The experiments allowed establishing the main electrokinetic phenomena that allows to remove hydrocarbons.

The concentration of hydrocarbons at the end of the electrokinetic treatment, confirms the best conditions for removal of these contaminants (Figure 1). Results from electrokinetic experiments indicate that sodium sulfate and sodium hydroxide were the best electrolyte solutions that ensure greater removal of hydrocarbons on soil. The analysis of control variables such: electrical conductivity and pH, of soil; and, potential drop through the electrokinetic cell, ensure better control of electrokinetic phenomena on the hydrocarbons removal.



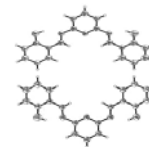
**Figure 1.** Removed petroleum hydrocarbons percent in soil after electro-kinetic experiments using different electrolyte solutions,  $J_{apl} 0.0778 \text{ mAcm}^{-2}$ .

### References

1. Murillo-Rivera B., et al, *Electroch. Acta* .
2. Mishchuk N., Kornilovich B., Klishchenko R., *Colloids and Surfaces* 2007, 306, 171.
3. Page M. M., Page C. L., *Environ. Engineering* 2002, 128, 3, 208.



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.

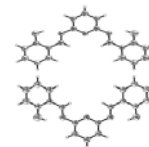


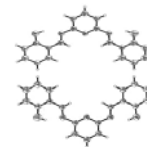
QUÍMICA ANALÍTICA

ANALYTICAL CHEMISTRY



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.





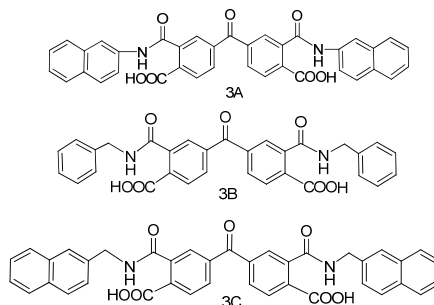
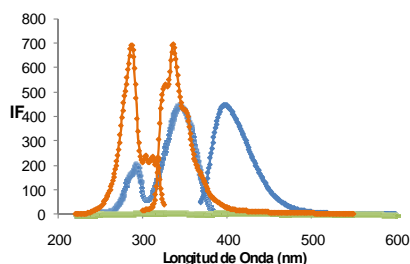
## **EVALUACIÓN DEL COMPORTAMIENTO FLUORESCENTE DE UNA BIBLIOTECA DE COMPUESTOS TIPO BIS CARBAMOIL BENZOICO Y NAFTOICO**

Marisela Martínez Quiroz, Adrián Ochoa Terán, Georgina Pina-Luis\*

*Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22500, México. E-mail: aochot.itt@gmail.com*

La determinación de cationes metálicos y del pH es un tema de interés actual en el área medio ambiental y biológica. Con este fin, se han desarrollado quimiosensores fluorescentes que presentan reconocidas ventajas para el desarrollo de sistemas selectivos y sensibles, tanto en solución como en fase sólida.<sup>1-2</sup> Los principales mecanismos de respuestas de los quimiosensores fluorescentes son: la transferencia electrónica fotoinducida (PET), la transferencia de carga (PCT) y la formación de excímeros.<sup>3</sup> Un diseño novedoso es la unión de dos fluoróforos aromáticos idénticos a través de una cadena de interconexión. La interacción de estos compuestos con metales o con iones hidronio, puede modular la distancia o relación geométrica existente entre los grupos aromáticos y favorecer un cambio en las señales espectroscópicas. También se puede favorecer o inhibir la formación de un excímero, con el consiguiente cambio en la señal de fluorescencia. El objetivo de este trabajo radica en la búsqueda de nuevos receptores que brinden respuestas sensibles y selectivas en medio acuoso a un pH semejante al fisiológico. Con este fin se ha realizado el estudio del comportamiento fluorescente de una biblioteca de compuestos ácidos bis carbamoil benzoico y naftoico, constituidos por dos unidades fluorofóricas (2-aminonaftaleno A, fenilmetilamina B y 2-metilaminanaftaleno C), unidas por una cadena de interconexión central (naftaleno 1, bifenilo 2 y benzofenona 3), que proporcionan la diversidad de la biblioteca de nueve miembros analizada. Los grupos ácidos se introducen en los ligandos con el objetivo de obtener receptores que presenten respuesta en solución acuosa y que sean sensibles al pH, lo que facilitaría su posterior aplicación en sistemas biológicos y ambientales. Se obtuvieron los espectros de fluorescencia de los nueve derivados y se establece que el derivado 3A presenta una banda de emisión de fluorescencia de gran intensidad desplazada hacia mayores

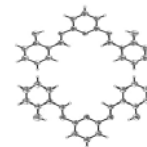
longitudes de onda, debido a una mayor conjugación de los grupos del receptor con el fluoróforo y a una mayor rigidez de la cadena de interconexión. Se corrobora que los derivados con dos unidades de benceno, presentan menor fluorescencia que los derivados bis naftaleno. Se estudiaron las propiedades fluorescentes de los ligandos sintetizados en un intervalo de pH de 2-10 y se establece que la posición relativa de los grupos en las unidades receptoras y la naturaleza de la cadena de interconexión determinan el comportamiento fluorescente frente al pH. Se llevó a cabo la titulación de los ligandos sintetizados con diferentes metales como son Li, Na, Pb, Cs, Ba, K, Mg, Zn, Ca y Ni, utilizando la espectroscopia de UV- visible y la fluorescencia molecular. Se concluye que estos derivados presentan características fluorescentes interesantes, lo que les confiere un valor potencial como sensores para metales y para el pH, en particular el compuesto 3A que presentó selectividad frente iones de Pb (II).



Espectros de fluorescencia de los derivados 3A, 3B y 3C.

## Referencias

1. Vélez, E.; Pina, G.; Suárez, J. L.; Rivero, I. A.; Díaz, M. E.; *Sensors and Actuators, B*, 2003, 90, 256-263.
2. González, T.; Pina, G.; Rivero, I. A.; *J. Comb. Chem*, 2005, 6, 46-53.
3. Bernard, V.; "Molecular Fluorescence: Principles and Applications", Wiley-VCH Verlag



## EFFECTO DE LA CONCENTRACIÓN DE IONES METÁLICOS SOBRE LA INTENSIDAD DE EMISIÓN DE EXCÍMEROS DE LIGANDOS TRIPIRIDÍNICOS.

Claudia María Quiroa-Montalván,<sup>1</sup> Georgina Pina-Luis,<sup>1</sup> Hisila Santacruz Ortega,<sup>2</sup> Miguel Parra- Hake<sup>1\*</sup>

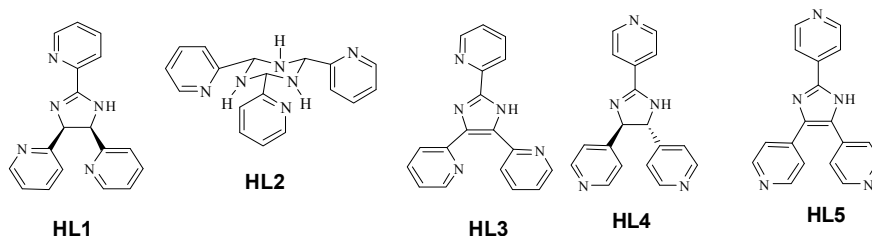
(1) Centro de Graduados e Investigación, Instituto Tecnológico de Tijuana. Blvd. Industrial S/N. Otay, Tijuana, Baja California, 22500 México. miguelhake@yahoo.com  
(2) Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora. Apartado Postal 130, Hermosillo, Sonora, 83000 México.

El diseño y la preparación de sensores capaces de reconocer y detectar selectivamente cationes, aniones o moléculas neutras es uno de los campos más desarrollados y desafiantes dentro de la química supramolecular. Los ligandos polipiridínicos presentan propiedades fluorescentes, y se puede hacer uso de ellos para actuar como sensores de iones metálicos. Existen diferentes mecanismos de interacción entre el receptor y el fluoróforo que ponen de manifiesto que se ha producido el reconocimiento del catión: PET (transferencia electrónica fotoinducida), PCT (transferencia de carga fotoinducida) y los basados en la formación de excímeros.<sup>1</sup>

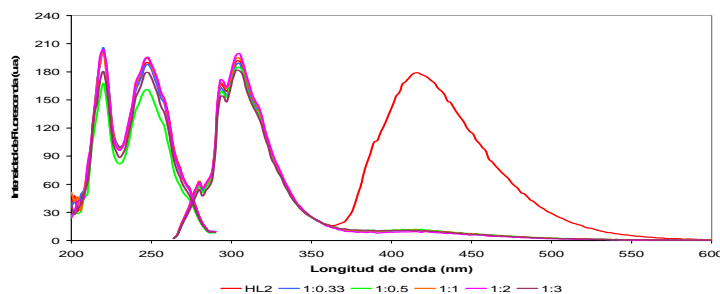
Nuestro grupo de investigación está interesado en la química de coordinación de ligandos polipiridínicos que tienen propiedades fluorescentes y que podrían actuar como sensores de iones de metales de transición. En este trabajo se presentan las propiedades fluorescentes de cinco ligandos tripiridínicos: *cis*-(±)-2,4,5-tri(2-piridil)imidazolina (**HL1**), 2,4,6-tri(2-piridil)-1,3,5-triacinano (**HL2**), 2,4,5-tri(2-piridil)imidazol (**HL3**), *trans*-(±)-2,4,5-tri(4-piridil)imidazolina (**HL4**) y 2,4,5-tri(4-piridil)imidazol (**HL5**) (Figura 1) y el efecto sobre la intensidad de fluorescencia cuando se coordinan con iones de metales de transición (Figura 2).

Para cada uno de los cinco ligandos se obtuvieron los espectros de excitación ( $\lambda_{\text{max}}=248$  nm) y los espectros de emisión ( $\lambda_{\text{max}}=304$  nm), de disoluciones en metanol. Se observó también la formación de una banda de emisión nueva hacia mayores longitudes de onda, que se atribuye al apilamiento de moléculas de los ligandos, dando lugar a la

formación de un excímero.



**Figura 1.** Familia de ligandos tripiridínicos.



**Figura 2.** Efecto de la concentración del metal  $\text{Cd}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  en la intensidad de fluorescencia del ligando **HL2**.<sup>2</sup>

Los ligandos **HL2** y **HL4** presentan una mejor respuesta sobre la intensidad de emisión de fluorescencia cuando se coordina con ión metálico. Para el ligando **HL5**, la formación del excímero constituye un resultado de gran potencial analítico, ya que la banda del excímero de la especie que se produce en el estado excitado, es de gran intensidad. Es de esperar que al producirse la interacción con los metales, ocurra una variación detectable de la intensidad de fluorescencia, aun a muy bajas concentraciones del metal.<sup>2</sup>

### Referencias

1. Sanchis M., J.; Síntesis y evaluación de la capacidad complejante de ligandos nitrogenados. Tesis de Doctorado en Química Orgánica, Universidad de Valencia, Facultad de Química, Valencia, España, 2005.
2. Quiroa M., C.; Estudio de las Propiedades Fluorescentes de Ligandos Tripiridínicos Frente a Metales de Transición. Tesis de Maestría en Ciencias en Química, Instituto Tecnológico de Tijuana, Centro de Graduados e Investigación, Tijuana B. C., 2009.



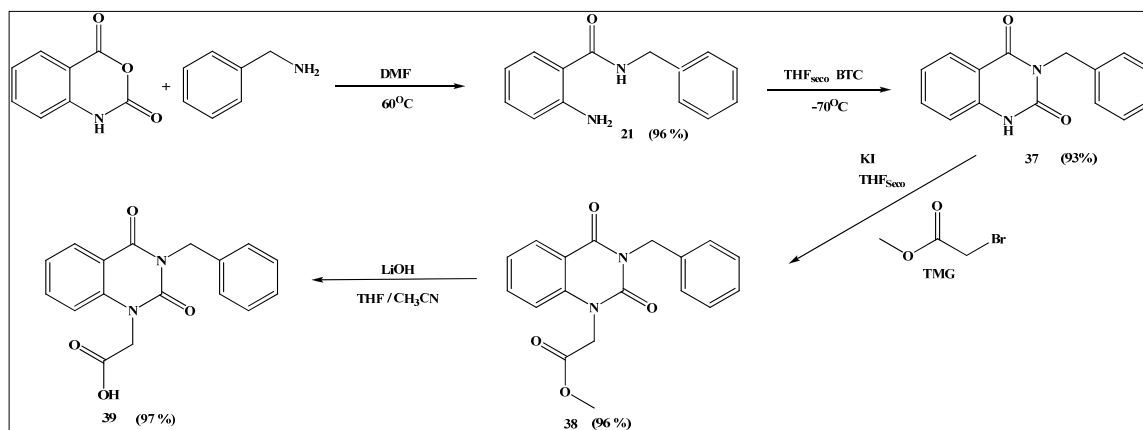
## EVALUACIÓN DE LAS PROPIEDADES FLUORESCENTES DE COMPUESTOS TIPO QUINAZOLINEDIONAS Y SU INTERACCIÓN CON IONES METÁLICOS

Esteban Hernández Guevara, Adrián Ochoa Terán, Georgina E. Pina Luis, Ignacio A. Rivero Espejel\*

*Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22500, México. E mail: iarivero@yahoo.com.mx*

Las quinazolinedionas son compuestos heterocíclicos que han presentado propiedades terapéuticas importantes, especialmente como agentes anticonvulsionantes. Algunos análogos de quinazolin-2,4-diona han mostrado actividad biológica como agente antimicrobial, propiedades sedativas e hipotensivas, antidepresivas y antiinflamatorias.

Se llevó a cabo la síntesis de compuestos tipo quinazolinedionas (Figura 1) a partir de ácido anhídrido isatoico obteniendo rendimientos del 93 al 97 %.



**Figura 1.** Síntesis compuestos tipo quinazolinedionas.

Se observó que estos compuestos presentaron fluorescencia con longitudes de excitación y emisión entre 300 a 400 nm (Figura 2). Se realizó también la linealidad de fluorescencia midiendo a diferentes concentraciones (Figura 3 y 4). Posteriormente se llevó a cabo el estudio de las interacciones con iones metálicos tales como el  $Ba^{2+}$ ,  $Ca^{+}$ ,  $Cs^{+}$ ,  $Cu^{2+}$ ,  $K^{+}$ ,  $Li^{+}$ ,  $Mg^{2+}$  y  $Zn^{2+}$ , variando los equivalentes de los iones, obteniendo como

resultado el abatimiento de la fluorescencia de los cuatro compuestos (Figura 5).

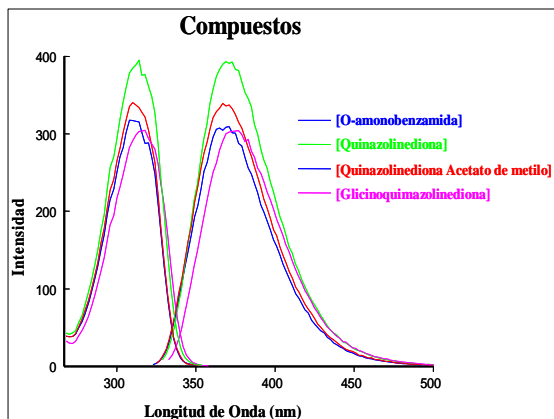


Figura 2. Análisis de Fluorescencia.

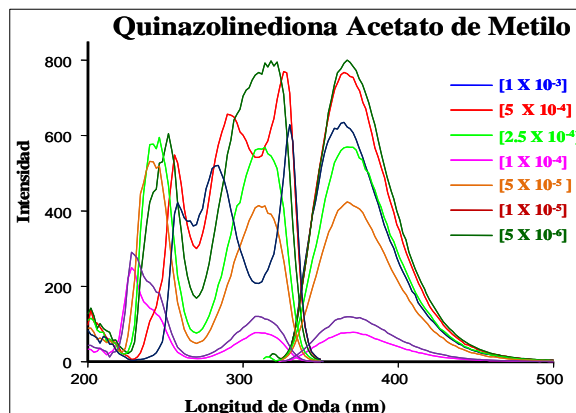


Figura 3. IF a diferentes concentraciones

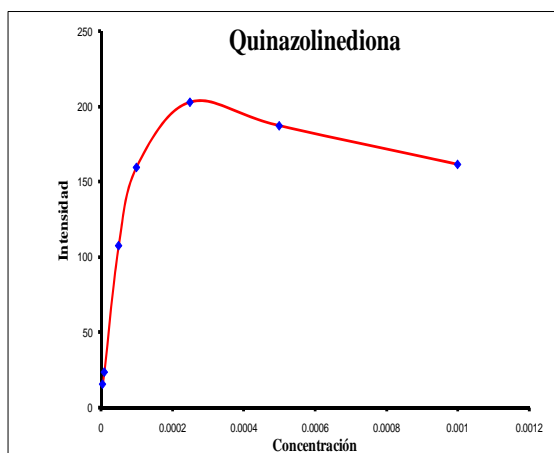


Figura 4. IF vs concentración

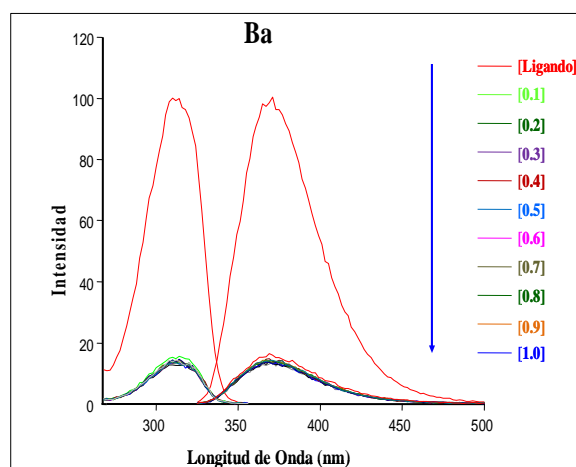


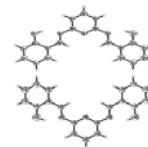
Figura 5. Interacción quinazolidiona con Ba

## Referencias

1. Wenzel, D. G. J. Am.Pharm. Assoc. Sci., 1955, 44, 935.
2. Georg, G. I.; BayerRavikumar, V. T.; The Organic Chemistry of  $\beta$ -lactams;VCH Publisher inc: New York, 1993, 298.
3. Jung, G; Beck-Skickinger, A.G.; Agew. Chem. Int. Ed. Eng. 1992, 31, 367.
4. Hayao, S.; Havera, H. J.; Strycker, W. G.; Leipzing, T. J.; Kolp, R. A.; Hartzler, H. E.; J. Med. Chem. 1965, 8, 807.



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.

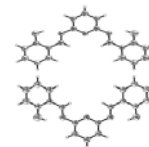


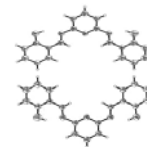
FISICOQUÍMICA

PHYSICAL CHEMISTRY



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.





## **EFICIENCIA TÉRMICA DE UN CALENTADOR SOLAR DE AGUA CON TUBOS EVACUADOS**

W. Soto-Gómez<sup>\*</sup>, R. Puente- Hernández

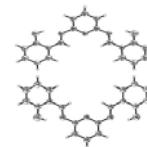
*Instituto Tecnológico de Tijuana, Calzada Tecnológico S/N, División de Estudios de Posgrado e Investigación, Tijuana B.C., solarwil@tectijuana.mx*

El sistema de calentamiento solar de agua con veinte tubos evacuados, de flujo activo, con termo tanque de doscientos cincuenta litros, se instaló en la azotea de la azotea de una casa habitación de dos pisos, en la ciudad de Rosarito Baja California México. Se empleó para el abastecimiento de agua al termo tanque tubería PVC de 3/4", y tubería de cobre de 3/4" para el agua caliente del termo tanque, hacia el abastecimiento de agua a la casa de habitación, como lo marca el diagrama de instalación del fabricante. Se adquirió un sistema adquisitor de datos y software desarrollado por José Campos Álvarez, que consiste en doce termo sensores de rangos de 0 a 100 °C, para medir temperatura y un radiómetro para medir irradiación solar, una tablilla de control con su respectiva fuente de alimentación, conectada a un CPU, donde se guardan las mediciones tomadas, para su análisis y tabulación. En este proyecto además de censar y medir la irradiación en  $W/m^2$ , se censa y miden las temperaturas en el agua de entrada y salida del termo tanque en grados centígrado, además se busca: Proveer a los residentes de la Ciudad de Rosarito Baja California México, de información sobre los costos de adquisición, instalación, operación y reducción de consumo de energía fósil; mostrar cuanta energía fósil se ahorra, en términos de dinero, al instalar un calentador de agua a base de tubos de vacío para uso doméstico, con un calentador de agua convencional; caracterizar un calentador de agua de tubos evacuados instalado en la Ciudad de Rosarito Baja California por medio de un equipo de adquisición de datos.



Figura 1. Calentador de tubos

Como conclusiones, se pueden mencionar que: El promedio del agua fría es de  $20^{\circ}\text{C}$  y el promedio del agua calentada por los tubos evacuados es de  $30^{\circ}\text{C}$ , ó sea el 50% de incremento. La temperatura promedio para bañarse es de  $38^{\circ}\text{C}$ , estos  $8^{\circ}\text{C}$  los proporciona el calentador convencional; la capacidad de 250 litros del termo tanque, permite el suministro ininterrumpido, a  $30^{\circ}\text{C}$ , día a día de agua caliente para toda una casa habitación con 4 baños completos, cocina y cuarto de lavandería, sin escasez, aun en días nublados; por orientación en la mañana la capacidad de calentamiento es baja pero a partir de las 10:00am la eficiencia aumenta; debido a la alta eficiencia para transmitir calor de los tubos de vacío, los días nublados no afectan el rendimiento del calentador, ya que aun con los valores bajos de irradiancia del 30 de abril y el 5 de mayo, que fueron nublados, se pudo registrar un incremento de hasta el 50% en la temperatura del agua; al contrario de los calentadores solares planos activos o de circulación forzada, donde el flujo de agua es continuo para calentarse, en los calentadores solares de tubos evacuados, el agua calentada en el colector solar es almacenada en el termo tanque de 250 litros a una temperatura promedio a los 30 grados centígrados, y puede ser consumida cuando se requiera al abrir las llaves de servicio a las necesidades requeridas; con el uso de una llave de cebolla en la regadera del baño, de flujo de agua reducido, la alta presión provoca la sensación de que el agua no esta lo suficiente caliente, pero optimiza el ahorro de agua y aumenta la eficiencia térmica del calentador solar de agua de tubos evacuados.



## MICROCONTROLADORES Y DEPOSITO QUÍMICO

J. Campos-Álvarez<sup>1</sup>, W. Soto-Gómez<sup>2</sup>

(1) *Centro de Investigación en Energía, Universidad Nacional Autónoma de México  
Temixco Morelos, E-Mail: jca@cie.unam.mx*

(2) *Instituto Tecnológico de Tijuana, Calzada Tecnológico S/N,  
División de Estudios de Posgrado e Investigación, Tijuana B.C., México*

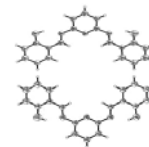
En el presente trabajo se muestran los principales parámetros involucrados en las técnicas de depósito químico utilizadas en el Centro de Investigación en Energía de la Universidad Nacional Autónoma de México, para la preparación de películas delgadas semiconductoras utilizadas en el aprovechamiento, control y medición de energías renovables. Se dan las principales características de sensores de temperatura e irradiancia y se establecen los mecanismos de control de movimientos para la preparación automática de materiales. Asimismo se expone un ejemplo de un sistema de adquisición de datos utilizando el microcontrolador PIC16F877A.

### Referencias

1. Bindu, J.; Sánchez, N.; Nair, P. K.; *Semiconductor Science & Technology*, 2005, 20, 496-504.
2. Custodio, E.; Sebastián, P.J.; Campos, J.; *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2005, 88, 169-178



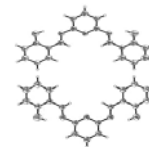
*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.







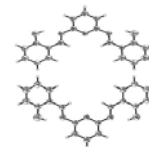
*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.

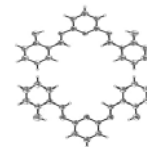


QUÍMICA INORGÁNICA  
INORGANIC CHEMISTRY



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.





## SÍNTESIS DE NUEVOS OXAAZACICLOFANOS Y SUS ESTUDIOS DE COMPLEJACIÓN

Ramón Moreno-Corral,<sup>1</sup> Herbert Höpfl,<sup>2</sup> Mario Sánchez,<sup>3</sup> Lorena Machi Lara,<sup>1</sup> Karen Ochoa Lara<sup>1\*</sup>

(1) Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, 83000, Hermosillo, Sonora, México.

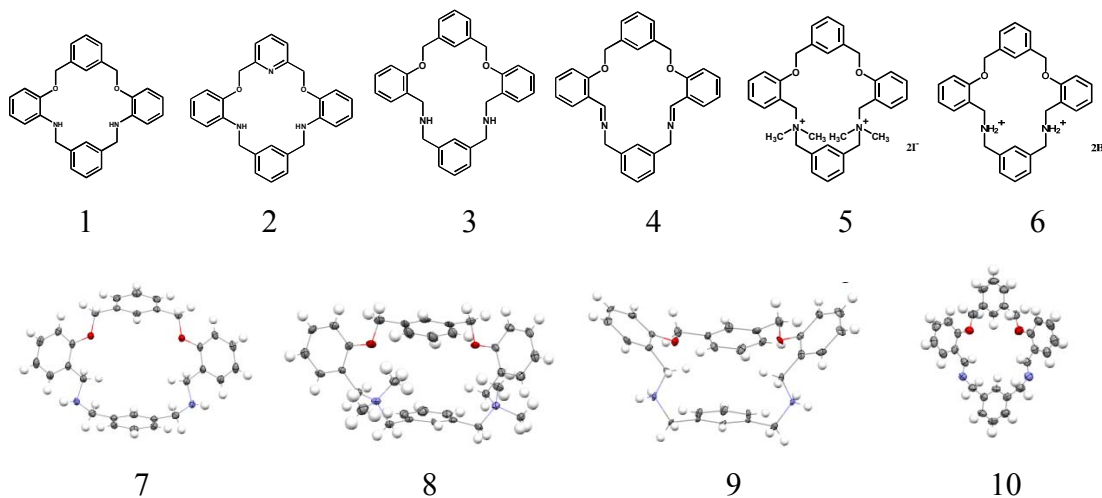
(2) Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, 6221 Cuernavaca, Morelos, México.

(3) Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S. C. Apodaca Nuevo León 66600, México.

\*E-mail: karenol@polimeros.uson.mx.

Una familia de macrociclos de mucho interés es la de los ciclofanos, los cuales son moléculas que poseen al menos una unidad aromática en el ciclo. Este grupo está representado por una gran cantidad de sistemas de estructuras variadas, por lo cual las fuerzas involucradas en el proceso de complejación pueden ser de diversos tipos. Por otro lado, si el ciclofano incluye en su estructura átomos donadores de electrones en una disposición adecuada, éstos pueden ser empleados para coordinar metales.<sup>1</sup> Recientemente nuestro grupo de investigación obtuvo oxazaciclofanos vía la formación de bases de Schiff macrocíclicas.<sup>2</sup>

En base a lo anterior, en este trabajo se presenta la síntesis y caracterización de macrociclos tipo diimina, diamina y algunos derivados. Los oxazaciclofanos (como ejemplos se presentan las estructuras 1-6) fueron obtenidos por dos rutas: a) vía la formación de bases de Schiff macrocíclicas y posterior reducción, b) y tras la N-alquilación de diaminas precursoras por reacción con dihalogenuros de alquilo. También se incluyen algunos de los derivados dicatiónicos de las diaminas macrocíclicas. Cabe mencionar, que a la fecha han sido elucidadas las estructuras cristalinas de cuatro de los macrociclos sintetizados (ver estructuras 7-10).

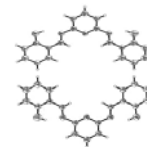


También se incluyen los resultados obtenidos de las titulaciones espectrofotométricas de los ciclofanos 1 y 2 frente al ión  $\text{Cu}^{2+}$ . Durante los experimentos se observó un efecto significativo en los espectros de absorción de los ligantes por la presencia de  $\text{Cu}^{2+}$ ; además, se observó una coloración verde en ambos casos. Las gráficas de la absorbancia del ciclofano vs  $[\text{Cu}^{2+}]$  demostraron que las estequiometrías de los complejos son 1:1 para 1- $\text{Cu}^{2+}$  y 1:2 para 2- $\text{Cu}^{2+}$ .

Como conclusiones se tiene que se sintetizaron los oxazaciclofanos mediante diferentes rutas sintéticas con rendimientos que van de moderados a altos. Además, destaca la elucidación de cuatro estructuras cristalinas de los macrociclos. De los estudios de complejación entre los ciclofanos 1 y 2 frente al ión  $\text{Cu}^{2+}$  se demostró que ambos compuestos son buenos ligantes para este metal, con cambios espectrales considerables inducidos por complejación.

## Referencias

1. Schneider, H.-J., Yatsimirsky, A. Principles and Methods in Supramolecular Chemistry. John Wiley and Sons, England, 2000 (y referencias citadas allí).
2. Reyes-Márquez, V.; Sánchez, M; Höpfl, H.; Lara, K. O. Synthesis and Structural Characterization of 18-, 19-, 20- and 22-Membered Schiff Base Macrocycles. J. Incl. Phenom. Macrocycl. Chem., 2009. DOI 10.1007/s10847-009-9588-8.



## ESTUDIO ESTRUCTURAL DE COMPLEJOS DE TETRAHIDROBORATOS ALCALINOS Y AMINAS AROMÁTICAS BIDENTADAS

Milagros Aguilar Martínez,<sup>1</sup> Juan Carlos Gálvez Ruiz<sup>2\*</sup>

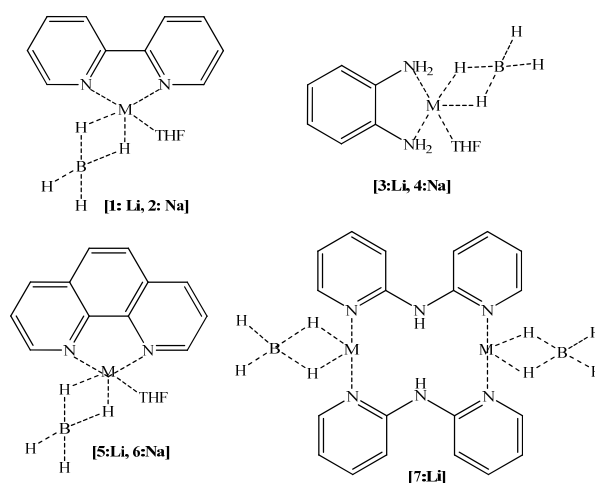
(1) Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora,  
83000, Hermosillo, Son., México, mily\_419@hotmail.com.

(2) Depto. de Ciencias Químico Biológicas, Universidad de Sonora. Blvd. Luis Encinas y  
Rosales S/N col. Centro, C. P. 83000, Hermosillo, Son. [javascript:toggle\(\)](#)

El NaBH<sub>4</sub> es considerado un buen agente reductor,<sup>1</sup> sin embargo, su análogo de litio es mejor ya que es más soluble en disolventes polares, por lo que el LiBH<sub>4</sub> se utiliza más en la síntesis de complejos reductores del tipo MBH<sub>4</sub>·nL. La estructura de estos complejos depende del tipo y número (*n*) de los ligantes moleculares (L) que interaccionan con el boro y de la naturaleza del átomo metálico (M). Además, el grupo [BH<sub>4</sub>]<sup>-</sup> puede adoptar diferentes formas de coordinación (monodentada, bidentada y tridentada)<sup>2</sup>.

En el presente trabajo se estudiaron complejos del tipo MBH<sub>4</sub>·nL, utilizando tanto el LiBH<sub>4</sub> y NaBH<sub>4</sub> así como diferentes aminas aromáticas (2,2'-dipiridilamina, 1,2-fenilendiamina, 2,2'-bipiridina, 1,10-fenantrolina). El análisis estructural por infrarrojo indicó que el grupo tetrahidroborato está de forma bidentada en todos los complejos, como es evidenciado por las bandas que aparecen entre 1600 a 2600 cm<sup>-1</sup> correspondiente a la vibración del enlace B-H<sup>3</sup>. Al llevar a cabo estudios de IR en solución de THF, pudimos ver que la estructura de algunos complejos se mantenía tanto en solución como en sólido, haciendo evidente el efecto del ligante en la estabilidad estructural. Por otro lado, el análisis de RMN de los complejos mostró un desplazamiento hacia frecuencias mayores en los desplazamientos de <sup>13</sup>C y <sup>1</sup>H, además de <sup>7</sup>Li y <sup>23</sup>Na, lo que indicaría que el metal se está coordinando a los átomos de nitrógenos de las aminas. La presencia del grupo [BH<sub>4</sub>]<sup>-</sup> se confirma con la señal alrededor de <sup>11</sup>B=-40 ppm (J<sub>B-H</sub>= 81Hz). En conjunto con los datos anteriores y los obtenidos por <sup>1</sup>H y <sup>13</sup>C se proponen las estructuras de los complejos, Esquema 1. Por medio de difracción de rayos X se pudo analizar los compuestos:

$\text{LiBH}_4 \cdot 2,2'$ -bipiridina (**1**) y  $\text{LiBH}_4 \cdot 1,2$ -fenilendiamina (**2**), comparando estas estructuras se ve que el complejo **1** es una estructura discreta y en el caso de **2** es una estructura polimérica, lo cual provoca que el arreglo y las interacciones sean diferentes. Sin embargo, es importante resaltar que las interacciones no covalentes del tipo  $\text{H}^+ \cdots \text{H}^-$  y  $\text{M} \cdots \text{H}^-$ , son importantes para mantener los arreglos supramoleculares encontrados en estos complejos. Lo anterior, hace muy importante el estudio estructural que aquí se realizó, ya que se pudo demostrar la influencia del tipo de ligante en la estructura y arreglos supramoleculares, que pueden tener una influencia directa en las propiedades reductoras de los complejos reductores aquí preparados.



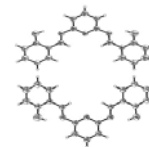
**Esquema 1.** Estructura de los complejos **1-6**.

## Referencias

1. P. D. de Koning; M. Jackson; I. C. Lennon, **2006**, *Organic Process Research*, 10, 1054.
2. H. H. Giese; *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2001, 1195-1205.
3. T. J. Marks; J. R. Kolb; *Chem. Rev.*, 1977, 77.



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.

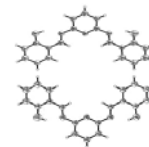


QUÍMICA TEÓRICA

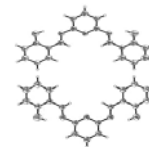
THEORETICAL CHEMISTRY



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.







## ESTUDIO DE NITRUROS DE METALES NOBLES POR MEDIO DE CÁLCULOS DFT

María G. Moreno-Armenta,<sup>1\*</sup> Carlos C. Maldonado<sup>2</sup>

- (1) *Universidad Nacional Autónoma de México Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Apartado Postal 354, Ensenada B.C. México. Email: [moreno@cnyun.unam.mx](mailto:moreno@cnyun.unam.mx)*  
(2) *Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Km. 107 carretera Tijuana-Ensenada, Ensenada, B. C., México*

A pesar de que bajo condiciones extremas Gregoryanz,<sup>1</sup> Crowhurst<sup>2</sup> y Soto,<sup>3</sup> han podido sintetizar exitosamente nitruro de platino y nitruro de rutenio, sus estructuras cristalinas continúan siendo una pregunta abierta.

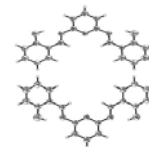
En el trabajo original de Gregoryanz y en otros trabajos teóricos<sup>4</sup> se sugirió para el nitruro de platino, la estructura de zinc blenda y la de NaCl<sup>4</sup> con estequiometría PtN, sin embargo, se demostró que no son estables.<sup>5</sup> Posteriormente se propuso una estructura tipo fluorita con estequiometría PtN<sub>2</sub>, que después fue confirmada experimentalmente por Crowhurst.

Es probable que los nitruros de metales nobles posean propiedades que los harán atractivos para aplicaciones tecnológicas. Por ejemplo se cree que el nitruro de platino pueden ser mejor que TiN, con lo que en un futuro podría existir un reemplazo. También se ha reportado que puede poseer la dureza del diamante y baja resistencia eléctrica, casi superconductividad, estos estudios se encuentran en desarrollo para determinar las propiedades electrónicas de estos nuevos materiales.

En este trabajo hemos estudiado las propiedades estructurales y electrónicas en el volumen del PtN<sub>2</sub> y del RuN<sub>2</sub> en las fases pirita y fluorita, realizando cálculos de primeros principios de la energía total utilizando el método FP-LAPW.

Nuestros resultados revelan que el nitruro de platino (PtN<sub>2</sub>) es un semiconductor con gap indirecto 1.5 eV, con parámetro de red 4.88 Å.

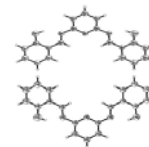
Agradecimientos. El trabajo realizado fue apoyado por los proyectos DGAPA-UNAM IN108908, CONACYT 89768.y el Centro de Supercomputo DGSCA-UNAM.



Agradecemos a Eloisa Aparicio, Juan Peralta, Margot Saiz y Carlos González por su apoyo técnico.

### Referencias

1. Gregoryanz, Sanloup, Somayazulu, Badro, Fiquet, Mao, Hemley. *Nat. Mater.* 2004, 3, 294.
2. Crowhurst, Goncharov, Sadigh, Evans, Morrall, Ferreira, Nelson. *Science*, 2006, 311, 1275.
3. G. Soto, *Mater. Lett.* 2004, 58, 2178.
4. J. Uddin and G. Scuseria, *Phys. Rev. B*, 2005, 72, 35101.
5. Yu, and Zhang, *Appl. Phys. Lett* 2006, 88, 51913. *Phys. Rev. B*, 2005, 72, 54103. *Appl. Phys. Lett.* 2005, 86, 121913.



## EFFECTS OF LONG ALIPHATIC ALCOHOLS ON THE FLUID BILAYER IN UNILAMELLAR DOPC/DOPS VESICLES AS DETERMINED BY A SMALL-ANGLE NEUTRON SCATTERING

Maria Klacsova,<sup>1,2\*</sup> Daniela Uhrikova,<sup>2</sup> Norbert Kucerka,<sup>3</sup> Jose Teixeira,<sup>4</sup> Peter Zajac,<sup>1</sup>  
Pavol Balgavy<sup>2</sup>

(1) *Department of Nuclear Physics and Biophysics, Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Comenius University, 842 48 Bratislava, Slovakia*

(2) *Department of Physical Chemistry of Drugs, Faculty of Pharmacy, Comenius University, 832 32 Bratislava, Slovakia*

(3) *Canadian Neutron Beam Centre, National Research Council, Chalk River, Ontario K0J 1P0, Canada.*

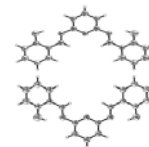
(4) *Laboratoire Léon Brillouin (CEA/CNRS), CEA-Saclay, 911 91 Gif-sur-Yvette Cedex, France*

The structure and physical properties of bilayers in extruded 50 nm unilamellar vesicles composed of dioleoylphosphatidylcholine (DOPC, 96 mol. %) and dioleoylphosphatidylserine (DOPS, 4 mol. %) and primary alcohols (C<sub>n</sub>OH, n = 8 – 18 is the even number of carbons in aliphatic chain of the alcohol), at molar ratios of C<sub>n</sub>OH : (DOPC + DOPS) ranging from 0.1 to 1.0 and temperatures 20 °C, 28 °C, 34 °C, 43 °C and 51 °C are determined using small-angle neutron scattering (SANS). The following results of structural changes of bilayers have been evaluated from the SANS data:

With increasing molar ratio of C<sub>n</sub>OH: (DOPC + DOPS) and at constant temperature 20 °C, a linear increase in the bilayer thickness with n has been observed. The bilayer thickness decreases with growing temperature, while an increase is observed with increasing chain length of alcohol. The same linear tendency is observed for the area per one lipid molecule at the aqueous phase–bilayer interface, except for the growing temperature under which the area per one lipid molecule is increased. The coefficient of transversal thermal expansivity decreases with increasing chain length n of alcohol, while on the contrary, the coefficient of lateral thermal expansivity increases with increasing chain length n of alcohol. The results show that primary alcohols influence the physical properties of bilayers. These results may contribute to the explanation of the mechanism of

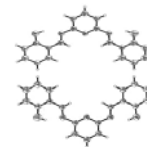


*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.



general anesthesia.

This work was supported by the VEGA 1/0295/08 grant, by the JINR project 07-4-106931-909/2011 and by the FP7 Programme: Contract CP-CSA\_INFRA-2008-1.1.1 226507-NMI3.



## WEB-BASED SOLVER FOR THE VIBRATIONAL SCHRÖDINGER EQUATION

Dong Xu,<sup>1</sup> Peter Zajac,<sup>2</sup> Andrew L. Cooksy<sup>2,3\*</sup>

(1) National Biomedical Computation Resource, University of California, San Diego CA  
92093 USA

(2) Computational Sciences Research Center, San Diego State University, San Diego CA  
92182 USA

(3) Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal  
1166. Tijuana, B. C. 22000, México. E mail: mparra@tectijuana.mx.

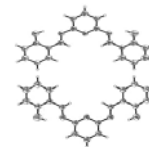
We are developing a new web-based solver for the vibrational Schrödinger equation by implementing our package based on the finite element method<sup>1</sup> with the Opal web interface developed at UCSD. Users will be able to upload the results of electronic structure calculations to form a coarse grid of *ab initio* energies and geometries. A self-checking interpolation scheme will then be used to generate a fine grid for the numerical integration. The GMAT program of Jernej Stare will compute the vibrational G matrix at each grid point, which allows the kinetic energy operator to be constructed. The vibrational Schrödinger equation is then numerically integrated using a basis set of polyhedra defined locally at each grid volume. Although less efficient than methods based on continuous basis functions, the finite element method is intrinsically unbiased, and tends to converge more rapidly than other grid-based methods by reducing the magnitude of off-diagonal elements in the Hamiltonian matrix. Solutions for the lowest twenty eigenvalues can normally be obtained on a three-dimensional surface in a few hours.

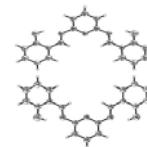
### References

1. Xu, D.; Stare, J.; Cooksy, A. L.; *Comp. Phys. Commun.*, 2009, 180, 2079.



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.





## **THEORETICAL STUDY OF MONOMERS INTERACTION, FL-MAA AND FL-4VPY IN THE POLYMER IMPRINTED FORMATION**

L. E. Gómez-Pineda,<sup>1</sup> G. E. Pina-Luis,<sup>1</sup> A. Cuán<sup>2\*</sup>

(1) *Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22000, México.*

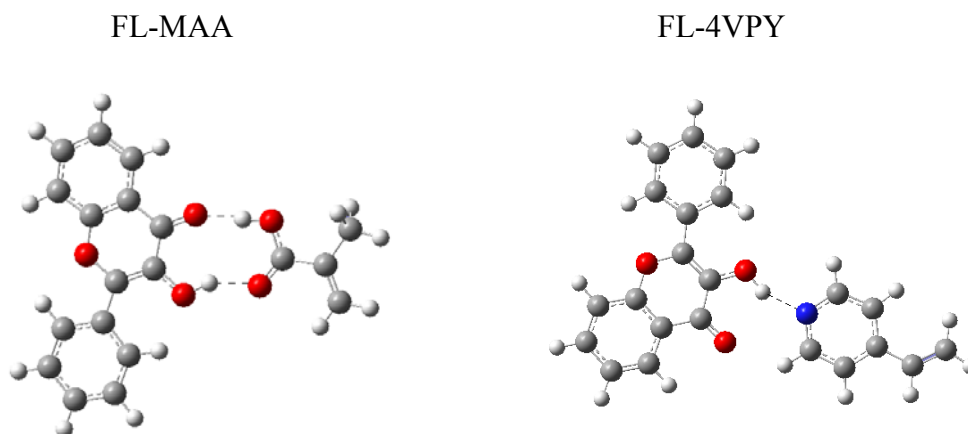
(2) *Materials Department, Metropolitan Autonomous University-Azcapotzalco. Av. San Pablo 180, Col. Reynosa Tamaulipas, 02200, México D. F. E mail: angelescuan24@yahoo.com.mx*

The molecular imprinting technique is a specific chemical procedure for the generation of explicit nano-cavities that are capable of recognizing and binding the desired molecular target with a high affinity and selectivity. Although the technology of molecular imprinting has been widely used for polymer synthesis, very few investigations have been developed in understanding the factors that drive the imprinting process with the aim of predicting MIP performance. The self-assembly molecular imprinting rely on the nature and stability of the complex formed between the target analyte and functional monomer building block prior to radical polymerization, which ultimately governs the amount of binding sites with high selectivity and specificity.

The rational optimization and design of MIP requires fundamental information concerning the structure and function of the MIP under (ideally) conditions. Due to the complete characterization of any process is a huge task, an alternative approach for the study of the complex is based on molecular modeling, since it gives a fundamental knowledge. Theoretical chemistry can give and insight of some of the issues since it can determine the structure of the MIP, the active sites, atomic level description of an interaction mechanism of the complexes involved in a given reaction

The strength of a combined theoretical and experimental approach increase confidence in the results and an important verification of the accuracy of both methods. In this sense, it has been studied theoretically the methacrylic acid functional monomer and 4-vinylpyridine functional monomer and its interaction with flavonol molecule,

which are used in the synthesis of molecular imprinted flavonol polymer. Density functional theory method at B3LYP/6-31+G(d,p) was employed. Flavonol was chosen as a representative target compound because it is typical member of the large group of phytochemicals ubiquitously found in fruits and vegetables, which are well known for their antioxidant abilities and hold promise for preventing age-related diseases including heart disease and cancer.<sup>1-3</sup> On the other hand, flavonol containing of hydroxyl and carbonyl groups for intermolecular interactions with the functional monomers during self-assembly imprinting.



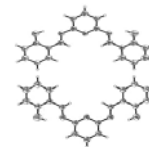
## References

1. Barker, J.; Bohm, B. A. *Introduction to Flavonoids*; Harwood Academic Publishers: Singapore, 1998; Chapter 2.
2. Middleton, E., Jr.; Kandaswami, C. In *The Flavonoids*; Harborne, J. B., Ed.; Chapman & Hall: London, 1986; Chapter 15.
3. Kaur, C.; Kapoor, H. C. *Int. J. Food Sci. Technol.* 2001, 36, 703-725.





*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.

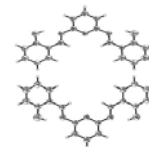


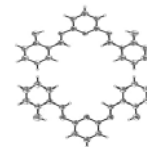
ELECTROQUÍMICA

ELECTROCHEMISTRY



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.





## PREPARATION OF ELECTROCATALYST FOR WATER OXIDATION TO PRODUCE OXYGEN AND/OR OH· RADICALS

M. Rosalina Pérez-García,<sup>1</sup> M. T. Oropeza-Gúzman<sup>1\*</sup>

(1) Centro de Graduados e Investigación del Instituto Tecnológico de Tijuana, Blvd. Industrial, s/n, C.P. 22500, Tijuana, B. C., México. E mail: [rosalina\\_13@yahoo.com](mailto:rosalina_13@yahoo.com)

It is known that electrocatalysis is the optimization of the electrode process in different electrode materials. The advantages of the electrocatalysis are the follows: preparation material control, structures and surfaces selectivity, efficient and selective electrodes, low operation and inversion cost, efficient life time, less environmental impact and low energy consumption.

In the other hand, to get a high electrolysis efficiency of oxygen and hydrogen bubbles formation a good electrode material. A good selection can minimize the energy consumption and justified the utilization of electrical energy to generate (H<sub>2</sub> and O<sub>2</sub> bubbles as in electroflotation processes).<sup>1</sup>

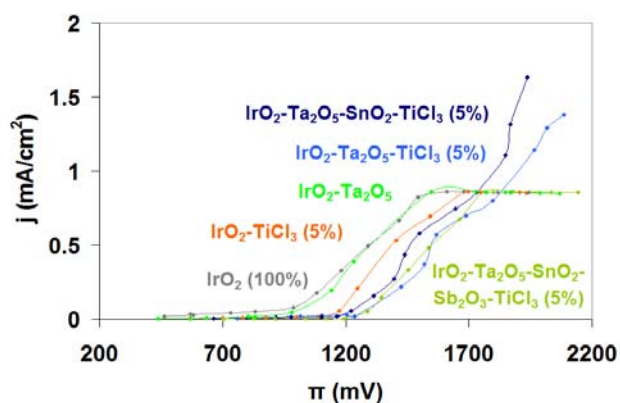
Traditionally the preparation methods of catalytic layers in the electrode surface (liquid-solid reactions) are as follow:

- 1) Paint the surface with metallic salts mixture and subsequent heat treatment
- 2) Spray the dispersion through heat treatment
- 3) Electrophoretic deposition of particles and application of heat treatment

We prepared six catalytic electrodes in the electrochemical laboratory, using titanium mesh as a base, covered with different oxides metals. The exposed area for the microelectrolysis experiments was 1cm<sup>2</sup>, using a three electrode cell, at room temperature. Saturated Calomel Electrode, SCE Hg/Hg<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, KCl (sat.) was used as reference electrode. The position of this electrode was closer as possible to the working electrode. The evaluation solution was 0.5 M H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>. The study interval was OCP V ≤ E ≤ 2.2 V vs. SCE, each 100 mV, with a magnetic stirrer turning at 500 rpm. The solution was deoxygenated before each microelectrolysis experiments. To construct j vs. π

curves, sampling time was 0.25 s. The electrochemical station BAS100W served as the signal generator and signal register through the software of the same company. Moreover the ohmic drop correction was considered for the polarization curves.<sup>2</sup>

In the figure 1 we can see the polarization curves show that Ti/IrO<sub>2</sub>/Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/TiCl<sub>3</sub> (5%) and Ti/IrO<sub>2</sub>/Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/SnO<sub>2</sub>/TiCl<sub>3</sub> (5%) overpass to the second charge transfer stage of the catalytic mechanism. These electrodes do not present the “plateau” of current, and then they proceed to the oxygen evolution.



**Figure 1.** Polarization curve  $j$  vs.  $\pi$  building from the chronoamperometric technique in 0.5 M H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, sampling time was 0.25 s.

## References

1. F. Montilla Jiménez, Fabricación y caracterización de nuevos materiales electroquímicos para la transformación-eliminación de compuestos aromáticos en disolución acuosa. Tesis de Doctorado de la Facultad de Ciencias, Universidad de Alicante, España, 2003.
2. Pérez García, M. R. Preparación, caracterización y utilización de electrodos catalizadores para evolución de oxígeno en una celda de electroflotación. Tesis de Maestría en Ciencias en Química, Instituto Tecnológico de Tijuana, Centro de Graduados e Investigación, Tijuana, B. C., 2008.

## VOLTAMMETRIC CHARACTERIZATION OF CARBON PASTE ELECTRODES MODIFIED WITH GOLD NANOPARTICLES

Gabriela Beristain-Ortiz, Mercedes Oropeza-Guzman\*

*Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22000, México. E mail: oropeza1@yahoo.com.*

In this work the influence of gold nanoparticles (AuNP) on the surface of carbon paste electrodes (CPEs), was evaluated by Cyclic Voltamperometry. The modification of CPE was done by immersion in colloidal solutions of gold nanoparticles of different sizes as prospective sensors for toxic components especially in extremely low concentration. In the voltammograms corresponding to CPE modified with AuNPs of 30 and 20 nm at different immersion times (fig.1), in AuNPs 30 nm the current maximums changed, indicating better sensitivity and limit of detection. In a similar way, with AuNPs of 20 nm the sensitivity increased; moreover, the effect was more visible. This effect suggests that the electrode surface is more polarizable.

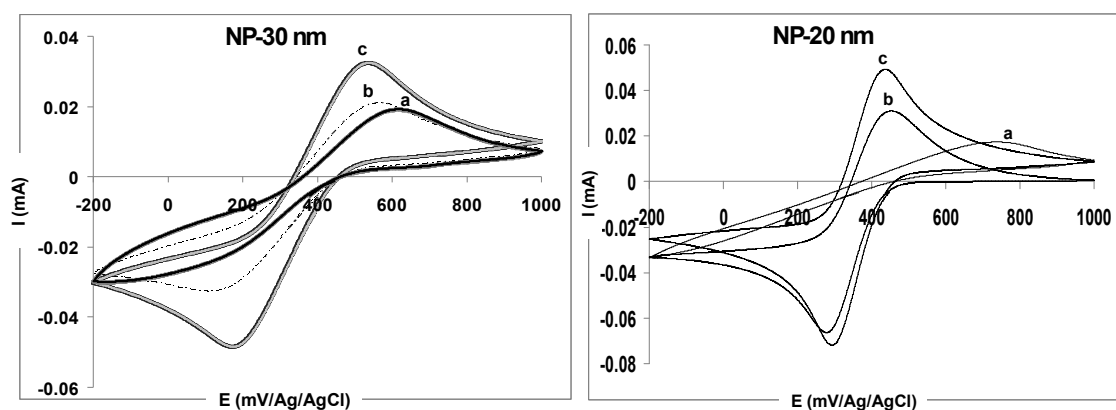
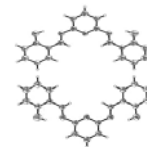


Fig. 1. Cyclic voltammograms (a) CPE t=0 min, (b) CPE/AuNPs t=90 min and CPE/AuNPs t=150 min in solution  $1\text{M H}_2\text{SO}_4 + 10^{-3}\text{M Fe(CN)}_6^{4-}/\text{Fe(CN)}_6^{3-}$ .

In this work a solution Fe(II)/Fe(III) was used as a redox equilibrium model to evaluate the different electrode surfaces.

Table 1 reports the values corresponding to the involved cathodic and anodic



charge for two nanoparticles sizes at different immersion times.

**TABLE I.** Cathodic and anodic charge for CPE and CPE/AuNPs for two particle sizes.

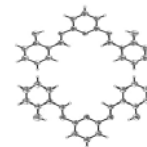
Times Min	Cathodic Charge (C)		Anodic Charge (C)	
	30 nm	20 nm	30 nm	20 nm
t=0	236.90	235.46	104.30	100.21
t=90	153.84	445.29	78.96	82.91
t=150	379.46	419.90	188.98	199.19

Modified electrodes showed good properties as sensitivity, limit of detection, stability and catalytic activity.<sup>1</sup> When modifying the sensing surface of the carbon paste electrodes (CPEs) benefits like: low cost and renewable surfaces are obtained. In recent works, cyclic voltammetry studies (VC) have been widely used in the electrodeposition of nanoparticles as well as in the characterization of the electrodes.

The modifications with NPs of diverse materials for GCE and CPE, as well as the used electrochemical technique in the reviewed works constitute a powerful tool of present analytical chemistry, since it allows making determinations in-situ of toxic substances in small samples.

## References

1. Lu, L.; Lin, X. Barker. Analytical Science. 2004.20, 527.



## DEPÓSITO DE NANOPARTÍCULAS DE ORO FUNCIONALIZADAS EN ELECTRODOS DE PASTA DE CARBÓN Y SU ANÁLISIS POR VOLTAMPEROMETRÍA CÍCLICA

Esteban Hernández Guevara, Edgar Reynoso Soto, Gabriela Beristain Ortiz, Mercedes T. Oropeza Guzmán, Ignacio A. Rivero Espejel

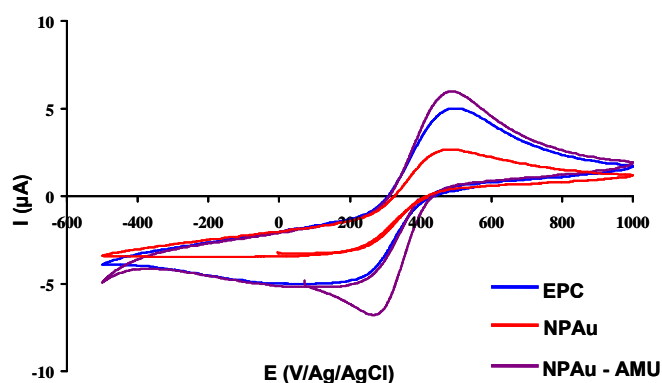
*Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22000, México. E mail: iarivero@yahoo.com.mx, oropezal@yahoo.com.mx*

En electroquímica, la interfase metal–disolución se conoce como la “doble capa” y se sabe que exhibe propiedades eléctricas similares a las de un condensador, siendo susceptible a procesos de carga y descarga. Una de las propiedades interesantes de las nanopartículas metálicas que son protegidas con alcanotioles es precisamente la cuantización de estos procesos. La capacidad eléctrica extremadamente baja de una nanopartícula hace posible su carga en etapas monoelectrónicas separadas por intervalos de potencial, los cuales se observan en experimentos de voltamperometría cíclica con disoluciones de nanopartículas, siempre que estas sean suficientemente monodispersas. Por otra parte, la carga que se almacena en los núcleos metálicos también se puede utilizar en reacciones químicas en su superficie.

El grupo de Murray ha demostrado que las nanopartículas se pueden cargar electroquímicamente, bien en procesos catódicos o anódicos, y utilizar como reductores u oxidantes, respectivamente. Las nanopartículas cargadas también pueden intercambiar electrones entre ellas. Lo que completa la analogía de los procesos de carga/descarga de los núcleos metálicos con las reacciones de oxidación/reducción convencionales.

La caracterización de las nanopartículas de oro, NPAu, y NPAu funcionalizadas con ácido mercaptoundecanóico, NPAu–AMU, por el método de voltamperometría cíclica no se llevó a cabo en una dispersión de NPAu, sino adsorbiendo las NPAu en un electrodo de pasta de carbón EPC. Al dejar inmerso el EPC en la dispersión, las NPAu se "sujetan" al electrodo y se realiza su caracterización. Para evaluar su desempeño

dentro de la superficie de la pasta de carbón se utilizó el sistema típico Fe(III)/Fe(II), obteniendo corrientes y potenciales redox diferentes para tres diferentes casos: EPC, EPC-NPAu y EPC-NPAu-AMU. Estos experimentos indicaron que las nanopartículas funcionalizadas con AMU son una especie que favorece la conductividad de las cargas en procesos de oxido-reducción bien conocidos, por lo cual los valores de corriente y potencial son mayores tanto en el proceso de oxidación como en el proceso de reducción como se observa en la Figura 1.



**Figura 1.** Voltamperometría cíclica NPAu yNPAu-AMU, en 0.1M HNO<sub>3</sub>

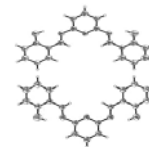
## Referencias

1. Pan, W.; Zhang, X.; Ma, H.; Zhang, J. J. *Phys. Chem. C* 2008, 112, 2456-2461.
2. Matveeva, E.G.; Shtoyko, T.; Gryczynski, I.; Akopova, I.; Gryczynski, Z. *Chem Phys Lett.* 2008; 54(1-3): 85–90.





*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.

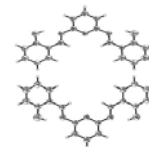


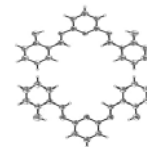
CIENCIAS DE MATERIALES

MATERIAL SCIENCE



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.





## ELABORACIÓN DE RECUBRIMIENTOS HÍBRIDOS DE SiO<sub>2</sub>-PMMA- NANOPARTÍCULAS DE ZnO/TiO<sub>2</sub>

Celia A. Martínez-Rubio,<sup>1</sup> Eva L. Bojórquez-Zavala,<sup>1</sup> Eder Lugo-Medina,<sup>1,2\*</sup> Amelia Olivas,<sup>2</sup> Enrique C. Sámano,<sup>2</sup> Jorge L. Almaral-Sánchez<sup>3</sup>

(1) *Departamento de Ingeniería Química, Instituto Tecnológico de Los Mochis, Blvd. Juan de Dios Batiz y 20 de Noviembre. Los Mochis, Sin. C.P. 81250.*

(2) *Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Km. 107 Carretera Tijuana-Ensenada, Apdo. Postal 356, CP. 22800, Ensenada.*

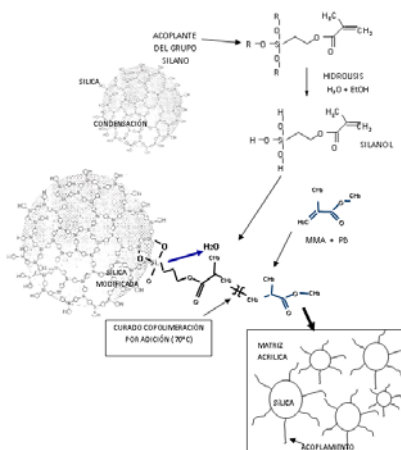
(3) *Facultad de Ingeniería Mochis, Universidad Autónoma de México, Fuente de Poseidón y Prol. Ángel Flores S/N C.U., Col. Las Fuentes, C.P. 81223, Los Mochis, Sin., México.*

Los materiales híbridos orgánicos-inorgánicos son los que resultan de combinar las propiedades de dos o más materiales formando un compuesto o sistema bio-mineral, a nivel nanoscópico o molecular, mediante enlaces de grupos químicos orgánicos-inorgánicos.<sup>1,2</sup> Las propiedades de los materiales híbridos no son justo la suma de las contribuciones individuales de ambas fases; el rol de las fases internas podría ser predominante.<sup>3</sup>

Los polímeros, como el PMMA, tienen un bajo peso en comparación con el vidrio, pueden tener una incrementada resistencia al impacto<sup>4</sup> y flexibilidad;<sup>5</sup> además de baja absorción al agua y su alto índice de refracción.<sup>6</sup> Su principal desventaja para todas las aplicaciones es su superficie suave y, con ello, la baja resistencia al raspado y abrasión, conduciendo a la dispersión de luz y la disminución de transmisión.<sup>4,6</sup> Para superar esos problemas y aprovechar estas ventajas, “recubrimientos duros” transparentes, basados en materiales híbridos orgánico-inorgánicos se han usado ofreciendo resistencia mecánica por la fase “inorgánica” del componente metálico, como el SiO<sub>2</sub>,<sup>1,7</sup> así como el ZnO/TiO<sub>2</sub>, que otorga propiedades de protección a los rayos ultravioleta, los causantes principales de la degradación del componente orgánico.<sup>7</sup>

En el presente trabajo se reporta la elaboración de recubrimientos híbridos de SiO<sub>2</sub>-PMMA aplicados sobre sustratos de vidrio mediante el proceso sol-gel, utilizando para aplicar el recubrimiento, el método de inmersión del sustrato en la solución.

Además se le adicionó óxido de zinc (ZnO) y óxido de titanio (TiO<sub>2</sub>), en nanopartículas, para reforzamiento de protección al polímero de los rayos ultravioleta.



**Figura 1.** El proceso de la formación del híbrido de SiO<sub>2</sub>-PMMA

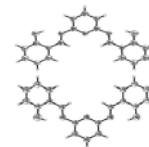
La caracterización de dichos materiales se llevó a cabo por espectroscopia de Infrarrojo, UV/Visible, su adherencia por medio de la prueba ASTM Standard D3359-02, su morfología por medio del Microscopio de Fuerza Atómica y se realizaron análisis térmico gravimétrico (TGA), así como de calorimetría diferencial (DSC).

## Referencias

1. P. Judeinstein and Clément Sanchez, *J. Mater. Chem.* 1996, 6 (4), 511- 525.
2. U. Schubert, Nicola Hüsing, and Anne Lorenz, *Chem. Mater.*, 1995, 7 (11), 2010- 2027.
3. C. Sanchez and Francois Ribbot, *New Journal of Chemistry*, 1994, 18 (10), 1007- 1047.
4. G. Schottner, *Chem. Mater.* 2001, 13, 3422-3435.
5. J. Mackenzie, *Journal of Sol-Gel Science and Technology*, 2003, 26, 23-27.
6. H. Schmidt, *Journal of Non-Crystalline Solids*, 1994, 178, 302-312.
7. R. Kasemann and H. Schmidt, *New Journal of Chemistry*, 1994, 18, 1117-1123.



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.

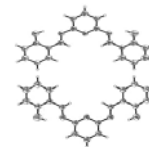


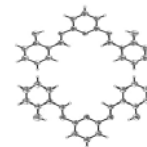
## QUÍMICA DE POLÍMEROS

## POLYMER CHEMISTRY



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.



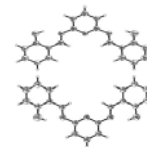


## SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF CHITOSAN COATED DIALDEHYDE CELLULOSE

Erik Guilbert-García,<sup>1</sup> René Salgado-Delgado,<sup>1\*</sup> Efraín Rubio-Rosas,<sup>2</sup> Edgar García-Hernández,<sup>1</sup> Zully Vargas-Galarza,<sup>1</sup> Norma A. Rangel-Vázquez<sup>3</sup>

- (1) *División de Estudios de Posgrado e Investigación del Instituto Tecnológico de Zacatepec Calzada Tecnológico No. 27, Col. Centro, C.P. 62780, A.P. 45, Zacatepec, Morelos, México. E-Mail: renesalgado@hotmail.*
- (2) *Centro Universitario de Vinculación de la BUAP, Calle 29 Oriente No. 601-1, Col. Ladrillera de Benítez Puebla, Puebla, México*
- (3) *Instituto Tecnológico de Querétaro. Avenida Tecnológico Esq. Mariano Escobedo S/N Col. Centro, CP 89440, Querétaro, Querétaro, México.*

The inherent properties of the textile fibres provide room for the growth of microorganism. Infestation by microorganism cause cross infection by pathogens and development odor where the fabric is worn next to skin. In addition, the staining and loss of the performance properties of textile substrates are the results of microbial attack. Basically, with a view to protect the wearer and the textile substrate itself antimicrobial finish is applied to textile materials<sup>1</sup>. Chitin, commonly found as the tough polymer of crab and shrimp shells has a special combination of biological activity as physical properties. Deacetylation of chitin yields Chitosan. Both have unusual combination of properties having wide applications in medical field opened a new vista for recycling the waste by product of prawn industry<sup>2</sup>. In addition, it have been showed that chitosan is antimicrobial against a wide range of target organism, yeast and moulds are the most sensitive group, followed by gram-positive bacteria and finally gram-negative bacteria<sup>3</sup>, the ability of Chitosan to immobilize microorganism derives from its policationic character, its protonized amino groups block the protein sequences of microorganisms, thus inhibiting further proliferation. Chitosan binds to negatively charged bacterial surface disrupting the cell membrane and altering its permeability. This allows materials to leak out of the bacterial cells resulting in cell death<sup>4</sup>. Due to antimicrobial action of the amino group at the C-2 position of the glucosamine residue, Chitosan is also known

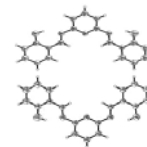


to be an antimicrobial agent on textiles. The purpose of the present study is to synthesize and characterize a kind of antimicrobial cotton fabric, Chitosan coated dialdehyde cellulose was prepared by oxidation of cotton fabric (CF) with  $\text{NaIO}_4$  0.1M, the reaction was performed at  $25^\circ\text{C}$  and 24h of time reaction in the dark, the dialdehyde cellulose obtained was subsequent treated with chitosan in water-methanol-acid solution, the solution was stirred during 2h at  $75^\circ\text{C}$ , 3 different HCl concentrations were used in the coating treatment, chemical and antibacterial properties were studied. It was observed that moisture content analysis and infrared spectra confirm chitosan presence in the chitosan coated dialdehyde cellulose samples (CCDACs). Antibacterial activity was studied by shake flask method, chitosan coated dialdehyde cellulose samples showed significant antibacterial activity.

## References

1. T Ramachandran and K Rajendrakumar, 2003, *IE (I) Journal-TX*, 84, 42-47.
2. Jonathan Rhoades and Bob Rastall, 2002, *Food technology international*, 32-33.
3. G. Dhanan Jaya Rao, N. N. Balasubramanian, B. Justin William and S. Prathaban, 2007, *Tamilnadu J. Veterinary & Animal Sciences*, 3, 160-163.
4. Tülin Öktem, 2003, *Technology*, 119, 241-246.
5. Antje Potthast, Mirjana Kostic, Sonja Schiehser, Paul Kosma and Thomas Rosenau, 2007, *Holzforschung*, 61, 662-667.
6. O. L. Shanmugasundaram, 2006, *Journal of textile and apparel*, 5, 1-6.





## SÍNTESIS Y EVALUACIÓN DE NANOGELES PEGILADOS SENSIBLES AL PH Y LA TEMPERATURA

Aracely Serrano Medina,<sup>1</sup> José Manuel Cornejo Bravo,<sup>1\*</sup> Angel Licea Claverie<sup>2</sup>

(1) Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22000, México. E mail: aliceac@tectijuana.mx.

(2) Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería. Universidad Autónoma de Baja California. Calzada Tecnológico 14418. C. P. 22390 Mesa de Otay, Tijuana, B. C. México.

Las nanopartículas que contienen cadenas de polietilenglicol (PEG) son de particular interés en biotecnología, farmacéutica y aplicaciones biomédicas debido a su excelente biocompatibilidad y alta estabilidad de dispersión. Un factor muy importante para la aplicación de estos materiales es que cambien su grado de hinchamiento en respuesta a estímulos externos como metabolitos, fuerza iónica, temperatura y pH; lo cual se puede lograr mediante la incorporación de segmentos de polímeros "inteligentes".

Entre los polímeros inteligentes de mayor interés esta la poly(N-isopropilacrilamida) (PNIPAAm), dado que sufre una transición de fase reversible inducida por la temperatura, lo cual influencia sus características de solubilidad a 32 °C (LCST).

En este proyecto se obtuvieron nanogeles mediante la polimerización por emulsión sin detergente del metacrilato de polietilenglicol (PEGMA), NIPAAm y el ácido metacriloiloxi-o-benzoico (MAOB), en distintas proporciones. El esquema de reacción se presenta en la Figura 1.

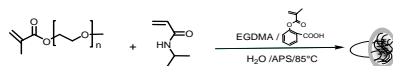
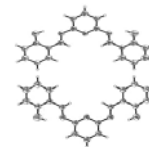


Figura 1. Esquema de la preparación de nanogeles "sin detergente".

Se demostró que el tamaño de las nanopartículas disminuye a medida que incrementa el porcentaje de PEGMA hasta llegar a 30% w/w (Ver tabla 1). Se determinó el efecto de tres niveles de entrecruzante (EGDMA) 5, 10 y 15 %molar (con respecto a la NIPAAm). Se observó que las nanopartículas con 1% de entrecruzante son inestables a la liofilización. A un 10 % de entrecruzante se observó la formación de un macrogel. En



cuanto a la incorporación de MAOB se estudio 5, 10 y 15 % molar. Todas las nanopartículas preparadas presentan sensibilidad a la temperatura con una transición en agua de alrededor de 35 °C .

Tabla 1. Tamaño de partícula a 25 °C de las nanopartículas sintetizadas (5% de EGMA)

NIPAAm %w/w	PEGMA%w/w	MAOB %mol (con respecto a NIPAAm)	Diámetro (nm)
100	0	0	822
70	30	0	294
70	30	5	515
70	30	10	406
70	30	15	394

Para las partículas que contienen MAOB se observa que el tamaño de las partículas, así como su temperatura de transición, aumentan a medida que aumenta el pH, esto debido a que MAOB por arriba del pH 6 se ioniza y produce una repulsión electrostática lo que produce un mayor hinchamiento en las nanopartículas. Estudios de potencial Z de las nanopartículas muestran valores de potencial Z negativos los cuales son aun más negativas a medida que incrementa el pH, lo que demuestra la incorporación de MAOB en las nanopartículas.

### Referencias

1. Kwon, J., Drumright, R., Siegwart, D. The development of microgels/nanogels for drug delivery applications. *Progress in Polymer Science*, 33, 448-477 (2008).
2. Leobandung W., Ichikawa H., Fukumori Y., Peppas N.A. Monodisperse nanoparticles of poly(ethylene glycol) macromers and N-isopropylacrylamide for Biomedical Applications. *J. Appl. Polym. Sci.*, 87, 1678-1684 (2003).

## NANOGELES SENSIBLES PREPARADOS UTILIZANDO LA POLIMERIZACIÓN RAFT

Lorenzo A. Picos-Corrales,<sup>1</sup> A. Licea-Claveríe,<sup>1\*</sup> K. F. Arndt,<sup>2</sup> J. M. Cornejo-Bravo<sup>3</sup>

(1) Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22500, México. E mail: aliceac@tectijuana.mx.

(2) Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry. Dresden University of Technology. Mommsenstr. 13, D-01062 Dresden, Alemania.

(3) Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería. Universidad Autónoma de Baja California. Calzada Tecnológico 14418. C. P. 22390 Mesa de Otay, Tijuana, B. C. México.

Los nanogeles son una arquitectura polimérica que se ha perfeccionado durante los últimos años, estos pueden definirse como partículas coloidales altamente entrecruzadas que poseen diámetros en un intervalo que va desde decenas hasta cientos de nanómetros. Para su estudio se han desarrollado diferentes metodologías de síntesis. La morfología de los nanogeles es una parte importante de su diseño, pues sus propiedades dependen de la forma (arquitectura específica). El interés principal de diferentes grupos de investigadores ha sido el desarrollo de nanogeles sensibles a la temperatura y/o pH para aplicaciones biomédicas.

En este estudio se propone la síntesis de nanogeles utilizando la técnica de polimerización RAFT. La síntesis se basa en la metodología para preparar estrellas con núcleo entrecruzado<sup>2</sup>. Esta metodología se puede aplicar para preparar nanogeles con brazos pequeños en la periferia, para ello es necesario plantear un núcleo con un diámetro mayor al de los brazos (Figura 1).

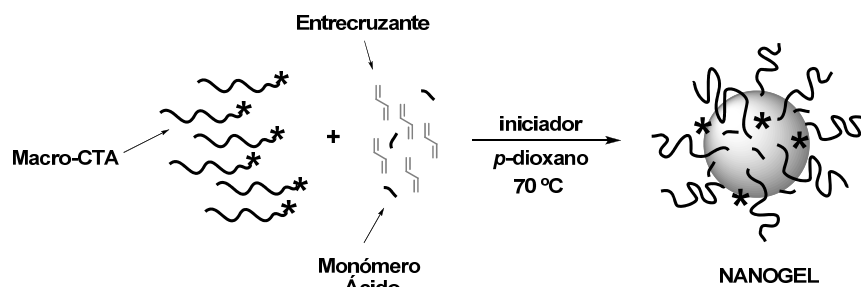


Figura 1. Nanogeles preparados vía RAFT.

Los polímeros entrecruzados que se prepararon contienen brazos pequeños sensibles a la temperatura y al pH. Los datos obtenidos por dispersión de luz dinámica indican que es posible obtener polímeros entrecruzados de tamaño nanométrico (Tabla 1) con diámetros que se mantienen en una distribución monodispersa (Figura 2).

Tabla 1. Datos de nanogeles de PDVB y brazos de PNIPAAm.

Relación molar (DVB-MAPB)/macro-CTA/I	$D_{h(\text{macro-CTA})}^a$ (nm)	Tiempo de reacción (h)	Rend. <sup>b</sup> (% en masa)	$D_{h^{\text{THF}}}^a$ (nm)
50:1.0:0.2	2.0	24	24	4.2
70:1.0:0.2	2.0	24	43	4.6
70:1.0:0.4	2.0	11	64	13.5
70:1.0:0.4	2.0	13	62	18.2
70:1.0:0.4	2.0	16	*	*

<sup>a</sup> Se obtuvo en THF a 25 °C. <sup>b</sup> Se calculó por gravimetría. \* Se formó un macrogel. Todos los productos fueron insolubles a pH 7.4.

Cuando se excede el tiempo de reacción se llega hasta la formación de un macrogel. El control sobre las distribuciones de diámetro se atribuye a la presencia del macro-CTA, el cual regula el desarrollo de la polimerización.

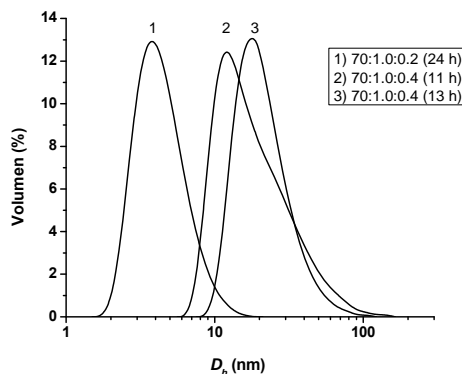


Figura 2. Diámetro hidrodinámico de nanogeles de PDVB y brazos de PNIPAAm.

## Referencias

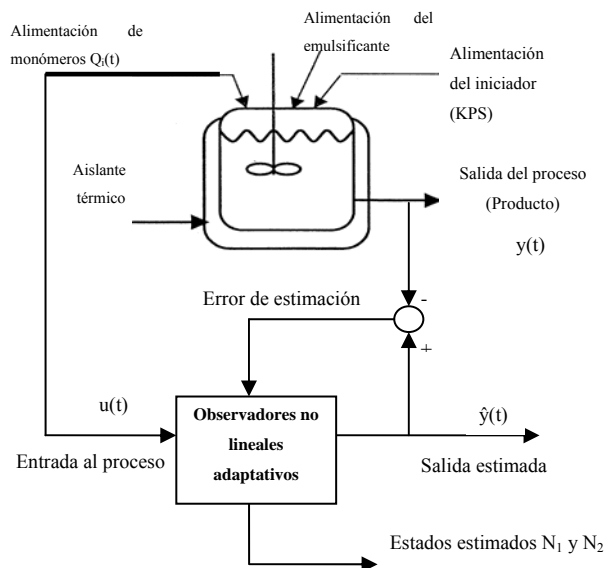
1. Blencowe, A.; Tan, J. F.; Goh, T. K.; Qiao, G. G. *Polymer* 2009, 50, 5–32.

## OBSERVADORES NO LINEALES ADAPTATIVOS PARA PROCESOS DE COPOLIMERIZACIÓN EN EMULSIÓN

Sócrates Espinoza-Salgado,\* René Salgado-Delgado, Edgar García-Hernández, Zully Vargas-Galarza, Francisco Javier Hernández-Campos

*Departamento de posgrado e Investigación. Instituto Tecnológico de Zacatepec. Apdo. Postal 45. Zacatepec, Mor., C.P. 62780, México. E mail: socspinoza@yahoo.com.mx*

El problema esencial de un observador de estados, es el de diseñar a un sistema dinámico capaz de reconstruir o estimar los valores de los estados reales y ciertos parámetros de un proceso a partir de las mediciones físicas de las entradas y de las salidas de este mismo<sup>1</sup>, (ver Fig. 1).



**Fig. 1.** Reactor de copolimerización en emulsión con un observador de estados no lineal.

Los principales problemas que complican a este proceso son; su no linealidad, incertidumbres, la escasez de sensores físicos robustos y confiables para medir variables de estado en línea. Por lo tanto, una de las consecuencias lógicas para resolver este tipo de problemas es la de implementar los observadores no lineales adaptativos<sup>1,2</sup>.

En el presente trabajo se implementan dos observadores no lineales (1)

Adaptativo1 y (2) Adaptativo de gran ganancia2, al proceso de copolimerización en emulsión, los sistemas de ecuaciones son los siguientes respectivamente:

$$\sum_{NL1} \begin{cases} \dot{x}(t) = Ax + \Phi(x,u) + bf(x,u)\theta \\ y(t) = Cx \end{cases} \quad (1)$$

$$\sum_{NL2} \begin{cases} \dot{\hat{N}}(t) = \hat{\mu}(t) f(\hat{N}(t)) + g(\hat{N}(t))u(t) \\ \quad + \left[ \frac{\partial \Phi(\hat{N}(t))}{\partial \hat{N}(t)} \right]^{-1} \Gamma(t) S_{\theta}^{-1} C^T (y(t) - \hat{y}(t)) \\ \hat{\mu}(t) = \frac{\theta^2}{\hat{\phi}_n(\hat{N}(t))} (y(t) - \hat{y}(t)) \end{cases} \quad (2)$$

Para validar el desempeño de estos observadores, se realizó una síntesis de copolimerización en emulsión de estireno con acrilato de butilo, en modo de operación batch. Los resultados obtenidos a partir de la experimentación son bastante aceptables respecto a las variables de estado estimadas  $\hat{N}(t)$  y el parámetro de aglutinación estimado  $\hat{\mu}(t)$ , por parte de estos observadores no lineales adaptativos (ver Figs. 2 y 3).

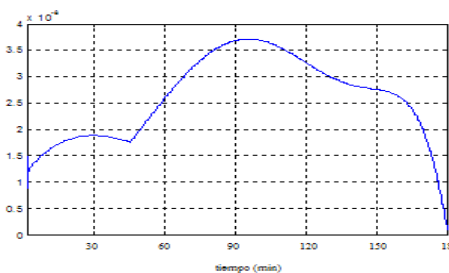
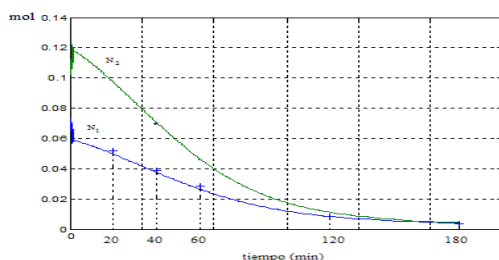


Fig. 2. Estimación de estados N1 y N2.

Fig. 3. Estimación del parámetro  $\hat{\mu}(t)$

## Referencias

1. State and parameter estimation in chemical and biochemical processes: a tutorial, D. Dochain, Journal of Process Control 13, 2003, 801-818.
2. Févotte, G.; T. F., McKenna; Othman, S. and Hammouri, H., Chem. Eng. Sci., 1998; 53, 4, pp. 773- 786,.

## AJUSTANDO LA TEMPERATURA DE TRANSICIÓN DE FASE DE LA POLI(N-ISOPROPILACRILAMIDA) POR COPOLIMERIZACIÓN RAFT: POLÍMEROS LINEALES, POLÍMEROS EN BLOQUE Y ESTRELLAS POLIMÉRICAS

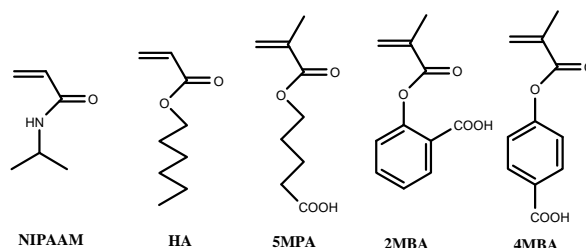
Ángel Licea-Caveríe,<sup>1\*</sup> Lorenzo A. Picos-Corrales,<sup>1</sup> Jesús Álvarez-Sánchez,<sup>1</sup> José M. Cornejo-Bravo,<sup>2</sup> Curtis W. Frank<sup>3</sup>

(1) Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22000, México. E mail: aliceac@tectijuana.mx.

(2) Universidad Autónoma de Baja California, Facultad de Ciencias Químicas e Ingenierías, 22300 Tijuana, B.C., México.

(3) Center on Polymer Interfaces and Macromolecular Assemblies, Stanford University, Department of Chemical Engineering, Stanford, CA 94305-5080, USA.

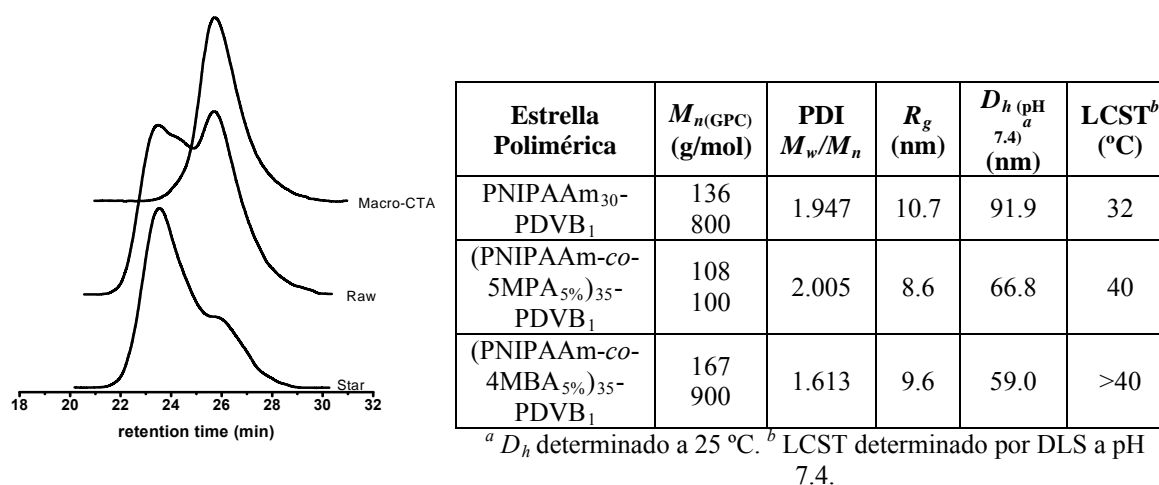
La poli(*N*-Isopropilacrilamida) (PNIPAAm) es un material polimérico muy atractivo por su termosensibilidad reversible reportada en soluciones acuosas y en su forma de gel. La termosensibilidad tiene su origen en una transición ovillo-globular que ocurre a temperaturas cercanas a 32 °C. Esta temperatura es llamada temperatura crítica inferior de solución (LCST). Para aplicaciones de suministro de fármacos la LCST tiene que ser ajustada a la temperatura corporal (arriba de 37 °C). Esto se puede lograr copolimerizando NIPAAm con comonómeros hidrofílicos, incluyendo comonómeros con grupos ionizables. En este trabajo se reporta la preparación de copolímeros al azar de NIPAAm con comonómeros ácidos-hidrofóbicos con el objeto de controlar la LCST (ver Figura 1). Por otro lado, ya que los copolímeros preparados contienen grupos ionizables, se abre la posibilidad de ajustar la LCST en función del pH del medio.



**Figura 1.** Estructura química de monómeros utilizados: *N*-isopropilacrilamida (NIPAAm), acrilato de *n*-hexilo (HA), 5-metacrililoiloxi-ácido pentanoico (5MPA), 2-metacrililoiloxi-ácido benzoico (2MBA) y 4-metacrililoiloxi-ácido benzoico (4MBA).

Además, se aprovecha la versatilidad de la técnica de polimerización radicalica controlada llamada RAFT para preparar materiales poliméricos en diferentes topologías: lineales al azar, lineales en bloques y estrellas poliméricas.

La introducción de los comonómeros ácidos 5MPA y 4MBA en proporciones alrededor de 5% fue suficiente para ajustar la LCST de la poli(NIPAAm) a valores entre 38 y 40 °C a pH fisiológico de 7.4. Las bondades de la técnica RAFT permitieron que esos copolímeros al azar fueran re-activados para preparar copolímeros anfífilicos en dibloques con rendimiento moderados (~50%) pero con control de la composición y polidispersidad. La técnica RAFT tuvo que ser adaptada para la preparación de estrellas poliméricas (ver Figura 2), manteniendo las estrellas con brazos copoliméricos su LCST ajustada.

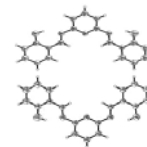


**Figura 2.** Cromatogramas de GPC de la estrella poli(NIPAAm-co-5MAP<sub>5%</sub>)<sub>1</sub>-PDVB<sub>35</sub> y datos de varias estrellas con brazos de poli(NIPAAm) y comonómeros ácidos.

La técnica RAFT probó ser un excelente método sintético para preparar polímeros sensible a la temperatura en base a NIPAAm en topología diferentes y la introducción de comonómeros ácidos-hidrofóbicos resultó en un ajuste de la LCST a temperaturas fisiológicas relevantes (38-40 °C).

**Agradecimientos.** Este proyecto fue financiado por el CONACYT (CIAM2003-41414).





## SÍNTESIS DE POLÍMEROS TELEQUÉLICOS CON DIVERSAS FUNCIONALIDADES Y SU APLICACIÓN EN LA PREPARACIÓN DE REDES POLIMÉRICAS

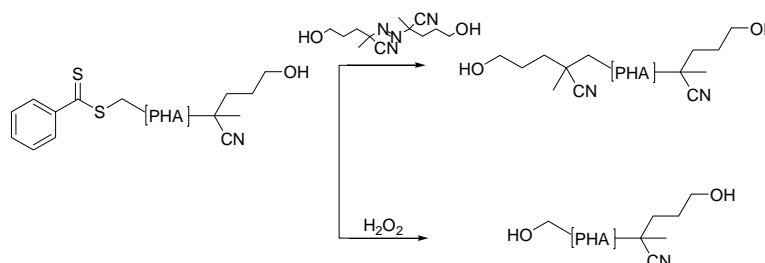
Norma A. Cortez L., Angel Licea Claverie\*

*Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22000, México. E mail: aliceac@tectijuana.mx.*

La polimerización RAFT es un método de polimerización eficiente, versátil y novedoso desarrollado recientemente el cual, es compatible con un amplio intervalo de monómeros, solventes, iniciadores y grupos funcionales.<sup>1</sup> Esto hace a la polimerización RAFT un método ideal para la síntesis de materiales poliméricos bien definidos. El éxito de una polimerización vía RAFT consiste en la elección apropiada del agente de transferencia (CTA) y condiciones de polimerización adecuadas al monómero, lo cual resulta en polímeros con distribución de pesos moleculares angosta ó baja polidispersidad ( $PDI < 1.3$ ).<sup>2</sup> Como una consecuencia del proceso RAFT todas las cadenas poliméricas contienen el grupo funcional del CTA, en la mayoría de los casos un grupo ditiobenzoato, con lo cual adquieren carácter “viviente”. Una ventaja de esta técnica es la posibilidad de diseñar cadenas poliméricas con funcionalidades diferentes en el extremo de la cadena. Los telequélidos son polímeros que contienen grupos funcionales reactivos<sup>3</sup> (-OH, -COOH,  $NH_2$ , -SH, etc) en ambos extremos de la cadena y son usados en aplicaciones coloidales, en catálisis, en sistemas de liberación de fármacos, en la modificación de superficies, para preparar copolímeros en bloque, para preparación de redes poliméricas, además de su uso como agentes entrecruzantes y como compatibilizantes.<sup>3</sup>

En este trabajo se prepararon polímeros telequélidos de acrilato de hexilo (PHA) modificando los grupos funcionales terminales en dos etapas; la primera etapa consiste en la preparación del homopolímeros semitelequélidos, los cuales fueron sintetizados con una gran variedad de agentes RAFT funcionalizados con grupos OH, COOH y

NHR. La segunda parte del trabajo consiste en la síntesis de polímeros telequéricos para lo cual debe removerse el grupo ditiobenzoato. Las diversas estrategias incluyen aminólisis, tratamiento térmico, reacción con un iniciador azo y la reacción con agentes oxidantes. En este trabajo se exploró la eliminación del grupo ditiobenzoato a través de la reacción con un iniciador azo y agentes oxidantes ( $H_2O_2$ ). De esta manera y de forma simultánea el ditiobenzoato es removido y una nueva funcionalidad es introducida en el extremo de la cadena polimérica. En la Figura 1 se muestra la segunda etapa de la síntesis de polímeros telequéricos siguiendo dos rutas de eliminación del grupo ditiobenzoato. Los resultados demuestran que si bien ambas rutas nos generan el telequérico deseado hay diferencias en el proceso de purificación que hay que considerar. Por otro lado la ruta que utiliza iniciadores azo es mucho más versátil pues permite introducir una diversidad de grupos funcionales. Los telequéricos fueron reaccionados con entrecruzantes multifuncionales para obtener las redes poliméricas.



**Figura 1.** Rutas alternativas en la preparación de polímeros telequéricos que contienen grupo funcional –OH en ambos extremos de la cadena.

## Referencias

1. Krstina, J.; Moad, G.; Rizzardo, E.; Winzor, C. L.; Berge, C. T.; Fryd, M. *Macromolecules* 1995, 28, 5381-5385.
2. Rizzardo, E.; Chiefari, J.; Chong, Y. K.; Ercole, F.; Krstina, J.; Jeffery, J.; Le, T. P. T.; Mayadunne, R. T. A.; Meijs, G. F.; Moad, C. L.; Moad, G.; Thang, S. H. *Macromol. Symp.* 1999, 143, 291-307.
3. Chiefari, J.; Chong, Y. K.; Ercole, F.; Krstina, J.; Jeffery, J.; Le, T. P. T.; Mayadunne, R. T. A.; Meijs, G. F.; Moad, C. L.; Moad, G.; Rizzardo, E.; Thang, S. H. *Macromolecules* 1998, 31, 5559-5562.

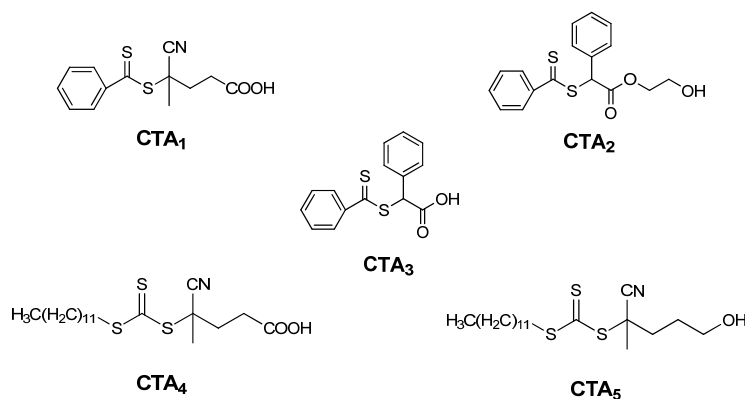
## POLIMERIZACIÓN RADICÁLICA CONTROLADA VÍA RAFT DE N-VINILCAPROLACTAMA MEDIADA POR DITIOBENZOATOS Y TRITIOCARBONATOS

Sandra M. Ponce-Vargas,<sup>1</sup> Ángel Licea-Claverie,<sup>1\*</sup> José M. Cornejo-Bravo<sup>2</sup>

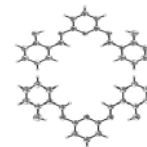
(1) Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22000, México. E mail: aliceac@tectijuana.mx.

(2) Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería. Universidad Autónoma de Baja California. Calzada Tecnológico 14418. C. P. 22390 Mesa de Otay, Tijuana, B. C. México.

La poli(N-vinil caprolactama), PNVCL es un polímero termosensible que en solución acuosa colapsa cuando la temperatura excede los 32 °C aproximadamente; sus propiedades la hacen valiosa en biomedicina y biotecnología.<sup>1</sup> La técnica RAFT (Transferencia de Cadena Reversible de Adición-Fragmentación) es una técnica de polimerización radicalica controlada versátil y aplicable a una amplia gama de monómeros bajo un gran número de condiciones experimentales, de allí la importancia de su uso en la polimerización de la NVCL. En este trabajo se presentan resultados de intentos de polimerización RAFT de la NVCL utilizando diferentes CTA's, tres ditiobenzoatos (CTA1-3) y dos tritiocarbonatos (CTA4-5) sintetizados en el laboratorio (Fig. 1). De manera general, utilizando ditiobenzoatos el peso molecular obtenido fue muy bajo. En la Tabla 1 se presentan los resultados obtenidos para el tritiocarbonato CTA.



**Figura 1.** CTA's utilizados en la síntesis de homopolímeros de NVCL.



**Tabla 1.** Polimerización RAFT de NVCL en solución en presencia de CTA<sub>4</sub>

Exp.	[NVCL] <sub>0</sub> /[CTA] <sub>0</sub> /[I] <sub>0</sub>	Rend. (%)	Mn(calc) (g/mol)	Mn (g/mol)	IPD
8	230/1/0.4	30.6	10,200	15,600	1.5
9	230/1/1	58.9	19,300	19,300	1.78
10	230/1/2	81.5	26,500	20,800	1.36

En general, se observó que a medida que aumentaba la concentración de iniciador el rendimiento también se incrementaba; sin embargo el control sobre el IPD se perdió un poco. Con el tritioarbonato CTA<sub>5</sub> también se observó que al aumentar la concentración de iniciador el rendimiento de reacción también se incrementó; sin embargo en cuanto al peso molecular no se obtuvo un buen control. De igual manera se observó que utilizando el iniciador 4,4'-azobis-(ácido 4-cianoaléxico) (ACVA) se obtuvieron IPD mayores, mientras que con el 4,4'-azobis(4-cianopentanol) (ACP), que tiene el radical con la misma estructura que el grupo saliente del CTA<sub>5</sub>, funcionó mucho mejor.

El empleo de CTA's tipo ditioéster para polimerización RAFT de NVCL no es una estrategia adecuada ya que inhiben la polimerización. Utilizando CTA's del tipo tritioarbonato se obtuvieron mejores resultados de polidispersidad, peso molecular y rendimiento que con los ditiobenzoatos; sin embargo, es necesario realizar un estudio cinético completo modificando diferentes condiciones de reacción para obtener resultados más acordes con una polimerización radicalica controlada.

### Agradecimientos

Este trabajo fue desarrollado con el apoyo recibido del CONACYT (CIAM2003-41414) y de la DGEST (2537-09P).

### Referencias

1. Nasimova, I.; Makhaeva, E.; Khokhlov, A. J. Appl. Polym. Sci. 2001, 81, 2838-2842.

## FORMACIÓN DE NANOESTRUCTURAS A PARTIR DE COPOLÍMEROS EN BLOQUE CONTENIENDO N-ISOPROPILACRILAMIDA

Alejandro Vega-Ríos,<sup>1</sup> Ángel Licea-Claveríe,<sup>1\*</sup> Arturo Zizumbo-López,<sup>1</sup> Roberto Alexander-Katz<sup>2</sup>

- (1) Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22000, México. E mail: [aliceac@tectijuana.mx](mailto:aliceac@tectijuana.mx).  
 (2) Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa, 09340 México, D.F. México.

La propiedad de los copolímeros en bloque de auto-ensamblarse, ha llevado a la elaboración de una serie de materiales nanoestructurados sofisticados, que hoy abre una nueva frontera en la ciencia de los materiales con aplicaciones en diversos campos, tales como: cristales fotónicos, el suministro de medicamentos, catalizadores y otros, donde el orden a nivel manométrico de la separación de las microfases es un factor crucial.<sup>1</sup> Los copolímeros en bloques lineales tipo A-B donde A y B son inmiscibles, originan una amplia gama de microestructuras en estado sólido y en solución, dependiendo de la composición y el peso molecular del copolímero. Las dimensiones de esas microestructuras son comparables al tamaño molecular de los copolímeros en bloques, típicamente entre 5 y 50 nm, estas dimensiones han dado lugar a que se proponga su uso como nanoplantillas para preparar materiales nano-estructurados. En este trabajo se utilizó el método de polimerización viviente secuencial por transferencia de cadena reversible de adición-fragmentación (RAFT) para preparar una serie de copolímeros en dibloques conteniendo un bloque sensible a la temperatura (ver Figura 1).

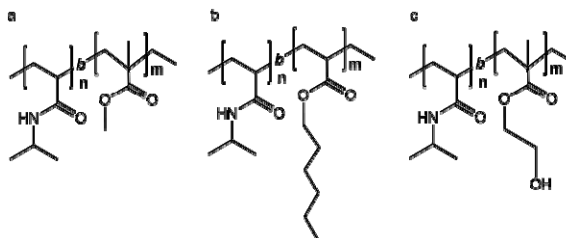


Figura 2. Estructura química. a) poli(NIPAAm-*b*-MMA) b) poli(NIPAAm-*b*-HA) c) poli(NIPAAm-*b*-HEMA).

Los pesos moleculares obtenidos se encuentran en un intervalo de 20,000 g/mol a 90,000 g/mol y la proporción de los bloques varía permitiendo predecir la formación de cilindros y lamelas a nivel nanométrico. El estudio de las micro/nanoestructuras formadas por TEM para muestras de granos de polímero microtomadas y AFM para muestras depositadas por Spin-coating sobre placas de vidrio limpio, muestra que el estado de equilibrio termodinámico no se alcanza fácilmente por lo que fue necesario emplear distintos métodos de envejecimiento térmico y vapores de solventes. En la Figura 2 se observan dos ejemplos de estructuras obtenidas. En ambos casos el orden nanométrico en el equilibrio aún no se alcanza.

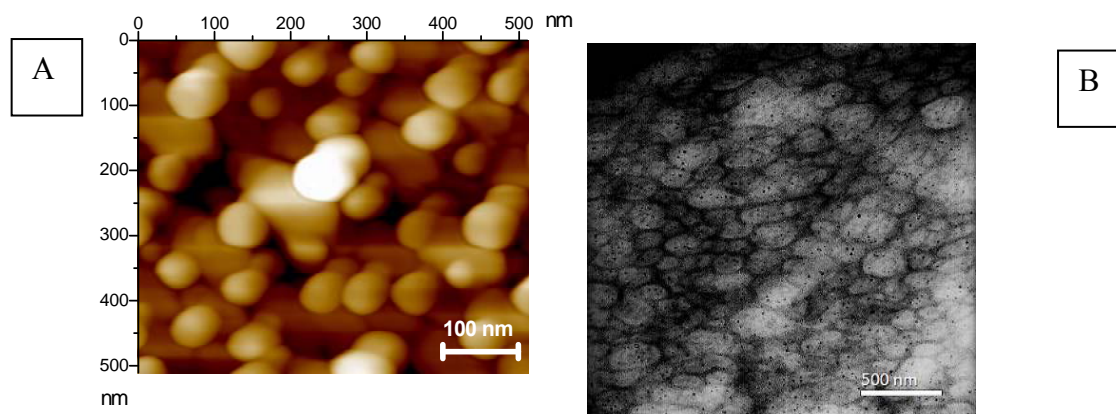


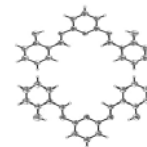
Figura 3. Imágenes de: (A) AFM del poli(NIPAAm-*b*-MMA) y (B) TEM del poli(NIPAAm-*b*-HA).

Por la técnica RAFT fue posible sintetizar copolímeros en dibloques con control de la composición química en base a la NIPAAm. El análisis microscópico muestra estructuras nanométricas que aun no alcanzan su equilibrio termodinámico.

**Agradecimientos.** Este proyecto es financiado por el CONACYT (SEP2007-60792) se agradece el apoyo de P. Castillo (UAM-I) por análisis de TEM y I.A. Rivero por RMN.

## Referencias

1. Castelleto V., Hamley I. W., Curr. Opin. Solid. State Mat. Sci., 2008, 8 426.



## ELECTROSÍNTESIS DE POLÍMEROS Y COMPUESTOS DE SILICIO

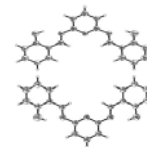
Arturo Zizumbo López,<sup>1\*</sup> Viatcheslav Jouikov,<sup>2</sup> Ángel Licea Claverie,<sup>1</sup> Rosa María Félix Navarro<sup>1</sup>

(1) Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Blvd Industrial S/N, B. C. 22500, México. E-mail: azizumbo@tectijuana.mx.

(2) Laboratory of Molecular and Macromolecular Electrochemistry, UMR 6510, University of Rennes I, 35042, Rennes, France.

La química del silicio comienza con la obtención directa de compuestos de silicio sustituidos con diferentes grupos orgánicos a partir de la reacción de silicio elemental y cloruros orgánicos en presencia de catalizadores a base de cobre. Actualmente, este proceso es el más usado en la industria química, sin embargo este se lleva a cabo a altas temperaturas y produce una gran variedad de productos de silicio, los cuales deben ser purificados en etapas posteriores. Otros métodos de síntesis como las reacciones de Grignard, la hidrosililación y la sililación electroquímica son alternativas para la síntesis de compuestos de silicio en una forma más controlada. Por otra parte la síntesis de polímeros y copolímeros de silicio se han obtenido por acoplamiento químico entre diclorosilanos,<sup>1</sup> pero existe poca reproducibilidad y baja tolerancia a grupos funcionales. Explorando la posibilidad de obtener compuestos orgánicos de silicio a partir de silicio elemental y polímeros de silicio de alto peso molecular a partir de diclorosilanos, la electroquímica<sup>2</sup> es una vía que promete un mayor control del proceso y tolerancia a grupos funcionales. En base a lo anterior, en este trabajo se presenta la obtención de polímeros de silicio por electrorreducción de diclorosilanos y de compuestos de silicio por electroxidación de silicio elemental a potenciales controlados.

La obtención de polímeros y copolímeros de silicio se llevó a cabo por electrorreducción en celdas divididas por una membrana neutra en una mezcla de THF/HMPA como solvente, cátodos de acero inoxidable y ánodos de grafito o acero inoxidable, perclorato de tetrabutilamonio como electrolito y un diclorosilano o mezcla



de diclorosilanos. La obtención de compuestos de silicio se realizó por electroxidación de silicio metálico en acetonitrilo o THF, y  $\text{Bu}_4\text{NClO}_4$  como electrolito soporte en presencia de sustratos orgánicos.

Se obtuvieron los homopolímeros lineales de silicio polifenilmetilsilano el polivinilmetilpolisilano de pesos moleculares de 132,000 gr-mol. Se obtuvieron los copolímeros de Polidifenil-co-dimetilsilano de pesos moleculares de 8,500 g/mol, Polivinilmetil-co-difenilsilano de un peso molecular de 18,500 gr/mol, y polivinilmetil-co-dimetilsilano de 25,000 gr/mol.

**Tabla 1.** Condiciones de electroreducción de diclorosilanos

Corrida	Membrana	Electrolito	Clorosilano 1 M l/l	Cátodo	Anodo	THF:HMPA V:V	Voltaje V	T Reacción h	Catolito Mn (PDI)
1	Teflon	$\text{Bu}_4\text{NClO}_4$	$\text{MePhSiCl}_2$	Inox	Grafito	10:1	45	2.3	131045 (1.82)
2	Teflon	$\text{Bu}_4\text{NClO}_4$	$\text{ViMeSiCl}_2$	Inox	inox	10:1	45	2.5	132936 (1.72)
3	Polisulfona	$\text{Bu}_4\text{NClO}_4$	$\text{Ph}_2\text{SiCl}_2$ $\text{Me}_2\text{SiCl}_2$	Inox	Inox	9:1	45	15	8490 (1.14)
4	Polisulfona	$\text{Bu}_4\text{NClO}_4$	$\text{Ph}_2\text{SiCl}_2$ $\text{MeViSiCl}_2$	Inox	Grafito	9:1	45	7	18520 (1.60)
5	Polisulfona	$\text{Bu}_4\text{NClO}_4$	$\text{Me}_2\text{SiCl}_2$ $\text{MeViSiCl}_2$	Inox	Grafito	9:1	45	10	25,170 (1.31)

En los productos de la disolución de electrodo de silicio por oxidación directa se pudo detectar la formación del enlace de Si-F, Si-C, y Si-Ph en presencia de diferentes sustratos, alquílicos y aromáticos. También se obtuvieron enlace Si-O en reacciones indirectas utilizando alcoholes como sustratos. El uso de membranas favoreció el incremento de pesos moleculares en los polímeros y la obtención de compuestos de silicio a partir de electrodo de silicio.

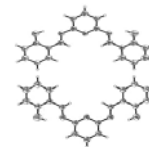
## Referencias

1. P. Trefonas, J. R. Jr. Damewood, R. West, R. D. Miller, *Organometallics*, 1985, 4, 1318-1319.
2. D. Deffieux, M. Bourdeau, C. Biran, and J. Dunogues, *Organometallics*, 1994, 13, 2415-2422.





*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.

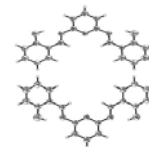


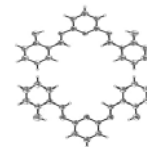
QUÍMICA FARMACÉUTICA

PHARMACEUTICAL



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.





## ISOLATION AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF A NOVEL NEUROTOXIC AGENT FROM THE MARINE CYANOBACTERIA *LYNGBYA* *BOULLONII*

Irma E. Soria-Mercado,<sup>1,2\*</sup> Alban Pereira-Badilla,<sup>1</sup> Zhengyu Cao,<sup>3</sup> Thomas F. Murray,<sup>3</sup>  
William Gerwick<sup>1</sup>

(1) *Center for Marine Biotechnology and Biomedicine, Scripps Institute of Oceanography,  
University of California San Diego, La Jolla, Ca, 91037-0212*

(2) *Facultad de Ciencias Marinas, Universidad Autónoma de Baja California, Ensenada,  
BC, 22800, México.*

(3) *Department of Pharmacology, Creighton University School of Medicine, Omaha, NE  
68178 USA.*

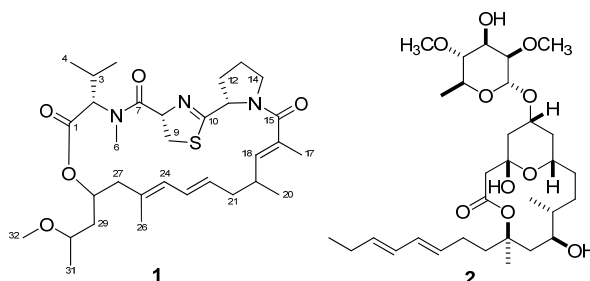
The secondary metabolites of marine cyanobacteria are the most biologically active in the natural world.<sup>1</sup> The majority of these compounds have been reported from collections of a single genus, *Lyngbya majuscula*, but at date, the less explored species *L. bouillonii* has also proven to be a rich source of new bioactive natural product with a wide chemotypes, including linear tetrapeptides, macrolides,<sup>2</sup> as well as exceptionally active cyclic depsipeptides.<sup>3,4</sup>

In the course of efforts to discover new bioactive natural products from marine cyanobacteria, we have isolated a novel cyclic depsipeptide from *Lyngbya bouillonii* collected in Papua New Guinea by SCUBA in Milne Bay near the town of Alotau, Papua New Guinea, on December 12, 2003.

The organic extract (CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>/methanol 2:1) was subjected to silica gel vacuum column chromatography (stepwise gradient hexane/EtOAc/MeOH) to produce nine fractions (A-I). Neurotoxic fraction F was subjected to a combination of further bioassays and <sup>1</sup>H NMR-guided fractionation, comprised of silica gel column chromatographies and reversed-phased HPLC to obtain pure named alotamide A (**1**) a structurally intriguing cyclic depsipeptide of mixed polyketide/non-ribosomal peptide biosynthetic origin, accompanied by the previously reported metabolite lyngbouilloside<sup>1</sup> (**2**).

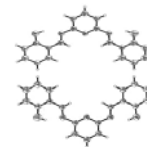
Alotamide A (**1**) displayed an elevation of the intracellular calcium concentration

(EC<sub>50</sub> of 4.18  $\mu$ M) as well as an increase in the rate of spontaneous calcium ion oscillations in murine cerebrocortical neurons with an EC<sub>50</sub> of 4.27  $\mu$ M.



## References

1. Tidgewell, K.; Clark, B. T.; Gerwick, W. H.; The Natural Products Chemistry of Cyanobacteria. In *Comprehensive Natural Products Chemistry*, 2nd ed.; Moore, B.; Crews, P., Eds.; Elsevier Limited: Oxford, UK, 2009; in press.
2. Gerwick, G. W.; Tan, L. T.; Sitachitta, N.; *Alkaloids Chem. Biol.* 2001, 57, 75-184.
3. Tan, L. T.; *Phytochemistry* 2007, 68, 954-979.
4. Van Wagoner, R. M.; Drummond, A. K.; Wright, J. L.; *Adv. Appl. Microbiol.* 2007, 61, 89-217.



## ESTUDIO ELECTROQUÍMICO DE VAINILLINA Y CAPSAICINA EN SOLUCIÓN FISIOLÓGICA HARTMANN

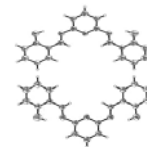
María Patricia Calvillo Castorena,<sup>1</sup> Mercedes Teresita Oropeza Guzmán,<sup>2\*</sup> Iván Córdova Guerrero<sup>1</sup>

*(1) Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma de Baja California, Calz. Tecnológico 14418, Col. Mesa de Otay, Tijuana, B.C. 22390*

*(2) Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Blvd. Industrial s/n, Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22500*

Los radicales libres son producidos durante las reacciones bioquímicas celulares indispensables para que la célula desarrolle sus funciones vitales. El impacto negativo de varios factores ambientales puede producir la formación excesiva de dichos radicales ocasionando en la célula estrés oxidativo, el cual causa enfermedades como cáncer, arteriosclerosis y envejecimiento del organismo en general.<sup>1</sup> Los antioxidantes son sustancias que detienen y previenen la propagación de los radicales libres. Nuestro cuerpo tiene antioxidantes enzimáticos y no enzimáticos para protegerse de los radicales libres; sin embargo, también existe otra fuente importante de antioxidantes provenientes de frutas y vegetales, tales como especies del género *Capsicum* (chile), las cuales son ricas en antioxidantes como ácido ascórbico, compuestos fenólicos, carotenoides y capsaicinoides. Entre los capsaicinoides, la capsaicina (8-metil-N-6-vainillil nonenamida) compuesto que le da la pungencia al chile, ha mostrado en estudios recientes que el consumo de esta disminuye el riesgo de contraer cáncer estomacal entre otros<sup>2</sup>. Por tal motivo, surge el interés por estudiar el potencial de oxidación de este compuesto y su precursor, la vainillina, ya que el potencial de oxidación permite determinar la capacidad reductora de los compuestos y por ende su capacidad antioxidante, es decir, a mayor poder reductor mejor antioxidante. Las técnicas electroanalíticas empleadas fueron voltamperometría de pulso diferencial y voltamperometría de onda cuadrada debido a que dichas técnicas son métodos muy sensibles y selectivos.<sup>3</sup>

El potencial de oxidación tanto de la capsaicina como de la vainillina fue



determinado por voltamperometría de pulso diferencial y voltamperometría de onda cuadrada, empleando solución fisiológica Hartmann como electrolito soporte, celda de tres electrodos: electrodo de trabajo de carbón vítreo, electrodo Ag/AgCl como electrodo de referencia y como contraelectrodo, electrodo de platino.

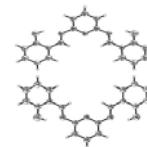
Los resultados de la Tabla 1 indican que la voltamperometría de pulso diferencial fue la técnica mas sensible para detectar el potencial de oxidación, ya que estos fueron menores que los obtenidos por voltamperometría de onda cuadrada.

**Tabla 1.** Potencial de oxidación soluciones de vainillina y capsaicina en solución fisiológica Hartmann por voltamperometría de pulso diferencias y de onda cuadrada.

	<b>Voltamperometría de pulso diferencial</b>	<b>Voltamperometría de onda cuadrada</b>
<b>Vainillina</b>	630 mV	680 mV
<b>Capsaicina</b>	516 mV	560 mv
	892 mV	940 mV

### Referencias

1. Bainia, K. Z.; Ivanova, A. V.; Sharafutdinova, E. N.; Lozovskaya, E. L.; Shakarina, E. I., Potentiometry as a method of antioxidant activity investigation. *Talanta* 71 (2007) 13-18.
2. Salazar-Olivo, L. A.; Silva-Ortega, C.; Efectos farmacologicos de la capsaicina, el principio pungente del chile. *Biologia Scripta* vol. 1, No. 1, pp: 7-14, 2004.
3. M. S. Cosio, S. Buratti, S. Mannino, S. Benedetti, *Food Chemistry*, 97, 725-731 (2006).



## ACTIVIDAD ANTITUMORAL DEL EXTRACTO ACETÓNICO DE LA RAÍZ DE *SALVIA PACHYPHYLLA*

Remedios Sánchez,<sup>1\*</sup> Bertha Landeros,<sup>2</sup> Iván Córdova<sup>2</sup>

(1) CISALUD. Unidad Valle las Palmas. Universidad Autónoma de Baja California,  
Calzada Tecnológico # 14418, Mesa de Otay, Tijuana, B.C. C.P. 22390

E mail: remchavez@uabc.mx.

(2) Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma de Baja  
California, Calzada Tecnológico # 14418, Mesa de Otay, Tijuana, B.C. C.P. 22390

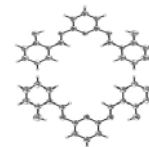
La respuesta insuficiente de un gran número de agentes anticancerígenos para el tratamiento de tumores de lento crecimiento o de rápida proliferación, los altos índices de toxicidad de la mayoría de estos agentes y el desarrollo de resistencia de algunos tumores a los mismos, son algunas de las causas que justifican la búsqueda de nuevos compuestos antineoplásicos. La síntesis de nuevos productos continúa siendo una estrategia importante para el desarrollo de nuevos anticancerígenos, sin embargo, esta metodología genera relativamente pocos productos con aplicación terapéutica. En contraste, las investigaciones sistémicas en la búsqueda de nuevos agentes antitumorales a partir de materias primas vegetales, ha permitido el hallazgo de agentes quimioterapéuticos o de moléculas prototipo de gran utilidad para el desarrollo de productos con aplicación terapéutica.

### 1. Recolección del material.

Las raíces de *Salvia pachyphylla* (Lamiaceae) se colectaron en La Sierra Juárez-Parque Nacional Constitución, Baja California (Ensenada, México); el 7 de septiembre de 2006.

### 2. Maceración y fraccionamiento.

Las raíces secas y pulverizadas finamente de *S. pachyphylla* se extrajeron por maceración con acetona. Después de dos semanas, el disolvente se eliminó a 40 °C en rotaevaporador, originando 9.1 g de un extracto crudo viscoso, color rojizo. El extracto se redisolvió en MeOH/H<sub>2</sub>O y se realizó una partición con n-hexano y posteriormente con cloroformo.



3. Fraccionamiento del extracto clorofórmico. El extracto obtenido de la partición con cloroformo se sometió a un fraccionamiento cromatográfico utilizando como mezcla eluyente hexano/cloroformo. De una de las fracciones obtenidas rotulada como CT, se purificó mediante CCF un compuesto y se estableció su estructura mediante técnicas espectroscópicas y espectrométricas como el producto natural criptotanshinona.

#### 4. Actividad antitumoral .

Se desarrolló un diseño experimental para evaluar la citotoxicidad del producto natural frente a líneas celulares tumorales de origen humano (A2780, HDL-100, HeLa, SW1573, T47D y WiDr).

Los resultados se muestran en la Tabla 1; se presentan en unidades de  $\mu\text{g/mL}$  y se realizaron por triplicado.

**Tabla 1.** Actividad antitumoral de las fracciones de la raíz de *S. pachyphylla*

	A2780	HBL-100	HeLa	SW1573	T47D	WIDR
CT	<2.5	<2.5	2.9	<2.5	5.9	4.6
EA	<2.5	<2.5	5.2	<2.5	6.1	7.9
FC	<2.5	<2.5	3.8	<2.5	6.0	6.2
FH	<2.5	<2.5	2.8	<2.5	6.5	5.8
EM	14	17	55	19	51	47

Del estudio fitoquímico de la raíz de *S. pachyphylla* y mediante el uso de técnicas cromatográficas, se pudo aislar un compuesto, que fue caracterizado estructuralmente como el producto natural criptotanshinona. Este fue evaluado biológicamente en bioensayos antiproliferativos y los resultados muestran que este producto de la familia de los diterpenoides es un agente con actividad antitumoral potencial.

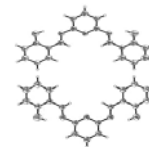
#### References

1. Topcu, G. *J. Nat. Prod.* **2006**, *69*, 482-487.
2. Ulubelen, A., Oksuz, S., Topcu, G., Goren, A. Voelter, W. *J. Nat. Prod.* **2001**, *64*, 549-551.





*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.

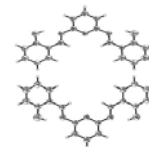


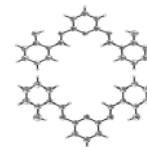
**CARTELES**

**POSTERS**



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.





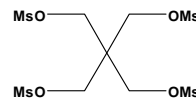
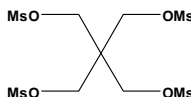
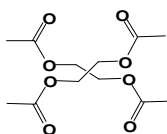
## ESTUDIO DE LIBERACIÓN DE COMPUESTOS VOLÁTILES CON DERIVADOS DEL PENTAERITRITOL

Clarissa Arlyn López Cuadras, Jazmín Navarrete Guzmán, Domingo Madrigal Peralta\*.

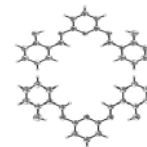
*Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22500, México. E mail: madrigal@tectijuana.mx.*

Se encuentra reportado en la literatura que compuestos poliméricos, macromoléculas o dendrímeros son empleados en el área de medicina y cosmetología como materiales de soporte que sirven para la liberación prolongada de fármacos o aromas<sup>1</sup>. En cosmetología se utilizan compuestos (fijadores<sup>2</sup>) con propiedades para liberar lentamente los compuestos volátiles o colorantes<sup>3</sup>, en medicina se utilizan como liberadores de fármacos<sup>4</sup>. Constantemente se hacen investigaciones buscando materiales con estas propiedades más eficientes, entre ellos se encuentran los dendrímeros los cuales son macromoléculas tridimensionales que emanan de un núcleo y tienen un número definido de generaciones con grupos funcionales orgánicos en la periferia<sup>5</sup>. Estos compuestos son capaces de alojar en las cavidades internas o en la superficie pequeñas moléculas que después pueden ser liberadas lentamente<sup>6</sup>. En este trabajo se presentan los resultados del estudio efectuado en la liberación de aceites esenciales utilizando dendrímeros derivados del pentaeritritol de generación cero.

Se prepararon tres formulaciones con diferentes mezclas de aceites esenciales, a las cuales se les agregó cada uno de los dendrímeros sintetizados (Acetato del pentaeritritol 1. Mesilato del pentaeritritol 2. Tosilato del pentaeritritol 3.) Obteniéndose un total de 12 combinaciones diferentes.



Acetato del pentaeritritol (1) Mesilato del pentaeritritol (2). Tosilato del pentaeritritol

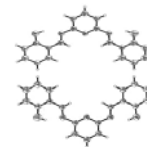


(3).

Las pruebas se realizaron sobre cuadros de papel filtro, se monitoreó en intervalos de tiempo de dos horas para comprobar si se percibía el aroma. Los resultados obtenidos conducen a la conclusión que los compuestos (1), (2) y (3) son una opción factible como materiales para usarse en la liberación lenta de compuestos volátiles.

### Referencias

1. Niu, Y.; Crooks, R. M.; C. R. Chim. 2003, 6, 1049-1059.
2. [www.textoscientificos.com/quimica/cromatografia/parametros](http://www.textoscientificos.com/quimica/cromatografia/parametros) (8 de marzo de 2008).
3. Jansen, J.; de Brabander-van den Berg, E.; Meijer, W. Science 1994, 266-1226.
4. Zhao, M.; Crooks, R. M.; Angew. Chem.Int. Ed. Engl. 1999, 38, 364-366.
5. Wiwattanapatapee, R.; Carreño-Gómez, B.; Malik, N.; Duncan, R. Pharmaceutical Research 2000, 17, 991-998.
6. Tomalia D. A., Aldrichimia Acta, 1993, 26, 91-92.



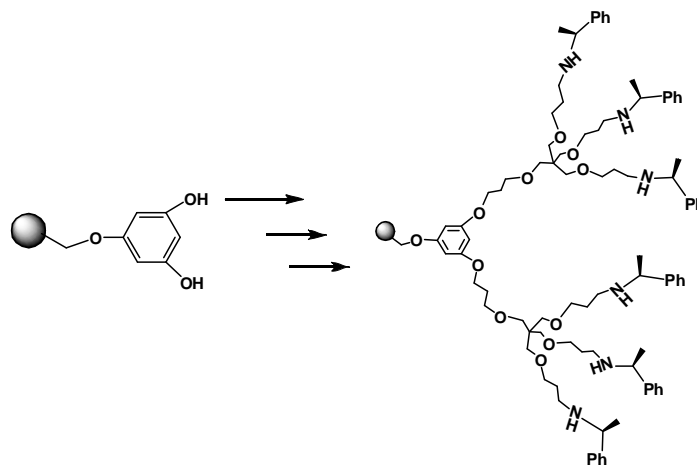
## **DENDRÍMEROS DERIVADOS DEL TRIHIDROXIBENCENO SOPORTADOS EN FASE SÓLIDA**

Berenice Vargas Coronel, Domingo Madrigal Peralta\*

*Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Blvd. Industrial s/n Tijuana, Baja California, México. madrigal@tectijuana.mx*

Los dendrímeros o moléculas en cascada son macromoléculas tridimensionales de construcción arborescente, se caracterizan por su peso molecular y arquitecturas bien definidas, en la mayoría de los casos se construyen por procedimientos iterativos<sup>1</sup>. La estructura de estos materiales ha tenido gran impacto en sus aplicaciones, que van desde catálisis hasta nanomedicina<sup>2</sup>. De una manera similar, en la última década se ha visto un rápido desarrollo en los procedimientos de síntesis en fase sólida y química combinatorial<sup>3</sup>. La síntesis orgánica en fase solida (SOFS) nos permite preparar fácilmente una gran cantidad de bibliotecas de compuestos orgánicos. El método de división y mezcla nos permite construir grandes bibliotecas químicas en una esfera de resina millones de compuestos son producidos rápidamente. Este método es aun más poderoso por el hecho que una sola esfera puede ser un microreactor en el que se lleve a cabo la producción de compuestos, desgraciadamente, el potencial de este método no ha sido completamente aprovechado por dos razones principales: la pequeña cantidad de compuesto que se une en una sola esfera, y la necesidad para una codificación estratégica del tiempo consumido para el análisis e identificación de los compuestos activos<sup>4</sup>.

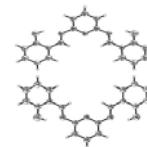
En este trabajo se presentan los resultados de la síntesis de dendrímeros de segunda generación con grupos hidroxilo, mesilo, tosilo, bromo y (*S*)-feniletamina derivados del trihidroxibenceno soportados en fase sólida, utilizando como soporte a la resina de Merrifield. (Figura 1) Los productos fueron caracterizados por IR y Espectroscopia de fluorescencia. Los dendrimeros preparados en fase sólida fueron comparados con análogos preparados en solución.



**Figura 1.** Síntesis de dendrímeros derivados del trihidroxibenceno.

### Referencias

1. Lebreton, S.; Monaghan, S.; Bradley, M.; *Aldrichimica Acta*, 2001, 34, 75-102.
2. Wolinsky, J.B.; Grinstaff M.W.; *Advanced Drug Delivery Reviews*, 2008, 60, 1037–1055.
3. Lam, K.S.; Lebl, M.; Krchnák, V.; *Chem. Rev.*, 1997, 97,411-448. Thompson, L.A.; Ellman, J.A.; *Chem. Rev.*, 1996, 96, 555-600.
4. Cho, J. K; Kim D-W; Namgung, J; Lee Y-S.; *Tetrahedron Letters*, 2001, 47, 443–7445.



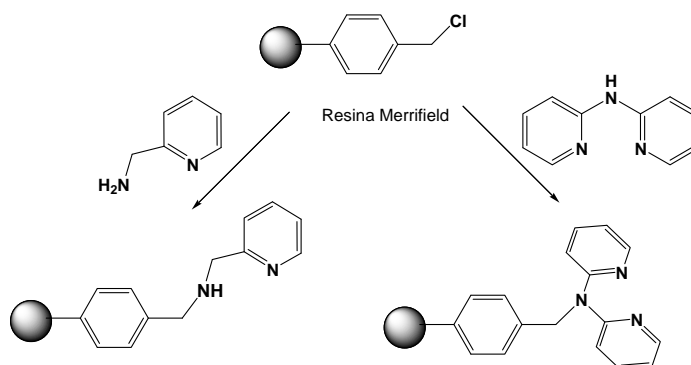
## **SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE LIGANTES SOPORTADOS EN FASE SÓLIDA PARA LA PREPARACIÓN DE AGENTES REDUCTORES**

Adrián Félix Ibarra, Judas Tadeo Vargas Durazo y Juan Carlos Gálvez Ruiz\*

*Depto. de Ciencias Químico Biológicas, Universidad de Sonora. Blvd. Luis Encinas y Rosales S/N col. Centro, C. P. 83000, Hermosillo, Son.  
email: anisolborano@guayacan.uson.mx*

La reducción de compuestos carbonílicos a los alcoholes correspondientes es una transformación muy importante tanto a nivel industrial como en el laboratorio<sup>1</sup>. Sin embargo, el problema de la selectividad en las reacciones de reducción está siempre presente. En este sentido, se han logrado buenos resultados al modificar químicamente los agentes reductores tradicionales, tales como los tetrahidboratos de metales alcalinos<sup>2</sup>. Aquí se ha visto que el uso de ligantes bidentados favorece la estabilidad y facilidad de manejo de los complejos formados, sin embargo, el uso de estos ligantes hace necesario que se empleen ciertos métodos de purificación para removerlo cuando estos complejos se emplean en las reacciones de reducción.

Con la finalidad de obtener complejos reductores que sean fáciles de preparar, selectivos y que sean amigables con el medio ambiente, al poder ser reutilizados y no involucrar el empleo de reactivos peligrosos, en este trabajo hemos iniciado con la fijación de aminas aromáticas bidentadas tales como 1,2-fenilendiamina, 2-picolilamina y 2,2-dipiridilamina a resinas del tipo Merrifield y Wang, esquema 1. La fijación de estas aminas se denota por un cambio en el aspecto y color de las resinas, siendo la resina Merrifield la que da mejores rendimientos. Además, estos derivados han sido caracterizados mediante las técnicas de Infrarrojo y Fluorescencia, en donde se ha podido constatar el efecto de la amina en las propiedades de las resinas. Posteriormente estos ligantes serán empleados en la preparación de complejos reductores derivados de tetrahidboratos alcalinos.

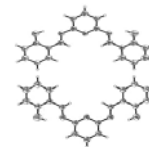


**Esquema 1.** Fijación de las aminas aromáticas bidentadas a la resina Merrifield.

### Referencias

1. Fang, S.; Lin, H.; Ji, N.; Yong, C.; He-Yong, H.; Kang, F.; *Chem. Commun.*, 2008, 3531-3533 y referencias ahí citadas.
2. Zeynizadeh, B.; *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 2003, 76, 317.





## ACTIVIDAD CATALÍTICA DE LOS SISTEMAS Cu:Zn/MORDENITA EN LA REACCIÓN DE REDUCCIÓN DE NO<sub>x</sub>

Viridiana Evangelista H.,<sup>1\*</sup> Vitalii Petranovskii,<sup>2\*</sup> Inocente Rodríguez Iznaga,<sup>3</sup>  
Andrey Simakov,<sup>2</sup> Felipe Castellón Barraza.<sup>2</sup>

(1) Posgrado en Física de Materiales. CICESE. Ensenada, B. C. 22888, México.

E mail: vevangel@cryn.unam.mx.

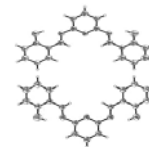
(2) Centro de Nanociencias y Nanotecnología-UNAM. Ensenada, B. C. 22888, México.

E mail: vitalii@cryn.unam.mx.

(3) Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE). Universidad de La Habana.  
La Habana, Cuba

La actividad de los catalizadores zeolíticos para la reducción de NO<sub>x</sub> depende de varios factores como son estructura y relación Si/Al de la zeolita, tipo y contenido de cationes de compensación, así como las propiedades redox de estos cationes<sup>1</sup>. Recientemente han sido estudiados sistemas bimetalicos en los cuales se observó que la conversión de NO es mayor a la mostrada en sistemas monometalicos; este efecto ha sido asociado a la sinergia entre los metales<sup>2</sup>.

En el presente trabajo se reporta un estudio sobre la actividad catalítica de sistemas bimetalicos Cu:Zn/Mordenitas, preparados mediante procesos de intercambio iónico en disolución acuosa de iones de estos metales. El trabajo particulariza en la influencia del orden de intercambio y las relaciones de volúmenes de las disoluciones intercambiadoras en la actividad catalítica de estos sistemas en la reacción de reducción de óxidos de nitrógeno en presencia de oxígeno, CO y propeno. Se trabajó con mordenitas sintéticas con relación Si/Al = 13. La incorporación de cobre y cinc se realizó mediante procesos de intercambio iónico aplicados en forma consecutiva o por mezcla con disoluciones de cationes Zn<sup>2+</sup> y Cu<sup>2+</sup>, obteniéndose mordenitas con diferentes relaciones Cu:Zn. Se realizaron pruebas de reducción con temperatura programada (TPR) y seguimiento de los estados de oxidación de los metales con UV-Vis in-situ a diferentes temperaturas y con flujo de hidrógeno. Unido a esto fueron desarrollados estudios de DRX.

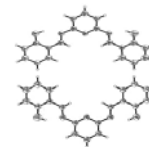


Los resultados muestran que la presencia de  $Zn^{2+}$  afecta la ubicación de  $Cu^{2+}$  en sus posiciones más estables y su interacción con el enrejado de esta zeolita, modificando la actividad catalítica de estos sistemas bimetálicos, la cual incrementa con el contenido de cobre. El uso de diferentes relaciones de volúmenes de disoluciones intercambiadoras de los cationes contribuye a variar el contenido de cobre en estos sistemas, variando así su actividad catalítica. El comportamiento de esta actividad catalítica sugiere que existen diferentes sitios activos para la catálisis, siendo asociada su mayor actividad (conversión a menores temperaturas) a la presencia de cúmulos de iones de cobre. La mayor actividad catalítica de estos sistemas bimetálicos corresponde a aquellos en que el cinc fue incorporado primero que el cobre.

Agradecimientos. Los autores agradecen a E. Flores, I. Gradilla, E. Aparicio, M. Vega, T. Kretzchmar, T. Zepeda, S. Gómez, A. Hernández y M. A. Estrada, por su colaboración para la realización de este trabajo. Este trabajo esta soportado por los proyectos UNAM- PAPIIT IN110608, IN110208-3 y CONACYT 50547-Q.

## References

1. Gómez-García, M. A.; Pitchon, V.; Kiennemann, A.; Environment Intern. 2005, 31, 445.
2. Pieterse, J. A. Z.; Mul, G.; Melian-Cabrera, I.; Brink, R. W.; Catal. Lett. 2005, 99, 41.



## N-HETEROCYCLIC CARBENES WITH FUNCTIONAL LIGANDS FOR THE OPPENAUER-TYPE OXIDATION OF ALCOHOLS

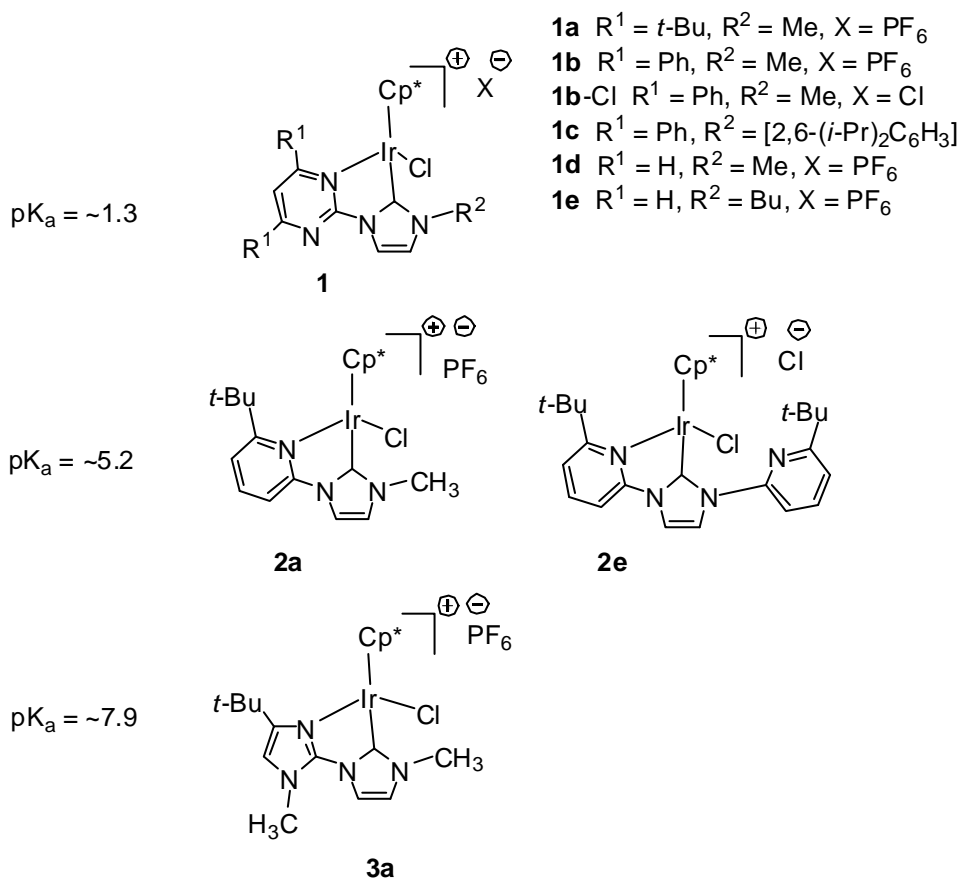
Zephen Specht<sup>1\*</sup>, Daniel A. Lev<sup>1</sup>, Hai Tran<sup>1</sup>, Sara Cortes<sup>1</sup>, Khing Rancudo<sup>1</sup>, Christoff van Niekerk<sup>1</sup>, Douglas B. Grotjahn<sup>1</sup>, Arnold Rheingold<sup>2</sup>, Curtis Moore<sup>2</sup>, Antonio G. DiPasquale<sup>2</sup>.

(1) Department of Chemistry and Biochemistry, San Diego State University - 5000 Campanile Dr., San Diego, CA, 92182. Email: grotjahn@sciences.sdsu.edu

(2) Department of Chemistry and Biochemistry, University of California - 9500 Gilman Drive, M/C 0358 La Jolla, CA 92093-0358

Recently, the idea of creating a pendant base on an NHC ligand utilizing a potentially labile nitrogen atom has been reported.<sup>1</sup> Thus, complex **1e** was reported in early 2009, but no specific evidence for the role of the pyrimidine nitrogens in catalysis (other than metal-nitrogen coordination) was observed. Therefore, we hypothesized that in order to fully realize the potential of NHC ligands with pendant heterocyclic bases their ability to chelate with a metal must be decreased. This paper explores successful steric destabilization of chelates related to **1e**, which allows the basic nitrogen to enhance catalysis in Oppenauer-type oxidation of alcohols. Indeed, increasing the steric bulk around the potentially coordinating nitrogen atom results in dramatic lengthening of the metal-nitrogen bond as revealed by X-ray crystallography and dynamic NMR behavior of **1a**.

Because protonated pyrimidine, pyridine, and 1-methyl imidazole have pK<sub>a</sub> values of 1.3, 5.2, and 7.9,<sup>2-4</sup> and the related pendant bases could be expected to have very different coordination and catalytic properties, we also explore the effects of basicity of the coordinated nitrogen by synthesizing a series of varying (heteroaryl)NHC ligands and complexes. Although a few iridium (heteroaryl)NHC ligand catalysts<sup>1,5</sup> have been reported in recent years, none of these feature sterically hindered pendant bases such as the ones reported here. Moreover, the (imidazol-2-yl)NHC derivatives reported here are the first of this new ligand and complex class.



## References

1. Gnanamgari, D.; Sauer, E. L. O.; Schley, N. D.; Butler, C.; Incarvito, C. D.; Crabtree R.; H. *Organometallics* 2009, 28, 321.
2. Smith, D. L; Elving, P. J. *J. Am. Chem. Soc.*, 1962, 84, 2741.
3. Krygowski, T. M.; Szatyowicz, H.; Zachara, J. E. *Journal of Org. Chem.* 2005, 70, 8859.
4. Martin, R. *Science*, 1963, 139, 1198.
5. Gründemann, S.; Kovacevic, A.; Albrecht, M.; Faller, J. W.; Crabtree, R. H. *J. Am. Chem. Soc.*, 2002, 124, 10473.

## EXPLORACION DE NUEVAS RUTAS DE SÍNTESIS DEL 1,8-DIBROMOBIFENILENO”

Felipe Antonio Servín-Nájera,<sup>1</sup> Gerardo Aguirre Hernández,<sup>1\*</sup> Ratnasamy Somanathan,<sup>1</sup>  
Gabriel Alonso Núñez.<sup>2</sup>

(1) Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22000, México. E mail: fa\_servin@yahoo.com.

(2) Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México. Apdo. Postal 356. Ensenada, B. C. 22800, México.

Dentro de las interacciones intramoleculares e intermoleculares (interacciones no-covalentes) las moléculas aromáticas tienen un papel muy importante con las interacciones de tipo  $\pi$ - $\pi$ . Éstas son la clave del reconocimiento en muchos procesos químicos y biológicos. Su comprensión es esencial para el diseño racional de fármacos y la optimización de la química medicinal<sup>1</sup>, así como en el diseño de nuevos materiales. Para este tipo de estudios se han desarrollado varios modelos de entre los cuales resalta el modelo tipo 1,8-diarilbifenileno, en cual tiene una distancia óptima para el estudio de estas interacciones  $\pi$ - $\pi$ <sup>2</sup> figura <sup>1</sup>.

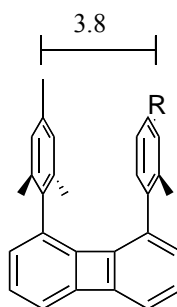


Figura 1 modelo tipo 1,8-diarilbifenileno.

Para la síntesis de este producto primeramente se hizo un análisis retro-sintético, en donde se requiere como fragmento base el 1,8-dibrobifenileno, fragmento el cual ha presentado un reto para su síntesis, una de las primeras rutas para la síntesis de este fragmento es la mostrada en la figura 2<sup>3</sup>.

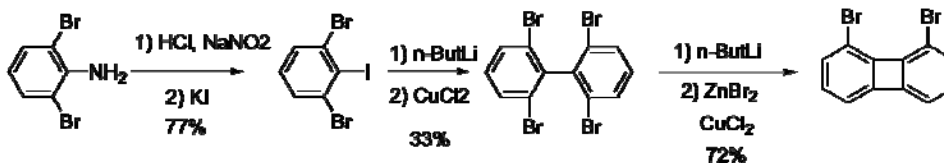


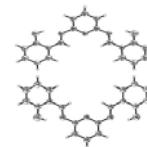
Figura 2. Esquema sintético del compuesto 1,8-dibromobifenileno.

Sin embargo, mediante esta ruta se obtiene un rendimiento muy bajo 18%.

Por lo tanto en este trabajo se pretende presentar los últimos avances en la síntesis de este tipo de estructuras de entre los cuales tenemos el uso de nano-partículas de  $\text{CuCl}_2$  y  $\text{ZnBr}_2$ , reactivos de Grignard, acoplamientos de Suzuki, acoplamiento de Stille, ciclo adición de [2+2] del bromuro de bencina.

## References

1. Meyer E. A., Castellano R. K., Diederich F. *Angew, chem. Int*, 2003, 11, 42.
2. Cozzi, F.; Annunziata R.; Benaglia, M.; Baldrigg, K.; Aguirre, G.; Estrada, J.; Sritana-Anant, Y.; Siegel, J. S. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2008, 10, 2686-2694.
3. Iyoda, M.; Humayan Kabir, S. M.; Vorasingha, A.; Kuwatani Y.; Yoshida, M. *Tetrahedrom Letters* 1998, 39, 5393-5396.



## SÍNTESIS Y ESTUDIOS DE EMPAQUETAMIENTO DE 1,3-DIBROMO-5-NITROBENCENO-2-SUSTITUIDOS

Alfonso Romero-Gándara,<sup>1</sup> Gerardo Aguirre,<sup>1\*</sup> Sylvain Bernès<sup>2</sup> and Ratnasamy Somanathan.<sup>1</sup>

(1) Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22000, México. E mail: mparra@tectijuana.mx.

(2) DEP, Facultad de Ciencias Químicas, UANL, Guerrero y progreso S/N, Col. Treviño, 64570, Monterrey N.L. México.

Las interacciones intermoleculares e intramoleculares (no-covalentes) son de especial importancia en química, principalmente debido a que estas interacciones son responsables de las propiedades biológicas de un gran número de moléculas tales como las proteínas el ADN entre otras. Estas interacciones no-covalentes se pueden dividir en dos grandes clases: Las más fuertes son de origen electrostático (Coulómbicas) y las fuerzas de Van del Waals estas últimas también conocidas como interacciones débiles<sup>1</sup> que comprenden el enlace de hidrogeno, apilamientos  $\pi - \pi$ , interacciones halógeno-halógeno etc. Particular las interacciones Br--Br son recientemente de mucho interés debido a sus posibles aplicaciones en el diseño de nuevos materiales usando como herramienta las técnicas de la ingeniería de cristal<sup>2-5</sup>. Estas interacciones se ha encontrado en anillos aromáticos dialogenados con cadenas laterales polares resultando con alta actividad como medicamentos contra la anemia falciforme<sup>6</sup>. También este tipo de interacciones particularmente la de cloro-cloro se han utilizado para preparar polímeros orgánicos altamente estereo regulados<sup>7</sup>.

En este trabajo primeramente se sintetizaron los compuestos halogenados vía la síntesis de Sandmeyer, partiendo de la 2,6-dibromo-5-nitro anilina (figura 1). Una vez sintetizados los productos fueron cristalizados por evaporación lenta o bien por difusión, obteniéndose en todos los casos cristales de buena calidad los cuales fueron analizados por difracción de rayos X de monocristal, donde se puede observar las interacciones Br---Br (Figura 2)

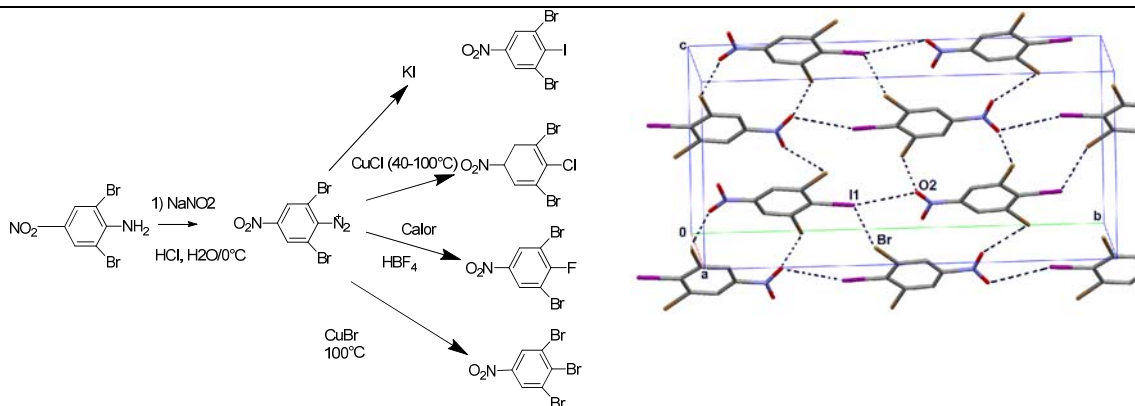


Figura 1 Síntesis de derivados de 1,3 dibromobenceno-5-nitro-2-sustituídos

Figura 2 Empaquetamiento de 1,3 dibromo-5-nitro-2-yodo benceno.

## References

1. G. R. Desiraju, *Nature.*, 412, 397 –400; 2001
2. M. O. Sinnokrot, D. C. Sherrill, *J. Am. Chem. Soc.* 126, 7690 – 7697, 2004
3. M. O. Sinnokrot, D. C. Sherrill, *J. Phys. Chem.* 107, 8377 –8379, 2003
4. M. O. Sinnokrot, E. F. Valeev, D. C. Sherrill, *J. Am. Chem. Soc.*,124, 10 887 –10 893, 2002
5. C. A. Hunter, K. M. Sanders, *J. Am. Chem. Soc.*, 112, 5525 – 5534,1990.
6. N.Ramasubbu, R.Parthasarathy, and Peter Murray-Rust, *J.Am.Chem.Soc.*, 108, 4308-4314, 1986
7. A. Matsumoto, T.Tanaka, T. Tsubouchi, K. Tashiro, S. Saragai, Sh. Nakamoto, *J. Am. Chem. Soc.*, 124, 8891 – 8902, 2002



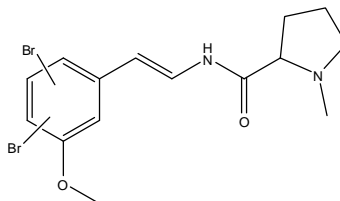
## SÍNTESIS Y ESTUDIOS DE ACOPLAMIENTOS DE LARGO ALCANCE POR RMN Y DIFRACCIÓN DE RAYOS X DE ISÓMEROS BROMADOS DEL 3-HIDROXIBENZALDEHÍDO

Yadira D. Cerda Sumbarda<sup>1</sup>, Lizbeth A. Manzanares Guevara<sup>1</sup>, Oscar F. Narváez Garayzar<sup>2</sup>, Gerardo Aguirre<sup>2\*</sup>, Ratnasamy Somanathan<sup>2</sup>

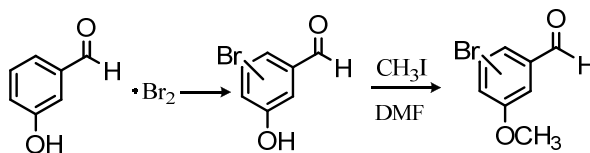
(1) Ingeniería en Nanotecnología, Instituto Tecnológico de Tijuana, Blvd. Industrial, s/n, Mesa de Otay, Tijuana B.C., C.P. 22500, México.

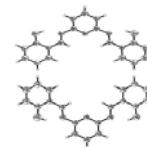
(2) Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C., C.P. 22500, México.

Nuestro laboratorio tiene ya años de experiencia en la síntesis de productos naturales particularmente se trabaja en el desarrollo de nuevas rutas de preparación de enamidas estos compuestos se encuentran ampliamente distribuidos en la naturaleza desde organismo marinos, bacterias y en plantas altamente desarrolladas<sup>1</sup>. Últimamente se ha trabajado en la preparación de amatamidas (enamidas con anillo aromático bromado y un fragmento de prolina)<sup>2</sup>, con el objetivo de analizar sus propiedades biológicas<sup>3</sup>.



El análisis retrosintético nos muestra que se requiere como material de partida el 3-hidroxibenzaldehído, el cual fue bromado en diferentes condiciones y posteriormente metilado, obteniéndose los diferentes isómeros bromados derivados del 3-metoxibenzaldehído.

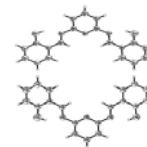




Una vez obtenidos estos productos fueron caracterizados por espectroscopía de IR y RMN, observándose en algunos de estos compuestos un acoplamiento de largo alcance, además fue posible tener cristales de buena calidad los cuales fueron analizados por difracción de rayos X de Monocristal. En este trabajo se presentaran los resultados y conclusiones de la síntesis así como el estudio del efecto de largo alcance presentado por algunos isómeros bromados del 3-hidroxi y metoxi benzaldehído.

### Referencias

1. Somanathan, R.; Rivero, I. A.; Aguirre, G.; Ramirez, M.; Hellberg L. H.; Bakir, F.; *Synthetic Communications*, 1996, 26, 1023
2. Ramírez, M.; Aguirre, G.; Ratnasamy S.; Molins, E.; *Tetrahedron: Asymmetry*, 2002, 13, 2261-2266
3. Ramírez, M.; Chávez, D.; Hernández, L.; Molins, E.; Ratnasamy S.; Aguirre, G.; *Molecules*, 2005, 10, 295-301



## CUANTIFICACIÓN DE FASES MINERALES DE UN GNEIS PRECÁMBRICO MEDIANTE DIFRACCIÓN DE RAYOS-X CON MUESTRA POLICRISTALINA

Milton Mendoza-Espinosa<sup>1</sup>, Màrius Ramírez-Cardona<sup>1\*</sup>, Francisco J. Espinoza-Beltran<sup>2</sup>,  
Martín Adelaido Hernández-Landaverde<sup>2</sup>, Kinardo Flores-Castro<sup>1</sup>

(1) *Centro de Investigaciones en Ciencias de la Tierra y Materiales, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo. Carretera Pachuca-Tulancingo km 4.5, 42184, Mineral de la Reforma, Hidalgo, México.*

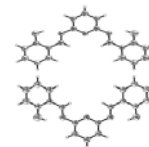
(2) *Centro de Investigaciones y Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, Libr. Norponiente 2000, Fracc. Real de Juriquilla, 76230, Querétaro, Qro., México*

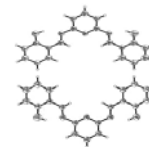
El Gneis Huiznopala pertenece a exposiciones del precámbrico situado al NNE del Estado de Hidalgo (México) y tiene una edad aproximada entre 1200-950 millones de años. Esta roca se origina por la formación del Supercontinente Rodinia durante la orogenia Greenvilliana (1000 m.a.). Hasta la actualidad, esta roca ha sufrido diversas etapas de cristalización y alteración mineralógica: geológicamente, dos episodios compresivos y dos extensivos acompañados de reemplazamiento mineral por acción de fases fluidas. La riqueza mineral de la roca ha sido identificada y cuantificada mediante técnicas petrográficas (microscopía de luz transmitida), análisis químicos de roca total (INNA y FUS-ICP) y difracción de rayos-X con muestra policristalina.

Mediante esta última técnica se identificaron diversas fases minerales correspondientes al grupo de los piroxenos  $-(Ca, Na) (Mg, Fe, Al, Ti) (Si, Al)_2O_6-$ , carbonatos  $-(Ca, Mg) CO_3-$ , plagioclasas  $-(Ca, Na) Al Si_3O_8-$ , feldespatos potásicos  $-(K, Na) Al Si_3O_8-$ , aluminosilicatos  $-Al_2SiO_5-$ , amfíboles  $-(Fe, Mg, Ca) OH_2(Si, Al)_8O_{22}-$ , óxidos de Fe y Ti  $-Fe_2O_3, FeTiO_3, TiO_2-$ , sulfuros, hidróxidos de Mg, filosilicatos  $-KAl_2(AlSi_3O_{10})(OH)_2, K (Mg, Fe)_3(AlSi_3O_{10})(OH)_2, (Fe^{2+}, Mg, Fe^{3+}, Al)_6(AlSi_3O_{10}) (OH, O)_8-$  y al grupo del granate  $(Al, Fe^{3+}, Cr)_2(Mg, Fe^{2+}, Mn, Ca)_3Si_4O_{12}$ . La cuantificación de las mismas se realizó mediante refinamientos de perfil considerando la estructura cristalina (método de Rietveld) en cinco muestras de roca y corroboró las etapas antes mencionadas.



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.





## DIPASQUALECUANTIFICACIÓN DE SILICIUROS ( $Fe_MSi_N$ ) EN ESFERULITAS INTERMETÁLICAS EMBEBIDAS EN UN VIDRIO FULGURÍTICO

Màrius Ramírez-Cardona,<sup>1</sup> Martín A. Hernández-Landaverde,<sup>2</sup> Francisco J. Espinoza-Beltran,<sup>2</sup> Milton Mendoza-Espinosa,<sup>1</sup> Kinardo Flores-Castro.<sup>1</sup>

(1) *Centro de Investigaciones en Ciencias de la Tierra y Materiales. Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo. Carretera Pachuca-Tulancingo km 4.5. Col. Carboneras. Mineral de la Reforma, Hgo. México. E-mail: mariusr@uaeh.edu.mx*

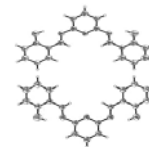
(2) *Centro de Investigaciones y Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, Libr. Norponiente 2000, Fracc. Real de Juriquilla, 76230, Querétaro, Qro., México.*

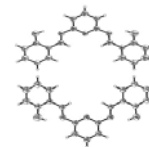
Las fulguritas son un tipo de roca que presenta productos de fusión originados por la descarga eléctrica de rayos en la superficie terrestre o, en su caso, en la de otros planetas con dinámica atmosférica. Los vidrios producto de la solidificación del fluido que ha alcanzado muy altas temperaturas (se estima un máximo de 30,000 K – condiciones de nebulosa solar) pueden albergar algunos cristales de compuestos intermetálicos muy exóticos en la litosfera.

Este trabajo presenta la caracterización de una nanofase (esferulita de unos 2 mm de diámetro) encontrada (y seleccionada entre otras) en un vidrio fulgurítico de la Fulgurita del Rosario, en Hidalgo (fusión reportada en Mayo de 1995). Estas nanofases están asociadas a las vesículas originadas por la evaporación de fluidos del terreno original (mayoritariamente agua). Se determinó, mediante difracción de rayos-X con muestra policristalina, la existencia de toda la serie cristalina (para condiciones prácticamente isotérmicas) del sistema Fe-Si: Suessita ( $Fe_3Si$ ), Fersilicita ( $FeSi$ ), dos polimorfos de Ferdisilicita ( $FeSi_2$ ), Fe y Si metálico, como fases mayoritarias. El trabajo propone la ocurrencia de estas fases como excepcionales geotermómetros en ambientes en desequilibrio termodinámico (solidificación rápida de fluidos) y asocia su cristalización a las condiciones ultrareductoras en áreas milimétricas y micrométricas dentro del vidrio.



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.





## **SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND DYNAMICS OF STERICALLY HINDERED PYRIMIDYL NHC IRIIDIUM AND RHODIUM COMPLEXES**

Christoff van Niekerk<sup>1\*</sup>, Zephen Specht<sup>1</sup>, Sara Cortes<sup>1</sup>, Douglas B. Grotjahn<sup>1</sup>, Arnold Rheingold<sup>2</sup>, Curtis Moore<sup>2</sup>, James Golen<sup>2</sup>

(1) *Department of Chemistry and Biochemistry, San Diego State University - 5000 Campanile Dr., San Diego, CA, 92182. Email: grotjahn@sciences.sdsu.edu*

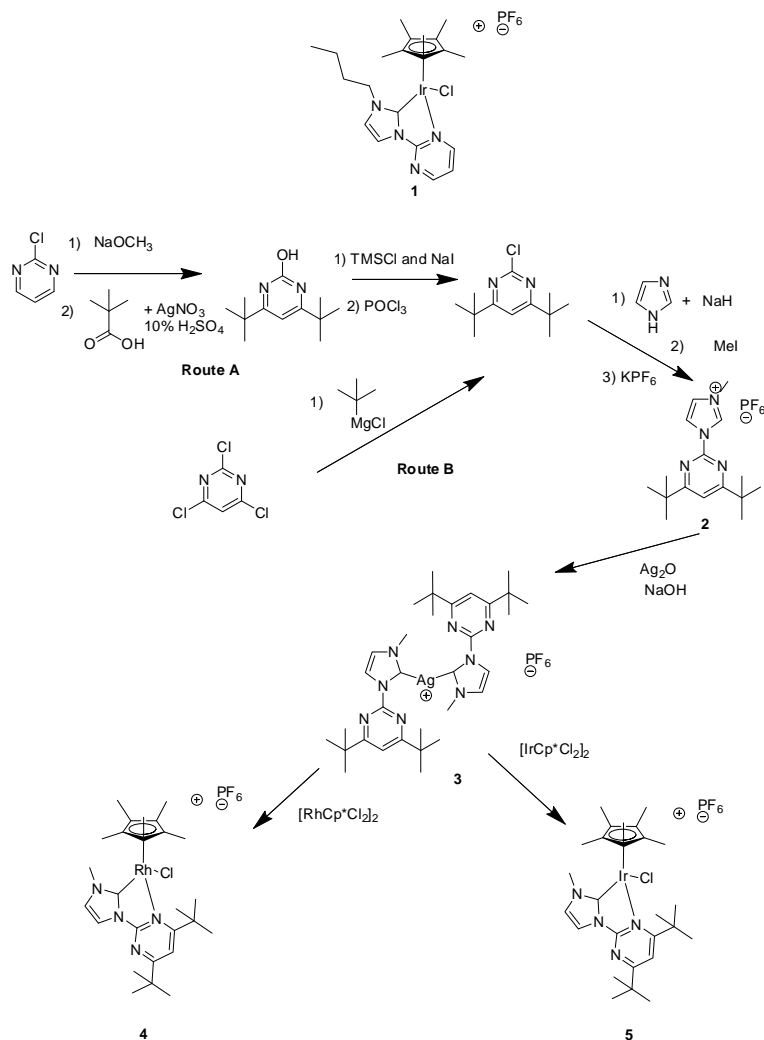
(2) *Department of Chemistry and Biochemistry, University of California - 9500 Gilman Drive, M/C 0358 La Jolla, CA 92093-0358*

Recent literature reported 1<sup>1</sup>. In order for the pyrimidyl N to act as a pendant base the activation energy for the dissociation of the nitrogen from the metal should be low. Sharp proton NMR peaks on carbons 4 and 6 however were reported even at 100°C. To weaken the nitrogen-metal bond we synthesized a more sterically hindered pyrimidine ligand.

The first attempt to create this pyrimidine (Route A) relied on the formation of a t-butyl radical<sup>2</sup> however the procedure required many steps and the yield was low. New literature<sup>3</sup> made the synthesis easier (Route B) through a Grignard reaction. After three more steps the complete imidazolium ligand was produced.

3 was then created by adding silver (II) oxide in a basic solution after which a transmetallation<sup>4</sup> reaction was performed.

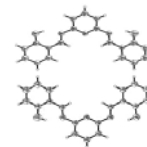
In addition to the synthesis of 3 and 4 this poster will talk about the dynamics of the ring flipping such as determined through dynamic NMR simulations<sup>5</sup> which was acquired through variable temperature NMR. The weakening of the chelate due to sterics is also clearly visible through crystal structures.



## References

1. Gnanamgari, D.; Sauer, E. L. O.; Schley, N. D.; Butler, C.; Incarvito, C. D.; Crabtree R.; H. *Organometallics* 2009, 28, 321
2. Perkins, J.C.S. 1976, 11, 1204
3. Hintermann, L. Xiao, L.; Labonne, A.; *Angewante Chemie*, 2008, 20, 8370 - 8374.
4. Harrison M.; Wang, J.; J. I.; Lin, B.; *Organometallics*, 1998, 17, 972-975
5. Sandström, J.; Academic Press, New York, 1982





## ESTUDIO COMPARATIVO DE ESTRUCTURAS CRISTALINAS PARA EL NITRURO DE RUTENIO USANDO DFT

Carlos Maldonado Mendoza<sup>1\*</sup> y María G. Moreno Armenta<sup>2</sup>

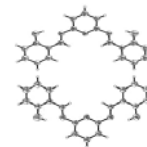
(1) Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Km. 107 carretera Tijuana-Ensenada, Ensenada, B. C., México. E mail: ccruz@cryn.unam.mx.

(2) Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM. Apdo. Postal 356. Ensenada, B. C., C.P. 22800, México.

Los nitruros de los elementos de transición presentan propiedades que los hacen tecnológicamente importantes por sus variadas aplicaciones<sup>1-4</sup>. Se tienen nitruros que han dado excelentes resultados en catálisis, industria electrónica y en la fabricación de herramientas y dispositivos de alta resistencia al desgaste. Además, algunos nitruros como el nitruro de rutenio, se consideraban no sintetizables. Recientemente sin embargo se logró<sup>5</sup> la síntesis de este compuesto. Esto requiere se revisen los supuestos teóricos aceptados para estos compuestos.

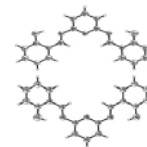
El objetivo de este trabajo es realizar un análisis, en el área de química computacional, que permita seleccionar la estructura más probable para el nitruro de rutenio. Los cálculos se basan en la Teoría del Funcional de la Densidad utilizando el método FP-LAPW + Lo en su implementación en el paquete WIEN2k<sup>6</sup>. Se calcula el volumen de celda unitaria de energía mínima, la densidad electrónica de estados y la estabilidad mecánica para el nitruro de rutenio con estructuras: tipos CdF<sub>2</sub> (225), PtP<sub>2</sub> (205), PtP<sub>2</sub> (198), RuP<sub>2</sub> (58) y PdF<sub>2</sub> (136). La estabilidad mecánica correspondiente a cada una de estas estructuras se determina calculando las constantes elásticas asociadas al tensor de deformación y verificando que estas constantes satisfagan las condiciones propias de cada estructura.

Agradecimientos. El trabajo realizado fue apoyado por los proyectos DGAPA-UNAM IN108908, CONACYT 89768.y al Centro de Supercomputo DGSCA-UNAM. Agradecemos a Eloisa Aparicio, Juan Peralta, Margot Saiz y Carlos González por su apoyo técnico.



## References

1. M. W. Barsoum, *Prog. Solid State Chem.* 28, 201, 201 (2000).
2. J.S.Chun, I. Petrov, and J.E. Greene, *J. Appl. Phys.* 86, 3633 (1999).
3. A.E. Kaloyeros and E. Eisenbraun, *Annu. Rev. Mater. Sci.* 30, 363 (2000).
4. S.H. Jhi, J. Ihm, S.G. Louie, and M.L. Cohen, *Nature (London)* 399, 132 (1999).
5. M.G. Moreno-Armenta et al, Síntesis of cubic ruthenium nitride by reactive pulsed laser ablation. *J. of Physic and Chemistry of Solids*, 68 (2007) 1989-1994.
6. P. Blaha, K.Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka, and L. Luitz, *WIEN2k An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties* (Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria, 2001), ISBN 3-9501031-1-2.



## ESTUDIO DE LAS CARACTERÍSTICAS ESTRUCTURALES Y ELECTRÓNICAS DEL NITRURO DE ZINC

Fabian Herrera Rodríguez,<sup>1\*</sup> Juan M. Quintana,<sup>1</sup> y María G. Moreno Armenta<sup>2</sup>

- (1) *Universidad Autónoma de Baja California, Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería. Tijuana, B.C. México. Email: fabianherrera117@hotmail.com*  
(2) *Universidad Nacional Autónoma de México Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Apartado Postal 354, Ensenada B.C. México.*

Los compuestos del zinc son muy investigados, debido a sus significativas propiedades. El óxido de zinc (ZnO), es un semiconductor con banda prohibida directa de alrededor de 3.2 eV,<sup>1</sup> ha recibido la atención durante mucho tiempo por sus aplicaciones: como dispositivos ópticos, sensores de gas, electrodos conductores transparentes, dispositivos optoelectrónicos con emisión en el intervalo de longitudes de onda cortas y ventanas ópticas, usadas en celdas solares. Actualmente la investigación del nitruro de zinc (Zn<sub>3</sub>N<sub>2</sub>) se ha incrementado motivado por aplicaciones potenciales en la ingeniería de dispositivos.<sup>2</sup>

Por ejemplo los nanoalambres de Zn<sub>3</sub>N<sub>2</sub> presentan emisión en el azul.<sup>3</sup> Este compuesto puede ser oxidado para obtener oxinitruros de zinc con lo cual se puede modificar la banda prohibida de ambos compuestos (ZnO y Zn<sub>3</sub>N<sub>2</sub>) obteniendo nuevas propiedades.

En este trabajo se realizaron cálculos ab initio para el volumen, la energía total y las propiedades estructurales y electrónicas del compuesto: Zn<sub>3</sub>N<sub>2</sub>, como una variante del mismo se realizaron los mismos cálculos para los compuestos Oxinitruro de Zinc (Zn<sub>6</sub>N<sub>3</sub>O<sub>1</sub>) y (Zn<sub>3</sub>NO).

Como primera parte se estudió el compuesto  $Zn_3N_2$ , del cual ya existen trabajos reportados.<sup>4,5</sup> Posteriormente el trabajo está enfocado a estudiar los cambios electrónicos que ocurren en la red del Nitruro de Zinc al ir incorporando el oxígeno. Se estudiaron sus propiedades electrónicas, esto es con la finalidad de analizar los cambios que ocurren en el sistema conforme se sustituyen oxígenos por nitrógenos ( $Zn_6N_3O_1$ ) y ( $Zn_3NO$ ).

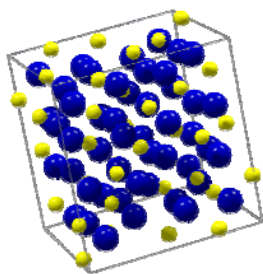


Fig.1 Nitruro de zinc

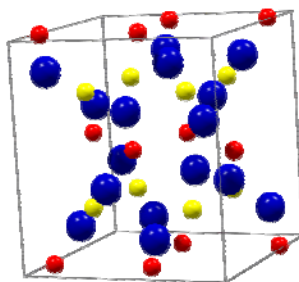
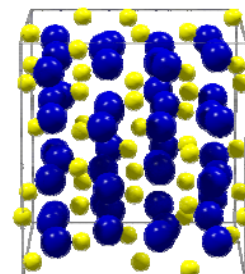
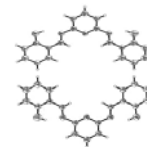
Fig. 2 Oxinitruro de Zinc ( $Zn_3NO$ )

Fig. 3 Nitruro de Zinc

Agradecimientos. El trabajo realizado fue apoyado por los proyectos DGAPA-UNAM IN108908, CONACYT 89768.y el Centro de Supercomputo DGSCA-UNAM. Agradecemos a Eloisa Aparicio, Juan Peralta, Margot Saiz y Carlos González por su apoyo técnico.

## References

1. Xin-Li GUO, Jae-Hyoung CHOI, Hitoshi TABATA and Tomoji KAWAI, Jpn. J. Appl. Phys., 2001, 40, L177-L180.
2. Futsuhara M., Yoshioka K., Takai O., Thin Solid Film, 1998, 322, 274–281.
3. Zong F., Ma H., J. Ma, Du W., Zhang X., Xiao H., Ji F., Xue C., Appl. Phys. Lett., 2005, 87, 233104.
4. Long R., Dai Y., Yu L., Huang B., Han S. Thin Solid Films, 2008, 516, 1297-1301.
5. Run Long, Ying Dai, Lin Yu, Meng Guo, and Baibiao Huang, J. Phys. Chem. B, 2007, 111 (13), 3379-3383.



## ALMACENAMIENTO DE HIDRÓGENO EN BOROHI-DRUROS DE METALES ALCALINOS

María Esther Sanchez-Castro,<sup>1</sup> y Mario Sanchez-Vazquez.<sup>2\*</sup>

(1) Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Unidad Saltillo, Carretera Saltillo-Monterrey. Km 13, Ramos Arizpe, Coahuila, México. Teléfono 8444389612.

E-mail: [esther.sanchez@cinvestav.edu.mx](mailto:esther.sanchez@cinvestav.edu.mx),

(2) Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C. Carretera Monterrey-Aeropuerto Km. 10, PIIT. Apodaca, NL 66600

Email: [mario.sanchez.vazquez@cimav.edu.mx](mailto:mario.sanchez.vazquez@cimav.edu.mx)

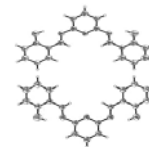
Recientemente el interés por encontrar nuevas fuentes de energía diferentes al combustible fósil ha ido en aumento. El hidrógeno tiene un potencial con respecto al petróleo, no contamina el medio ambiente ni produce gases invernadero. Sin embargo, encontrar materiales capaces de almacenar hidrógeno no es trivial, ya que se deben tomar en cuenta aspectos relacionados con el almacenamiento reversible del hidrógeno, con alta densidad gravimétrica y volumétrica, además de que éstos materiales puedan fácilmente ser manipulados a temperaturas y presiones moderadas.

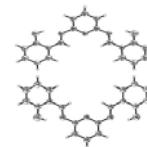
A fin de contribuir con la búsqueda de nuevos materiales, es de nuestro interés estudiar las estructuras del tipo MBH<sub>4</sub>. Estas estructuras tienen la característica de tener un átomo de boro y un metal M. El boro es de masa ligera y está unido a cuatro átomos de hidrógeno. El LiBH<sub>4</sub> por ejemplo ya se está utilizando como fuente de hidrógenos al disociar los enlaces B-H. Por otra parte, el átomo M es positivo y puede albergar en su esfera de coordinación hidrógeno molecular.

Nuestros estudios, utilizando métodos computacionales mp2/def2-TZVP, demuestran que este tipo de estructuras (MBH<sub>4</sub>) pueden coordinar en el átomo M de tres (cuando M = Li) hasta nueve moléculas de hidrógeno (cuando M = Cs). Las distancias entre el átomo M y las moléculas de hidrógeno van desde 2.21 a 3.65 Å. En el congreso se discutirá a detalle este estudio.



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.





## DESORPTION KINETICS OF D<sub>2</sub> FROM THE SATURATED MONODEUTERIDE PHASE OF SI (100) 2X1

Mark Kottke, Monica Neuburger, David Fee, Jennifer Beyer, David Pullman\*

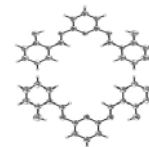
*Department of Chemistry and Biochemistry, San Diego State University, San Diego, CA  
92182-1030*

The recombinative desorption of H<sub>2</sub> from the monohydride phase of the Si(100)-2x1 surface is a seemingly simple reaction whose mechanism has been surprisingly difficult to pin down. The observations of first order desorption kinetics<sup>1</sup> and of an apparent violation of microscopic reversibility<sup>2</sup> inspired a wave of experimental and theoretical investigations over the past two decades. The underlying cause of these phenomena is a combination of the directional adsorbate–substrate bonding that is characteristic of gas-semiconductor interactions and of the substantial reconstruction of the Si(100) surface to form rows of buckled silicon dimers. In turn, the reconstruction not only imposes a non-random spatial distribution on the H adatoms but also leads to strong phonon-adsorbate coupling.

Most kinetics studies have focused on the low (<0.1 ML) and moderate (0.1 to 0.5 ML) coverage regimes, and have shown that as the H atom coverage rises above 0.1 monolayer, the desorption switches from 2nd to 1st order in the H atom coverage.<sup>1</sup>

Because the activation energy and angular distribution are virtually the same as in the 1st order, moderate coverage regime, we can rule out any possible contributions from dihydride desorption. The results will be discussed in terms of the 2H/3H/4H model.

In the present work, we use isothermal desorption measurements to show that as the coverage rises above ~0.8 monolayer, the desorption rapidly switches from an apparent order of 1 to an apparent order well above<sup>2</sup>. To understand this surprising result, we have carried out an Arrhenius analysis and conducted angular distribution measurements of the desorbing product. The data suggest that the anomalously high

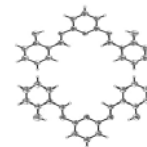


order is likely due to a decreasing activation energy for desorption as the coverage rises above 0.8 ML. The results will also be discussed in terms of the “2H/3H/4H” model for desorption of H<sub>2</sub> from the Si(100) surface. The experiments were performed in an ultrahigh vacuum apparatus having a doubly differentially pumped mass spectrometer and modulated detected flux. To boost the signal-to-noise ratio of the mass spectral measurements, deuterium was used instead of hydrogen.

### References

1. Sinniah, K.; Sherman, M.G.; Lewis, L.B.; Weinberg, W.H.; Yates, J. T.; Janda, Jr., and K.C.; *Phys. Rev. Lett.*, 1989, 62, 567; Wise, M.L.; Koehler, B.G.; Gupta, P.; Coon, P.A.; George, S.M.; *Surf. Sci.*, 1999, 258, 166; Höfer, U. L.; Heinz, Li, and T.F.; *Phys. Rev. B*, 1992, 45, 9485.
2. Kolasinski, K.W.; Nessler, W.; de Meijere, A.; Hasselbrink, E.; *Phys. Rev. Lett.*, 1994, 72, 1356.





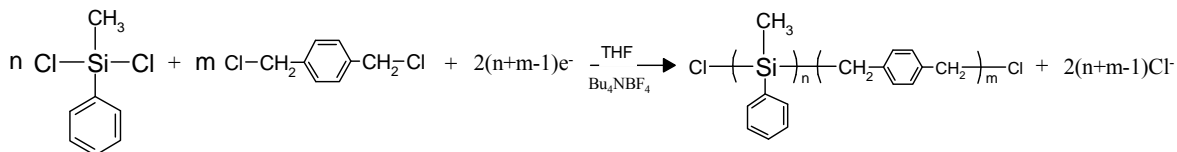
## OBTENCIÓN ELECTROQUÍMICA DE POLICARBOSILANOS EN CELDAS DIVIDIDAS

Itzel Guadalupe Gómez López, Andrea F. Urquijo Ángel, Rosa María Félix Navarro, Ángel Licea Claverie, Arturo Zizumbo López\*.

*Centro de Graduados e Investigación en Química. Instituto Tecnológico de Tijuana. Blvd Industrial S/N. Tijuana, B. C. 22500, México. E mail: azizumbo@tectijuana.mx.*

Hoy en día existe un gran desarrollo por la obtención de cadenas de alto peso molecular que contengan el enlace Si-C. Debido a sus excelentes propiedades físicas y electrónicas, los polycarbosilanos tienen especial interés, ya que pueden usarse como dendrímeros, cristales líquidos, materiales de óptica no lineal y materiales para la obtención directa de carburo de silicio.

Debido a que las cadenas pueden presentar rompimiento de enlaces por potenciales de oxidación anódica, la electrosíntesis en celdas electroquímicas simples ha limitado su desarrollo<sup>1</sup>. Para evitar los rompimientos de cadenas por medio del método electroquímico, se ha propuesto usar membranas poliméricas como separadores en celdas divididas con el propósito de obtener cadenas de mayor peso molecular<sup>2</sup>.



Las reacciones de electrorreducción se efectuaron en una celda electroquímica de platos paralelos de flujo continuo, dividida con una membrana neutra de polisulfona. Se usaron cátodos de acero inoxidable y ánodos de grafito resistentes a oxidación anódica. Se aplicó un potencial constante (18-20 V) a una mezcla de un diclorosilano (0.5 M) y un compuesto orgánico biclorado (0.5 M) disueltos en THF/HMPA con  $\text{Bu}_4\text{NBF}_4$  (0.1 M) como electrolito soporte.

El producto obtenido en el cátodo fue un sólido blanco purificado por precipitación

en alcohol etílico, el cual pudo confirmarse por técnicas espectroscópicas que corresponde a un polímero de Si-C al azar en la cadena principal con grupos sustituyentes de carbono en los átomos de silicio. En la Figura 1, se puede observar las señales a 7.3 y 7.11 ppm correspondiente al grupo sustituyente fenilo unido a silicio, 6.93 y 6.80 ppm para la señal del grupo fenileno de la cadena principal, la señal a 2.87 y 2.30 ppm para los grupos metileno de la cadena principal, la señal a 0.13 ppm del grupo metilo sustituyente unido al silicio. La caracterización de los policarbosilanos se complementa con análisis de GPC, FT-IR, TGA y DSC.

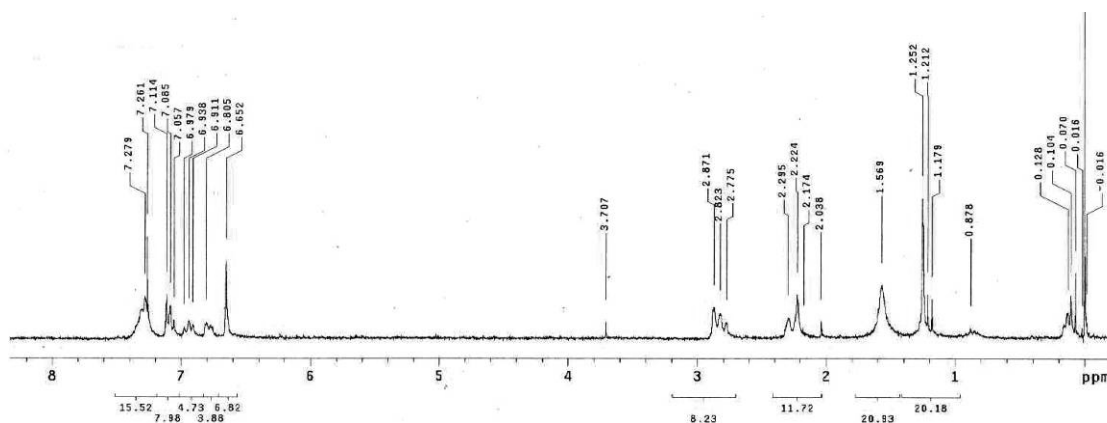
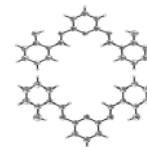


Figura 1. RMN de  $^1\text{H}$  para el poli(p-xililen-co-metilfenilsilano).

## Referencias

1. Boberski W. G. and Allred A. L., *J. of Organomet. Chem.*, 1975, 88, 73-77.
2. Arturo Zizumbo, Rosa María Félix-Navarro, Jorge Cervantes-Jáuregui, Felipe Avalos-Belmontes. *Silicon Chemistry*, 2005, Mayo, 265-269.



## **SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF Ni/TiO<sub>2</sub> AND Pt/TiO<sub>2</sub> SUPPORTED OVER GLASS IN THE PHOTOCATALYTIC OXIDATION OF BENZENE.**

Christian Teniente-Silva<sup>1\*</sup>, J. Guillermo Sandoval-Robles<sup>1\*</sup>, Ricardo García-Alamilla<sup>1</sup>,  
Carlos Velasco Santos<sup>2</sup>, H-Miguel Lima-Ballesteros<sup>1</sup>.

- (1) *Departamento de Estudios de Posgrado e Investigación, Instituto Tecnológico de Cd. Madero, Jesús Urueta y Juventino Rosas, Cd. Madero, Tamaulipas, México, Tel. (55) (833) 3574820 Ext.3110. E-mail: guillermosandov@gmail.com, teniente\_silva@yahoo.com.mx.*
- (2) *Instituto Tecnológico de Querétaro, Av. Tecnológico s/n Esq. Gral. Mariano Escobedo, Col. Centro Histórico, CP 76000, México.*

The photocatalytic degradation of benzene in gas phase using TiO<sub>2</sub> films supported on glass was studied. The TiO<sub>2</sub> was synthesized by the Sol-gel method<sup>1</sup> using Titanium (IV) isopropoxide as precursor, TiO<sub>2</sub> was deposited on glass substrates, substrates such as glass slides and glass tubes. The TiO<sub>2</sub> was deposited on glass substrates by Dip-Coating technique<sup>2</sup>, at a controlled rate of 12 cm/min each cycle. The films were calcined one hour at 400 ° C.

A continuous reactor was used for the degradation of benzene. The reactor was jacked with heating tape, the reactor dimensions were: 4.8 cm in diameter and 31 cm long. The total length of the glass tubes used in the reaction was 30 cm with a thickness of 2.5 mm and an inner diameter of 2.5 cm. Within the reactor, the glass tubes were placed concentrically with the UV lamp in the center. Dry air was used as carrier gas for benzene and water. The total flow was 10 mL / min.

The TiO<sub>2</sub> powder was characterized by TGA-DTA analysis and characterization of TiO<sub>2</sub> on glass slides were XRD. In the TGA-DTA analysis showed the loss of water between 50 - 100 ° C, the combustion of organic matter between 200 - 300 ° C, the loss of hydroxyl groups between 275-325 ° C and the endothermic peak at 390 ° C indicates anatase phase. The X-ray diffractogram of TiO<sub>2</sub> on the glass slide showed the anatase phase, the characteristic peaks of X-ray diffractogram were: 25.5, 37.9, 48.12, 54.3, 55.3, 62.9 and 69.2 degrees 2θ scale (Figure 1).

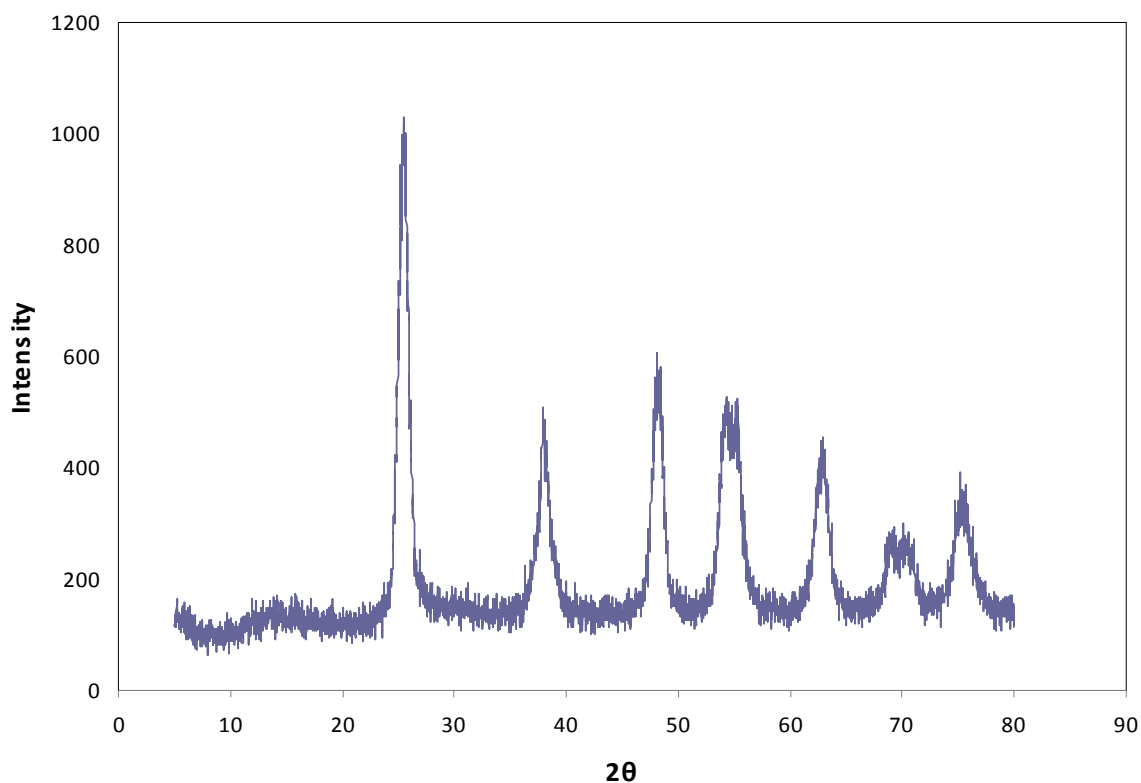
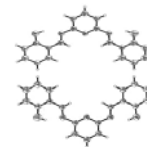


Figure 1. DRX of TiO<sub>2</sub> on glass slides.

The TiO<sub>2</sub> deposited on the glass tubes was used in the reaction as a catalyst. The degradation of benzene was 11 % from 100 to 150 ° C.

### References

1. Addamo, M.; Augugliaro, V.; Di Paola, A.; García, E.; Loddo, V.; Marci, G.; Palmisano, L.; *Thin Solid Films*, 2008, 516, 3803.
2. Kajitvichyanukul, P.; Ananpattarachai, J.; Pongpom, S.; *Science and Technology of Advanced Materials*, 2005, 6, 353.



## PHOTOCATALYTIC REDUCTION OF HEXAVALENT CHROMIUM. EFFECT OF TIN AND SULFATE ION IN TiO<sub>2</sub> CATALYST PREPARED BY SOL-GEL

Héctor Lima-Ballesteros,<sup>1\*</sup> Guillermo Sandoval-Robles,<sup>1</sup> Ricardo García-Alamilla,<sup>1</sup>  
Christian Teniente-Silva.<sup>1</sup>

(1) Instituto Tecnológico de Ciudad Madero, Depto. de Ingeniería Química. J. Rosas y J. Urueta. Col. Los Mangos, Cd. Madero Tamaulipas, México. Tel: 01 (833) 2158544. E-mail: hlimab@yahoo.com.mx

Photocatalysis process with different TiO<sub>2</sub> catalysts applied on polluted water by organic compounds and hexavalent chromium was studied.

TiO<sub>2</sub> catalyst was synthesized by sol-gel method using titanium tetrabutoxide as precursor and 1-butanol as dispersant agent. The catalyst structure was modified by addition of tin chloride (3, 7 and 10 %w Sn) and sulfuric acid (3, 7, 10, 12 %w SO<sub>4</sub>). All of catalyst was calcined at 450° C.

Photocatalytic reduction was conducted in a stirred batch reactor irradiated with UV light by a lamp with a range less than 350 nm for excitation of catalyst. Samples were taken every 30 minutes to observe the reduction of hexavalent chromium. The Cr(VI) concentrations were determined by the diphenylcarbazide method.

The hexavalent chromium concentration was 30 ppm with a volume of 300 mL, using 0.3 g / L of catalyst. The reaction of photocatalytic reduction of chromium was fixed as pseudo-first order. It was observed that with increasing concentration of tin in the catalyst, the activity decreases. Otherwise tin, as sulfate ion was increased in the catalyst, the activity was increased being as good as activity of Degussa P-25. The best results were presented using the SO<sub>4</sub>/TiO<sub>2</sub> 12% w, with an apparent reaction constant of 0.01159 min<sup>-1</sup>, compared to 0.01092 min<sup>-1</sup> of the commercial catalyst Degussa P25.

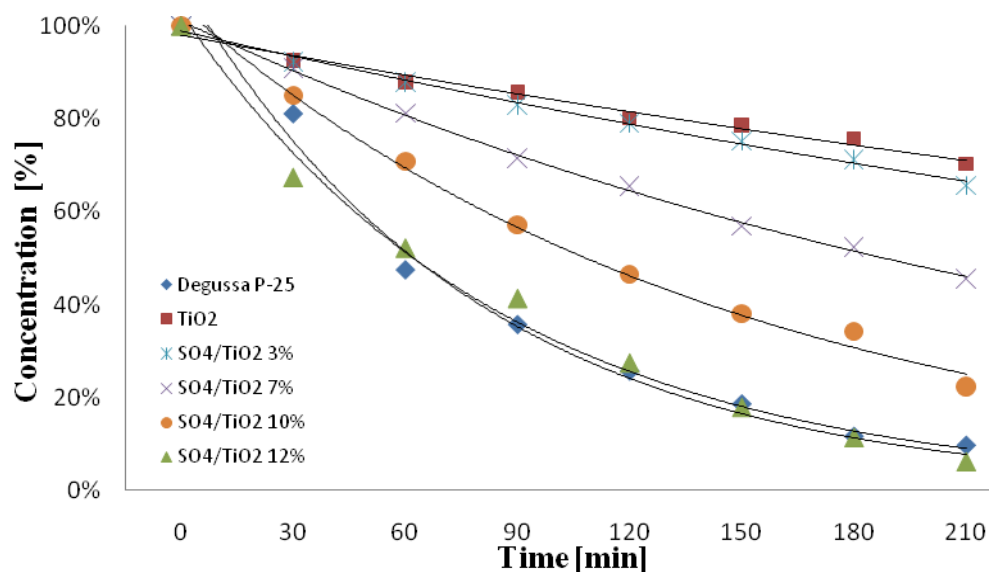
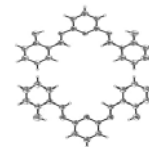


Figure 1. Photocatalytic reduction of Cr(VI) over different TiO<sub>2</sub> catalysts.

## References

1. Ku, I. Jung, *Water Res.* 5 (2001), 135–142.
2. Fang Jiang, Zheng Zheng, Zhaoyi Xu, Shourong Zheng, Zhaobing Guo, Liqiang Chen, *Journal of Hazard Materials B134*, (2006), 94-103.
3. T. Papadam, N. P. Xeukoukoulotakis, I. Poullos, D. Mantzavinos, *Journal of Photochemistry and photobiology A:Chemistry* 187, (2007) 308-315.



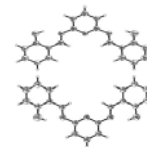
## ESTUDIO DE LA DEGRADACIÓN QUÍMICA Y FOTOQUÍMICA DE METIL PARATIÓN UTILIZANDO $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_8$

Sergio Pérez Sicairos<sup>1\*</sup>, José B. Morales Cuevas<sup>1</sup>, Juan R. López López<sup>1</sup>, Ignacio Calderón Ayala<sup>1</sup>, Rosa M. Félix Navarro<sup>2</sup>

- (1) *Facultad de Ciencias Químico Biológicas. Universidad Autónoma de Sinaloa. Av. Las Américas y Blvd. Universitarios, Culiacán, Sin. 80010, México. Email: perezss@uas.uasnet.mx*
- (2) *Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22500, México.*

Los plaguicidas son sustancias tóxicas para el ser humano y suelen incorporarse al agua durante actividades agrícolas, repercutiendo en el detrimento del medio ambiente. Muchas de estas se degradan naturalmente y otras son adsorbidas por partículas del suelo, inmovilizándolas e impidiendo su fácil transporte en el medio<sup>1</sup>. Los mecanismos naturales de purificación del agua incluyen desde procesos biológicos hasta los de precipitación y adsorción. Uno de los más importantes es la degradación fotoquímica inducida por la luz del sol<sup>[2-3]</sup>, donde se favorece la fotólisis del agua, formando radicales hidroxilos, los cuales son inestables y reactivos, degradando a una amplia variedad de compuestos disueltos en el agua. Este proceso de purificación es relativamente lento y depende de las condiciones ambientales para que ocurra. En el presente trabajo se estudió la degradación de metil paratión, un agroquímico de uso común en los campos agrícolas de Sinaloa, utilizando dos procesos, uno químico y el otro fotoquímico, ambos utilizando el mismo agente oxidante,  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_8$ , bajo diferentes condiciones experimentales para determinar el efecto de las mismas sobre las cinéticas de degradación.

De acuerdo con los resultados obtenidos, la reacción de degradación química es de primer orden respecto a la concentración de  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_8$ . Para este proceso se tiene que al aumentar la concentración de persulfato de sodio (de 1 a 15 mM), aumenta la velocidad de la reacción (0.0024 a 0.0169 M/s) y, por otro lado, la temperatura afecta de



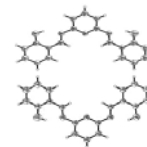
manera directa la velocidad de reacción, ya que al aumentar de 30 a 50°C se observa la misma tendencia a aumentar la velocidad de reacción (0.00311 a 0.01613 M/s). Cuando el experimento se realizó a 25°C no se observó degradación apreciable para un tiempo de reacción de tres horas, lo cual se considera que se debe a que a esta temperatura no se proporciona la energía de activación suficiente para promover la formación de radicales a partir del persulfato, razón por la cual la concentración de metil paratión permanece prácticamente invariable durante el experimento.

Para el caso de la reacción fotoquímica, las concentraciones de oxidante utilizadas fueron de 10, 15 y 20 mM. Para este intervalo de concentraciones, la reacción presentó mayor porcentaje de degradación a 20 mM para un lapso de reacción de tres horas. Los resultados de ambos procesos indican que mediante el proceso químico se obtienen porcentajes mayores de degradación para un tiempo de reacción menor, con relación al proceso fotoquímico, no obstante el proceso químico no procede cuando la temperatura de reacción es de 25°C (en un periodo de tiempo estudiado de 3 h), en tanto que todos los resultados para la reacción fotoquímica fueron obtenidos a esta temperatura.

## Referencias

1. SEMARNAP-INE., 1999. Lo que usted debe saber sobre los plaguicidas. Plaguicidas No.1. México.
2. Schiavello, M.; Photocatalysis and Environment, Ed., Kluwer Acad. Pub., Dordrecht, 1988, 12-20
3. Ollis, D. F.; Al-Ekabi, H.; Photocatalytic Purification and Treatment of Water and Air, Ed. Elsevier, Amsterdam, 1993
4. Huang, K.; Couttenye, R. C.; Hoag, G. E.; Chemosphere, 2002, 49, 413-420.





## DEGRADACIÓN DE COMPUESTOS ORGÁNICOS TÓXICOS MEDIANTE UN PROCESO ELECTROQUÍMICO Y FOTOQUÍMICO ACOPLADO

Rubén Castro-Contreras,<sup>1</sup> Rosa María Félix-Navarro,<sup>2\*</sup> Sergio Pérez.<sup>3</sup>

(1) *Universidad Autónoma de Baja California, Calzada Universidad, #14418, Mesa de Otay, C.P. 22390, Tijuana B. C., México.*

(2) *Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22000, México. E mail: rmfelix2003@yahoo.com.mx.*

(3) *Universidad Autónoma de Sinaloa, Blvd. de las Américas y Universitarios, C.P. 80010, Culiacán, Sinaloa., México.*

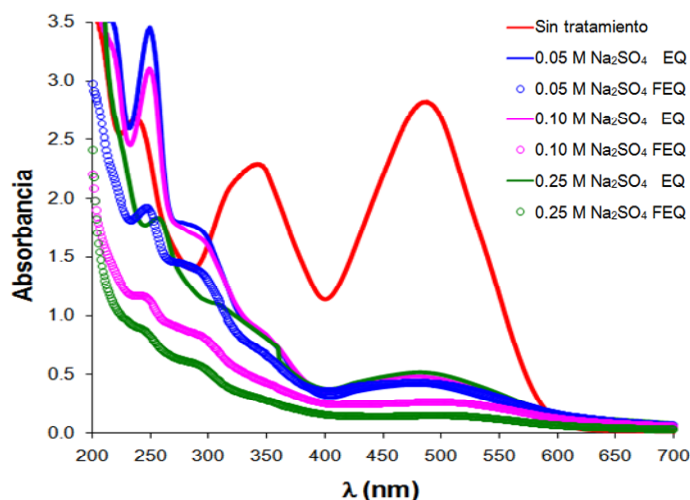
El crecimiento industrial en México y sobre todo en la frontera con Estados Unidos de Norteamérica ha sido muy rápido en los años recientes. Con mucha frecuencia las descargas acuosas en las industrias químicas contienen productos químicos orgánicos tóxicos<sup>1</sup>. Muy en particular, los colorantes textiles tienen gran persistencia en el ambiente, y los métodos de eliminación clásicos no son útiles debido a que oxidaciones o reducciones parciales pueden generar productos secundarios altamente tóxicos<sup>2</sup>. La mayoría de ellos son de origen sintético, muy solubles en agua, altamente resistentes a la acción de agentes químicos y poco biodegradables. En este proyecto de investigación, se plantea realizar la destrucción de compuestos orgánicos tóxicos de soluciones acuosas diluidas mediante un proceso fotoelectroquímico en el cual el agente oxidante se genera electroquímicamente y se acelera la velocidad de degradación promoviendo la formación de radicales.

Se prepara la solución de rojo congo a concentraciones de 10, 25 y 50 mg/L, con su correspondiente sal. Se vierte en la celda electroquímica (de cuarzo cilíndrica, además cuenta con 3 electrodos). El ánodo es de titanio con recubrimiento de óxido de rutenio, estaño y titanio. El contraelectrodo es de carbón vítreo reticulado de 10 poros por pulgada. La electrolisis se realizó a potencial constante. Para el caso del proceso fotoelectroquímico, se utiliza una cámara fotoquímica provista con 16 lámparas que emiten en el intervalo de radiación entre 300 y 400 nm.

Para el análisis de la concentración de rojo congo se utilizó Espectroscopia

Ultravioleta-Visible. Se realizaron experimentos aplicando potenciales de 0.8, 0.9, 1.0, 1.1 y 1.2 V vs SSE usando tres diferentes concentraciones de sulfato de sodio de 0.05, 0.10 y 0.25 M.

En la Figura 1, se muestran los espectros de absorción de las soluciones obtenidas al finalizar los experimentos de degradación fotoelectroquímica y electroquímica (después de 2 horas de reacción) realizados aplicando 1.0 V vs SSE.

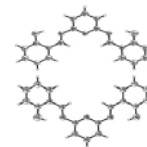


**Figura 1.** Comparación de los procesos fotoelectroquímico y electroquímico que muestran los espectros UV-Vis de las soluciones obtenidas al final de los experimentos llevados a cabo aplicando 1.0 V vs SSE.

En los espectros UV-Vis se observan que las señales a 340 nm y 230 nm se reducen más en el proceso fotoelectroquímico, lo que indica que los grupos aromáticos que contiene el rojo congo se están rompiendo, degradándose más que en el proceso electroquímico.

## Referencias

1. EPA Office of Compliance Sector Notebook, Project: Profile of the Textile Industry, <http://www.cluin.org/download/toolkit/textilsn.pdf>, 1997.
2. C. O'Neill, F.R. Hawkes, D.L. Hawkes, N. Lourenço, H.M. Pinheiro y W. Delée, J. Chem. Technol. Biotechnol., 1999, 74, 1009.



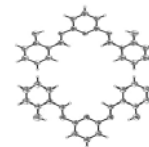
## SISTEMA DE TRATAMIENTO DE AGUAS GRISES

Fernando Soto Álvarez,<sup>1\*</sup> Uriel Pérez Jara,<sup>1</sup> Marco Antonio Mendoza<sup>2</sup>

(1) *Ing. en Nanotecnología, Instituto Tecnológico de Tijuana*

(2) *Ing. Electrónica, Instituto Tecnológico de Tijuana*

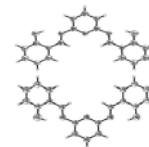
Se estima que para el año 2020 la ciudad de Tijuana no podrá abastecer a toda su población de agua potable, esto es debido al acelerado crecimiento urbano, a la ausencia de agua potable en la región y la poca capacidad para darle tratamiento a las aguas grises que posteriormente se convierten aguas negras; es por eso que la búsqueda de técnicas alternativas para el tratamiento de aguas residuales es vital para la comunidad. El sistema de tratamiento de aguas grises (STAG) es un reactor electroquímico, el cual realiza la separación de sólidos suspendidos en el aguas gris por medio de los principios básicos de coagulación-floculación; donde el coagulante se forma por las reacciones de oxidorreducción que ocurre entre los electrodos y el medio acuoso, y la floculación consiste en inducir el choque de partículas coagulantes para hacer posible la formación de partículas de tamaño suficiente para ser separada en sedimento o flotado; el objetivo del proyecto es ofrecer una solución de bajo costo y fácil de usar para el tratamiento de aguas grises, que aporte al rescate ecológico de la ciudad. Para el diseño y contracción del reactor se busco crear un producto viable para su consumo masivo, asi que se busco automatizar el proceso para su fácil uso, utilizando flotadores para regular el paso de agua y un controlador electrónico para medir la turbidez de la misma; otros puntos de suma importancia fueron: tener un gasto mínimo de energía, poco tiempo de limpieza, un bajo tiempo para el mantenimiento sin uso de herramientas especializadas. Una solución encontrada para tener una mayor área de contacto fue el utilizar pastillas aluminio que aumentan significativamente el área de contacto; se utilizaron 6 electrodos conectados a un agitador para remover sedimentos, se utilizo una corriente de un ampere constante, un voltaje variante con promedio de 14 V y una potencia consumida de 4.9 watts por hora. Las reacciones químicas que ocurrieron fueron la reducción del aluminio generando el ion  $Al^{+3}$ , este se complementa con las tres moléculas de ion hidroxilo generados en el cátodo, formando hidroxilo de aluminio que es el gente coagulante que atrapa las partículas suspendidas en el agua gris; el proceso de floculacion



inicia con la aglomeración de partículas suspendidas, estimuladas por un mezclador para dicha aglomeración se mantenga homogénea en todo el reactor. Las partículas de mayor peso son sedimentadas, las partículas mas pequeñas son llevadas a la superficie por las burbujas de hidrogeno. La muestras se tomaron cada 15 min. para llevar un control de calidad del agua, a cada una se le midió turbidez, pH, conductividad y DQO. Al finalizar el proceso el agua tratada pasa por un filtro de carbón activado para obtener mejor calidad. se estudiaron aguas grises alrededor de un año, principalmente agua utilizada en lavado de ropa; los resultados obtenidos son provenientes de un tanque piloto con capacidad de 5 litros. Los resultados muestran que se obtuvo una disminución promedio a 42 FAUS, reduciendo el 95% de la turbidez en el agua gris (aplicando un filtro de carbón activado la turbidez bajo a 10 FAUS); también un consumo mínimo de energía y un precio estimado de 0.14 centavos Mexicanos. La electrocoagulación es una alternativa eficiente para la eliminación de diferentes tipos de contaminantes en el agua, el reactor de STAG cumplió con su objetivo: bajo costo de fabricación, aplicación así como de mantenimiento, permitiendo su uso por cualquier persona, otra ventaja contra otros métodos de limpieza de agua es que elimina requerimiento de almacenamiento de productos químicos.

## Referencias

1. Arango, A.; Garcés, L. F.; Diseño de una celda de electrocoagulación para el tratamiento de aguas residuales de la industria láctea, Universidad Lasallista, 2007
2. Morante G.; Universidad Nacional de Colombia sede Manizales, 2002
3. Domínguez, M.; Rivera, M. L.; Pina, M.; Pérez, S.; Incidencia del gradiente de velocidad en la eficiencia de la electrocoagulación para remover arsénico de un reactor a flujo de pistón, 2008
4. Mendoza, M. A.; Sistema de tratamiento de aguas residuales, Instituto Tecnológico de Tijuana, 2008



## BIDIRECTIONAL FLUIDIZED BED REACTOR FOR POWDER PROCESSING

Hugo Tiznado<sup>1\*</sup> and Gerardo Soto<sup>1</sup>

(1) Centro de Nanociencias y Nanotecnología- UNAM, Ensenada, Mexico. E mail:  
tiznado@cryn.unam.mx.

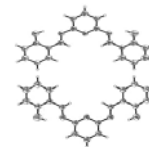
Fluidized bed reactors are generally more efficient than static bed reactors for the process of solid state material [1]. First basic reactor designs dates way back, from early past century, being widely used in charcoal combustion in thermoelectric facilities. Surprisingly that architecture has not been utilized at its full potential for many applications where solid state reactions are required. Within this background, this works is being developed, and presents the first steps and evaluation of a prototype laboratory unit of a fluidized bed reactor for the powder processing. In our design, the fluidized bed and the domestic microwave technologies are combined. The reactor includes a quartz tube reactor under vacuum inside of a domestic microwave oven. Powder to be processed is placed in the tube's interior, feeding a fluidizer gas in one entrance, while pumping is done through the other side of the tube. The innovation respect to other designs is that our reactor allows commuting of the flow direction in a dynamic fashion, making possible to maintain the powder in fluidized state for along period of time without the need of filtration, extraction and/or recovery stages. We believe that our implementation will allow to process powder of nano-dimensions in a highly efficient way. It is presented the building, characteristics, and validation of some test runs. For instance, it has been deposited nano-films and nano-particles of Ag and TaN on silica/alumina powders of 50  $\mu\text{m}$ . We think these types of technologies are required in the future for activation, handling and deactivation processes of nano-powders.

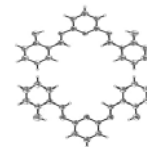
### References

1. Werther, Joachim and Hartge, Ernst-Ulrich (2003) "Modelling of Fluidized Bed Reactors," International Journal of Chemical Reactor Engineering: Vol. 1: P1.



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.





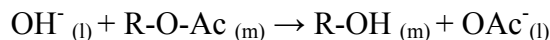
## **“ANNEALING” E HIDRÓLISIS DE MEMBRANAS DE DIACETATO Y TRIACETATO DE CELULOSAS MEZCLADAS Y SU EFECTO SOBRE EL RECHAZO DE SAL Y FLUJO DE PERMEADO**

Fernando J. López-García, Shui Wai Lin,\* Rosa María Félix-Navarro

*Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22500, México. E mail: iqfjlg@gmail.com*

El uso de mezclas de derivados de celulosa en la fabricación de membranas de ultrafiltración y ósmosis inversa, proporciona un mejor desempeño que el de componente sencillo<sup>1</sup>. El tratamiento térmico denominado: “annealing”<sup>2</sup> permite transformar una membrana de ultrafiltración a osmosis inversa en un solo paso. El tratamiento produce una disminución del tamaño de poro promedio en la capa activa y en la densidad de poro.

La reacción de hidrólisis de las membranas de acetato de celulosa se realiza para aumentar el tamaño de poro de la membrana modificada. La reacción de hidrólisis se expresa como<sup>3</sup>:



donde (l) se refiere a la fase en solución y (m) se refiere a la fase de la membrana.

En base a los estudios realizados se llega a la conclusión que al incrementar la temperatura disminuye el tamaño de poro de la membrana obteniendo como consecuencia un mayor porcentaje de rechazo y una disminución del flujo de permeado (GFD, gal/ft<sup>2</sup>día).

La hidrólisis solo presenta un resultado significativo a 25°C, ya que el poro es lo suficiente grande para que la solución de hidrólisis penetre en la membrana ocasionando la apertura del poro.

En la Figura 1 se muestra un resumen de los resultados antes mencionados.

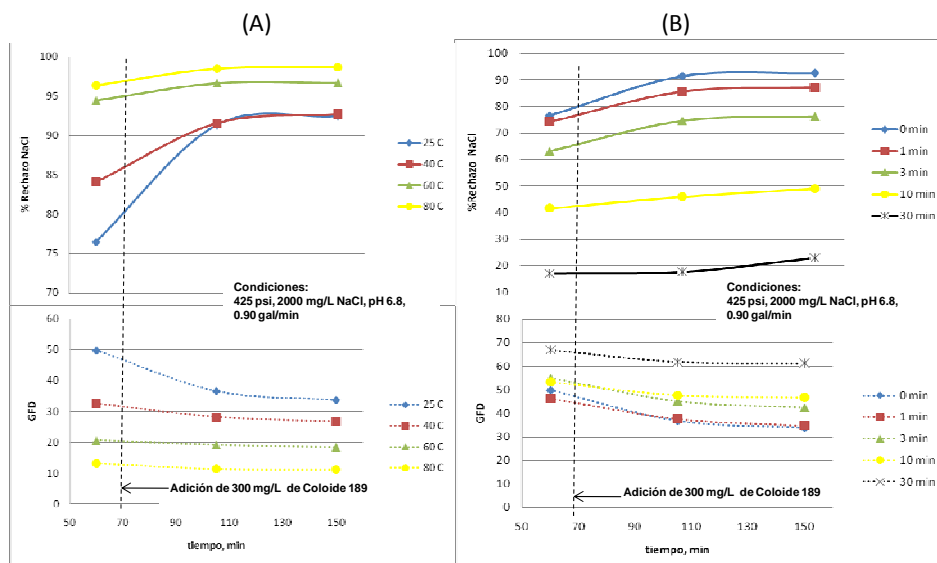
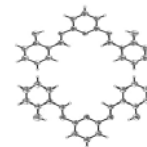


Figura 1. Gráficas del porcentaje de rechazo de sal y flujo de permeado (GFD) con respecto al tiempo de muestreo a diferentes temperaturas de annealing (A) y a diferentes tiempos de hidrólisis en membranas modificadas por annealing a 25°C (B).

## References

1. Dave, A.M.; Sahasrabudhe, S.S.; Ankleshwaria, B.V.; Mehta, M.H.; J. Membrane Sci., 1992, 66, 79
2. Schwarz, H.H.; Richau, K.; Hicke, H.G.; J. Membrane Sci., 1987, 34, 283
3. McCray, S.B.; Vilker, V.L.; Nobe, K.; J. Membrane Sci., 1991, 59, 30





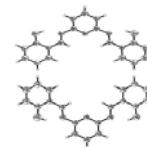
## SENSOR RADIOMÉTRICO PARA LA DETERMINACIÓN DE AGUA EN SOLVENTES ORGÁNICOS

Sara Karime López González,<sup>1</sup> Norma Aidee Cortez Lemus,<sup>2</sup> Ratnasamy Somanathan,<sup>2</sup>  
Georgina Pina-Luis<sup>2\*</sup>

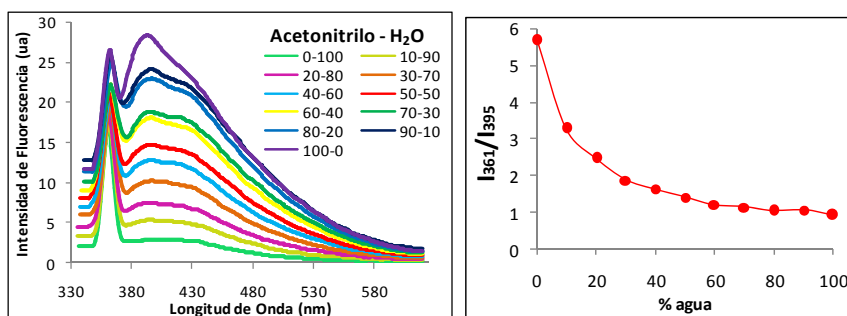
(1) Instituto Tecnológico de Mexicali, A.P. 91-55 Mexicali, 21396 B.C. México

(2) Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22500, México. E-mail: gpinaluis@yahoo.com

En los últimos años se ha dado un impulso considerable al diseño y síntesis de moléculas funcionales que puedan servir como sensores sensibles para la caracterización de la polaridad del microambiente. Este tipo de materiales ha dado lugar al desarrollo de los métodos solvatocrómicos y solvatofluorocrómicos,<sup>1,2</sup> los cuales se basan en los cambios espectroscópicos que se observan cuando la molécula se pone en contacto con medios de diferente polaridad. Con este fin se han desarrollado moléculas, cuyas características estructurales pueden conducir a reacciones en el estado excitado, que producen nuevos fluoróforos con la aparición de bandas adicionales. La determinación del contenido de agua en solventes orgánicos es de mucha importancia en procesos biológicos y en aplicaciones industriales. Varios métodos se utilizan con este propósito, sin embargo, los quimiosensores cromogénicos y fluorogénicos se consideran más convenientes y simples para análisis de rutina, debido a la facilidad de obtención de la señal de transducción del método. En este trabajo se reporta que el derivado (1R,2R)(E)-N-(2-aminociclohexil)-4-((4-(dimetilamino)fenil)diacenil) bencenosulfonamida tiene propiedades fluorocrómicas en presencia de solventes de distinta polaridad. La síntesis del compuesto se llevó a cabo de acuerdo a la metodología reportada con anterioridad.<sup>3</sup> Su espectro de fluorescencia, exhibe dos bandas de emisión que responden de forma diferente a la variación de la polaridad del solvente empleado. La banda a la longitud de onda más baja corresponde al estado excitado normal N\* y la segunda banda a la reacción intramolecular de transferencia de protones (ESIPT) para producir el tautómero T\* correspondiente. Esta segunda banda se desplaza gradualmente al rojo a medida que la



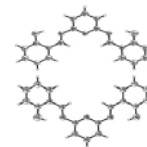
polaridad del solvente aumenta. La presencia de dos estados emisivos conectados por reacciones en el estado excitado permite obtener parámetros de utilidad analítica como son la variación de la posición de la banda y la relación de intensidades entre las dos bandas de emisión (medidas radiométricas). Se estudió el efecto del contenido de agua en soluciones binarias de agua y solvente orgánico con diferentes solventes como son el acetonitrilo, dioxano, acetona y metanol. La sonda muestra un comportamiento lineal en un intervalo de concentración de agua de 0-100%, cuando se realiza la medida de la intensidad de fluorescencia directa a la longitud de onda de la segunda banda de fluorescencia. Las medidas radiométricas realizadas en función del contenido de agua, mostraron una variación pronunciada a concentraciones de agua en un intervalo de concentraciones por debajo de 20%, lo que permite una mayor sensibilidad de la determinación en este intervalo de concentraciones, cuando se emplea la medida radiométrica.



En conclusión este compuesto puede utilizarse como una sonda sensible para la medida de la polaridad del microambiente en sistemas químicos y biológicos, así como para el análisis de mezclas binarias de agua: solvente orgánico

## Referencias

1. Yam, V.; Wong, K.; Zhu, N.; J. Am. Chem. Soc., 2002, 124
2. Ercelen, S.; Klymchenko, A.; Demchenko, A. Anal. Chim. Acta 2002, 464, 273.
3. Cortez, N.A. Aguirre, G. Parra-Hake, M. Somanathan, R. Tetrahedron Letters, 2007, 48, 4335



## EFICIENCIA TÉRMICA DE UN SISTEMA HÍBRIDO DE SECADO

W. Soto-Gómez, A. Torres-López

*Instituto Tecnológico de Tijuana, Calzada Tecnológico S/N, División de Estudios de Posgrado e Investigación. Tijuana B.C. E-Mail solarwil@tectijuana.mx*

El secado ofrece una alternativa al agricultor cuando existen problemas de transporte o se produce baja demanda del producto. Secar significa remover cantidades de agua relativamente pequeñas de cierto material. El secado es un proceso en el que se intercambian calor y masa. Implica la transferencia de un líquido procedente de un sólido húmedo a una fase gaseosa no saturada. Incluye una operación energética elemental y representa una de las acciones térmicas básicas en la industria de procesos y agro-alimentaria. El secado o deshidratación de alimentos se usa como técnica de preservación pues los microorganismos que provocan la descomposición de los alimentos no pueden crecer y desarrollarse en ausencia de agua.

El secador solar híbrido, está integrado por tres partes fundamentales: a) colector solar de aire, b) cámara de secado, y c) sistema de refrigeración. Con un sistema adquisitor de datos y software, que consiste en doce termo-sensores de rangos de 0 a 100 °C, para medir temperatura y un radiómetro para medir irradiación solar, una tablilla de control con su respectiva fuente de alimentación, conectada a un CPU, donde se guardan las mediciones tomadas, para su análisis y tabulación.

En esta primera prueba se caracterizo el colector solar de aire, introduciendo en la cámara de secado 3 kg de chile habanero, durante el día solar de un día promedio del mes de septiembre, reduciéndolo a un peso final de 2.718 kg. Los espejos planos concentradores de calor, aumentaron las temperaturas en el interior del calentador solar de aire, pues desde el inicio del día se tenía incidencia solar. El sistema adquisitor de datos, nos hizo menos complejo la toma de mediciones, y se tuvo cuidado de obtener

valores reales, además de almacenarlos, para su análisis posterior.

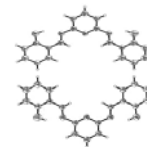


Figura No.1 Vista superior del calentador solar de sistema híbrido de secado.

Se hace necesario instalar un mejor aislamiento en paredes. El acrílico permite mucha pérdida de calor después y durante el día solar. Para obtener una mayor temperatura en el interior del calentador solar, que incide en una mayor temperatura en la cámara de secado, se hace necesaria utilizar películas que tengan mayor absorción de calor, para aprovechar al máximo la concentración de radiación solar. Se obtuvo muy baja eficiencia energética del orden del 5 al 10 %

### Referencias

1. Hans Rau, Energía solar, Aplicaciones prácticas, Marcombo- Boixerau Editores, Barcelona España 1984
2. Pablo Francisco Pena Carrera, Análisis y control de asoleamiento, Instituto Politécnico Nacional, México D.F. México 1989
3. Asociación Nacional de Energía Solar, Curso de calentadores solares planos, México 1987
4. Hall, Plomería Sistema de suministro de agua caliente y calefacción, Limusa Noriega Editores, México 1998
5. Asociación Nacional de Energía Solar, Curso de actualización de calentadores solares planos, Chihuahua Chih, México 1987.



## **MODIFICACIÓN QUÍMICA DE LA FIBRA DE JATROPHA CURCAS PARA LA OBTENCIÓN DE UN MATERIAL COMPUESTO USANDO POLIETILENO DE BAJA DENSIDAD.**

Luis Alberto Bustos-Figueroa<sup>1</sup>, Zully Vargas-Galarza<sup>1\*</sup>, Efraín Rubio-Rosas<sup>2</sup>, Edgar García Hernández<sup>1</sup>, René Salgado-Delgado<sup>1</sup>, Rosalba Fuentes-Ramírez<sup>3</sup>.

*(1) División de Estudios de Posgrado e Investigación y Departamento de Ingeniería Química y Bioquímica del Instituto Tecnológico de Zacatepec, Calzada Tecnológico No 27, Zacatepec Mor. CP 62780*

*(2) Centro Universitario de Vinculación de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, (3) Facultad de Química de la Universidad de Guanajuato.  
mail: zullyvag@hotmail.com*

En este trabajo se reporta la modificación química de la fibra de *Jatropha curcas* (Figura 1) para compatibilizarla con polietileno de baja densidad (LDPE) como matriz polimérica. Se llevó a cabo la reacción de acetilación (con anhídrido acético) y tratamiento alcalino (NaOH 0.5 N) para la modificación superficial de la fibra. Se corrobora mediante la presencia de vibraciones de grupos (C=O) dicha modificación sobre la superficie de la fibra, producto de la reacción de acetilación y utilizando la técnica de FTIR para observar los cambios. El carácter hidrofóbico adquirido tras los tratamientos antes descritos se analizó utilizando curvas de secado, ángulos de contacto, y prueba de afinidad a disolventes. La microscopia electrónica de barrido evidencia los cambios morfológicos adquiridos por la fibra debido a las modificaciones. El material compuesto obtenido presenta propiedades específicas de acuerdo a los resultados obtenidos. Para finalizar, existe una mayor compatibilidad con la matriz polimérica y la fibra acetilada observándose mayor resistencia en la prueba a la tensión para estos materiales, esto es debido a la afinidad de grupos presentes.

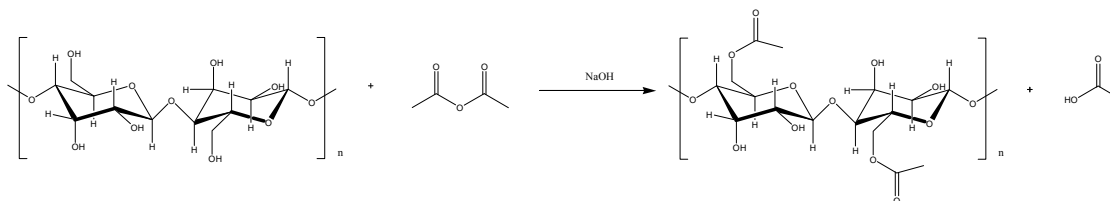
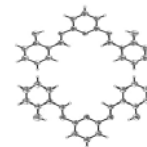


Figura 1.- Modificación química de la fibra de *Jatropha curcas*

## Referencias

1. Kumar-Tiwari, A.; Kumar A.; *Biomass and Bioenergy*, 2007, 31, 569-575.
2. Miranda-Saturnino.; *Obtención de Aceite de Piñón Mexicano (*Jatropha curcas*) y medición de sus propiedades.*, Tesis de Licenciatura, Instituto Tecnológico de Zacatepec, 2008, Zacatepec Mor., México.
3. García-Hernández.; *Compositos poliméricos reforzados con bagazo de caña de azúcar modificado en su superficie*, Tesis de Doctorado, Instituto Tecnológico de Tijuana, 2003, Tijuana B.C., México.
4. García, F; Martínez, E; Álvarez, A; Castaño, V. M.; *Journal of Reinforced Plastics and Composites*, 1995, 14, 641.
5. Ichazo, M. N.; *Composite Structures*, 2001, 54,207.
6. Joseph, P.V.; *Composites Science and Technology*, 1999, 59

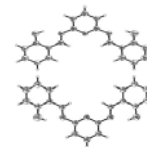


## PREPARACIÓN DE COPOLÍMEROS EN DIBLOQUE DE ESTIRENO-(MET)ACRILATOS POR POLIMERIZACIÓN RADICÁLICA VIVIENTE “RAFT”

Pedro Navarro-Vega, Alejandro Vega-Ríos, Ángel Licea-Claverie,\* Arturo Zizumbo-López

*Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22000, México. E mail: aliceac@tectijuana.mx.*

Los copolímeros en dibloque consisten en la unión covalente de dos moléculas de polímeros químicamente diferentes, o bloques, para formar una macromolécula más grande y más compleja. Si los bloques de los polímeros son inmiscibles, la separación de fases es inducida en una escala que está directamente relacionada con el tamaño de las cadenas del copolímero, resultando morfologías que se caracterizan por un patrón de dominios químicamente distintos, donde la periodicidad  $L_0$  se encuentra en un intervalo de 5-100 nm.<sup>1</sup> La composición de los copolímeros en dibloque determina fuertemente la morfología de la microfase. Los copolímeros en dibloques con una composición simétrica presentan una morfología laminar, y al aumentar el contenido de unos de los bloques en el copolímero presentan una morfología de tipo giroide, cilíndrica, y finalmente, esférica, dependiendo de la composición<sup>1</sup>. En este trabajo se intentó la síntesis de copolímeros en dibloques de poliestireno [poli(S)] siendo el segundo bloque polímeros de *N*-isopropilacrilamida (PNIPAAm), acrilato de *n*-hexilo (HA) ó metacrilato de metilo (MMA) utilizando la técnica de polimerización radicalica controlada por transferencia de cadena reversible de adición-fragmentación (RAFT). Esta técnica se caracteriza por permitir la obtención de polímeros con un bajo índice de polidispersidad, con un incremento lineal en el peso molecular con la conversión y con la característica de ser “vivos”, o sea que se pueden extender las cadenas por la adición secuencial de monómeros. El peso molecular a obtener ( $M_n$ ) se puede predecir en base a las concentraciones iniciales de monómero, agente RAFT y en la conversión de la polimerización. El agente de transferencia de cadena (agente RAFT) utilizado en este trabajo fue el ditiobenzoato del ácido 4-cianopentanoico.



Las condiciones de síntesis y los resultados principales se encuentran en la Tabla 1; como solvente se utilizó el 1,4 Dioxano (20 mL) y la temperatura de polimerización fue de 70°C. Los polímeros se caracterizaron por GPC, RMN, TGA y DSC.

**Tabla 1. Síntesis de macro-CTA's.**

Polímero	Monómero : CTA: I	% Conv	$M_n$ (teórico) g/mol	$M_n$ (GPC) <sup>a</sup> g/mol	$M_w/M_n$
Poli(HA)	187 : 1 : 0.11	51.8	15,439	25,970	1.114
Poli(HA)	286 : 1 : 0.10	59.3	26,745	31,031	1.094
Poli(NIPAAm)	358 : 1 : 0.18	86.5	35,226	22,360	1.130
Poli(NIPAAm)	272 : 1 : 0.27	90.8	28,162	27,820	1.263
Poli(MMA)	280 : 1 : 0.20	62.5	17,784	22,370	1.030
Poli(MMA)	598 : 1 : 0.21	68.8	41,514	37,760	1.040
Poli(S)	1206 : 1 : 0.20	12.9	16,421	29,590	1.018
Poli(S)	1445 : 1 : 0.20	12.3	18,706	30,470	1.030

a) Determinado en GPC con fase móvil THF, a 35°C.

Los copolímeros en bloques se sintetizaron con éxito a partir de los macro-CTA's, con condiciones reflejadas en la Tabla 2. La caracterización de los copolímeros en dibloque se realizó por las técnicas de GPC, RMN, TGA y DSC.

**Tabla 2. Síntesis de copolímeros en bloque.**

Macro-CTA's	$M_n$ (GPC) g/mol	Segundo Bloque	Monómero : CTA: I	$M_n$ (GPC) <sup>a</sup> g/mol	$M_w/M_n$
Poli(S)	43,920	NIPAAm	398 : 1 : 0.40	59,480	1.113
Poli(S)	24,120	HA	185 : 1 : 0.22	78,450	1.213
Poli(S)	30,470	MMA	590 : 1 : 0.32	50,900	1.203
Poli(S)	35,210	MMA	486 : 1 : 0.38	53,520	1.116

a) Determinado en GPC con fase móvil THF, a 35°C.

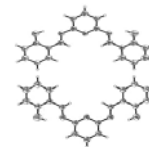
Se obtuvieron con éxito los copolímeros en dibloque deseados por la técnica RAFT con control de la composición química en base a polímeros "vivos" de estireno.

**Agradecimientos.** Este trabajo cuenta con el apoyo del CONACYT (SEP2007-60792).

## Referencias

1. Fasolka J. M.; Mayes M. A.; Annu. Rev. Mater. Res., 2001, 31, 323





## **ATTACHMENT CHEMISTRY OF SILVER NANOPARTICLES ON SURFACES**

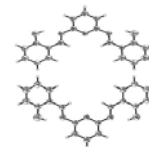
Virgil Estopare<sup>1</sup>, Ratnasamy Somanathan and David Pullman\*

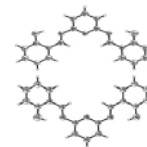
*Department of Chemistry and Biochemistry, San Diego State University, San Diego, CA  
92182-1030*

The ability to chemically attach silver nanoparticles to substrates will be important in optical, medical, and catalytic applications and perhaps in other areas requiring persistent coatings of these nanoparticles. With these applications in mind, we have begun a project whose objective is to develop simple, rapid, and safe methods of attaching silver nanoparticles to various surfaces, including glass, silicon, metals, etc. Attachment protocols currently exist, but they tend to be time-consuming and involve hazardous compounds. Our preliminary work has focused on glass, whose surface consists mostly of Si-O-H and Si-O-Si groups, and silica gel, which is similar to glass, except more porous and with more Si-O-H groups on the surface. After cleaning the surfaces, we functionalize the surface with a linker molecule that strongly bonds to both the surface and to silver nanoparticles, which are subsequently exposed to the surface in aqueous solution. Thus far, we have used trimethoxysilane derivatives to functionalize the glass and silica gel, and have monitored the functionalization by Raman Spectroscopy and by the degree of uptake of spherical silver nanoparticles. Results from current experiments to probe and optimize the functionalization and nanocluster uptake by contact angle measurements and atomic force microscopy will be presented.



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.





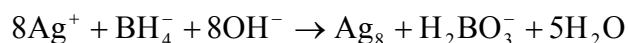
## MECHANISTIC STUDY OF THE PRODUCTION OF SILVER NANOPARTICLES

Mallory Hinks, David Pullman\*

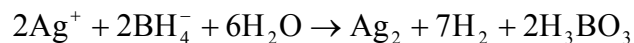
*Department of Chemistry and Biochemistry, San Diego State University, San Diego CA  
92182-1030.*

The most common method of synthesizing silver nanoparticles in aqueous solution is the reduction of silver ions by sodium borohydride. Sodium citrate is typically added because citrate ions function as effective capping agents of the silver nanoparticles. While the net reaction producing the nanoparticles is relatively well-understood, its mechanism is not. The goal of the current work is to elucidate this mechanism in as much detail as possible.

We have constructed a mass spectrometer apparatus that will allow us to address some of the relevant issues by performing a time-resolved “headspace analysis” — identifying and sensitively monitoring gas phase species produced during the synthesis of the nanoparticles. In the case of silver nanoparticles formed by reducing silver ions with sodium borohydride, the hydride ions are oxidized, but different overall reactions have been proposed in the literature, and these reactions may depend on the pH of the solution. For example:

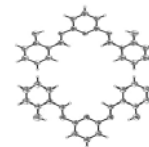


and

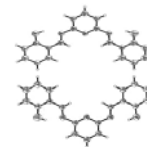


are reactions that have been suggested. One significant difference is the production of  $\text{H}_2$  in the second case.

Our newly constructed mass spectrometer apparatus has the capability to detect masses below 4 amu, so we can measure the generation of hydrogen gas (mass=2 amu). We detect an immediate burst of  $\text{H}_2$  upon introduction of sodium borohydride to a solution of silver nitrate and sodium citrate. Although sodium borohydride reacts with



water to produce  $H_2$ , the rate at which  $H_2$  is produced in our experiment far exceeds that in the borohydride-water reaction. We are currently in the process of calibrating the signal so that we can determine the actual partial pressure rise of hydrogen and thus calculate the amount of hydrogen generated per silver ion and borohydride ion. This information will be important in helping determine the reaction mechanism. Results will also be presented for reactions using isotopically-substituted reactants (deuterated water and sodium borodeuteride) because the mass spectral analysis may allow us to prove whether the hydrogen atoms in the hydrogen gas come only from the borohydride or also from the water.



## **KINETICS OF DECOMPOSITION OF SILVER NANOPARTICLES INDUCED BY CHLORIDE IONS**

M. Gabriella Espinoza, Karen I. Peterson, Bryce Peterson, and David Pullman\*

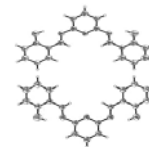
*Department of Chemistry and Biochemistry, San Diego State University, San Diego, CA  
92182-1030*

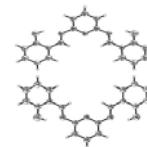
The potential applications of silver nanoparticles in optical, medical, and other commercial devices, are numerous and are generally based on their remarkably intense absorption of visible light as well as their antibacterial properties. An important aspect in the utilization of the nanoparticles is how long they survive when subjected to various physical and chemical conditions. In the current study, we focus on the reaction of silver nanoparticles with salt.

Chloride ions are known to have variable effects on silver nanoparticles. High concentrations of  $\text{Cl}^-$  catalyze the aggregation of the nanoparticles and simultaneously enhance the SERS of absorbed species. At very low concentrations a different effect occurs where the nanoparticles are first etched and then grow into cubic nanoparticles. Our goal is to quantitatively investigate the physical properties of the nanoparticles in sodium chloride solutions, particularly with respect to the kinetics of the various processes. We have found that the nanoparticles decompose through a wide range of chloride concentrations and the decomposition follows first order kinetics at low concentrations and second order kinetics at high concentrations. In addition, the presence of  $\text{Cl}^-$  consistently and immediately sharpens the shape of the surface plasmon resonance suggesting that the first step in the decomposition mechanism is a fast adsorption onto the surface of the nanoparticle. Details of the decomposition mechanism will be presented.



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.





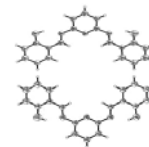
## MANIPULATION OF SILVER NANOPARTICLE MORPHOLOGY BY PHOTOEXCITATION

Tung Mai, David Pullman\*

*Department of Chemistry and Biochemistry, San Diego State University, San Diego, CA  
92182-1030*

Silver nanoparticles have remarkable optical properties, due predominantly to the intense absorption of visible light by surface plasmons. The extinction coefficient, for example, of 10 nm diameter silver nanoparticles in aqueous solution is  $\sim 109 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ , among the largest values for any known material. As a number of research groups have shown, the shape as well as size of the nanoparticles play a major role in determining the intensity and wavelength of light that is absorbed<sup>1</sup>. It is also known that exposing the nanoparticles to visible light can, in fact, alter their shape and size and therefore their optical characteristics<sup>2</sup>.

Since the morphology of silver nanoparticles can impact their effectiveness in optical device applications, we have begun to explore wavelength-specific photoexcitation as a means of controlling the properties of silver nanoclusters. We have constructed photoexcitation chambers utilizing high intensity LEDs that emit narrow bandwidth visible light. In our initial “proof-of-principle” experiments, yellow silver nanoparticle solutions ( $\lambda_{\text{max}}=394 \text{ nm}$ ) synthesized by adding sodium borohydride to a mixture of silver nitrate and sodium citrate, were exposed to violet, blue, green, and red LEDs. Within 24 hours, the green and blue LEDs caused the solutions to turn green or pink, respectively. UV/visible absorption spectroscopy shows an additional peak in their spectra beside the peak at 394 nm. In the green silver nanoparticles solution’s spectrum, the additional peak occurred at about 635 nm while in the pink case, the extra peak occurred at about 525 nm. The shift in wavelength is due to a change in size and shape of the nanoparticles, as shown by Transmission Electron Microscope (TEM) images.



Since the change in morphology is clearly driven by the absorption of light, one might reasonably expect that the violet LED, whose wavelength matches the absorption peak of the yellow nanocluster solution, would induce the greatest change. Remarkably, almost no change was observed. Likewise, almost no change was observed when the yellow solution was exposed to red light, which can be rationalized by the negligible absorption at the red LED wavelength. Interestingly, exposure of the green nanocluster solution to red light results in a nearly colorless solution, whose absorbance peaks at about 800 nm. We are currently determining the size and shape of the nanoclusters from the latter solution using the TEM and a recently-acquired Atomic Force Microscope.

### References

1. Wiley, B. J.; Im, S. H.; Li, Z.-Y.; McLellan, J.; Siekkinen, A.; Xia, Y.; *J. Phys. Chem. B*, 1996, 110, 15666.
2. Jin, R.; Cao, Y.W.; Mirkin, C.A.; Kelly, K.L.; Schatz, G.C.; Zheng, J.G.; *Science*, 2001, 294, 1901.



## FUNCIONALIZACIÓN DE NANOTUBOS DE CARBONO CON GRUPO ÉSTER

Juan Pablo Camarena<sup>1</sup>, Eduardo Rogel Hernández<sup>1</sup>, José Heriberto Espinoza Gómez<sup>1</sup>, Ratnasamy Somanathan<sup>\*2</sup>, Gerardo Aguirre<sup>2</sup>, Gabriel Alonso Núñez<sup>3</sup>, Hugo Tiznado<sup>3</sup>, Ernesto Vélez López<sup>1</sup>, Miguel Ávalos<sup>3</sup>, Antonio Díaz<sup>3</sup>

- (1) Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, UABC Ave. Calzada Universidad 14418 Tijuana, B. C., México C.P. 22390.  
(2) Centro de Graduados e Investigación, ITT, Blvd. Industrial, s/n, Mesa de Otay, Tijuana B. C., C.P. 22500.  
(3) Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM Km. 107 carretera Tijuana-Ensenada, Ensenada B.C., Apdo. postal 356, C.P. 22860

Desde el descubrimiento de los nanotubos de carbono, se han reportado diferentes métodos de funcionalización, el método más común es la oxidación con ácido sulfúrico y nítrico, por ultrasonido o reflujo que genera el grupo carboxilo. Este grupo es muy versátil, ya que, se puede convertir en ésteres, amidas, cloruros de acilo, etc.<sup>1</sup>. Las propiedades que adquieren los nanotubos funcionalizados permiten su investigación en el desarrollo de nuevos nanomateriales con aplicación en la nanotecnología<sup>2</sup>. La funcionalización de los nanotubos ha sido de gran interés en la ciencia de la nanotecnología por sus propiedades físicas y químicas, motivo por el cual se buscan mecanismos más eficientes que permitan la incorporación de grupos bajo condiciones no extremas<sup>3</sup>. En este trabajo de investigación, se llevó a cabo la adición de diazoacetato de tert-butilo en nanotubos de carbono de pared múltiple (MWCNTs), de acuerdo a la metodología reportada por Issacs Lyle<sup>4</sup>, como se muestra en la figura 1.

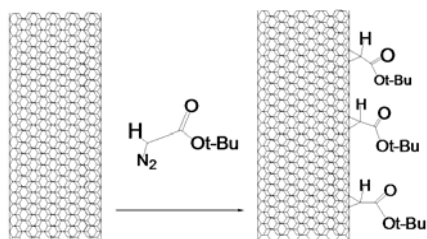


Figura 1. Esterificación de los MWCNTs

La caracterización de los MWCNT funcionalizados, se llevó a cabo por espectroscopia infrarroja (FT-IR) y microscopia electrónica de alta resolución (HRTEM y HRSEM), por IR se observó una banda de estiramiento a  $1725\text{ cm}^{-1}$  asignado al grupo carbonilo y por microscopia electrónica se observaron los cúmulos orgánicos adsorbidos en la superficie de los MWCNT. En la figura 2 se muestra una imagen de HRSEM donde se observa la adsorción del grupo éster sobre la pared del MWCNT. En base a estos resultados consideramos que la funcionalización de MWCNTs se llevó a cabo bajo condiciones no extremas como las reportadas por Y. Sun y colaboradores<sup>1</sup>.

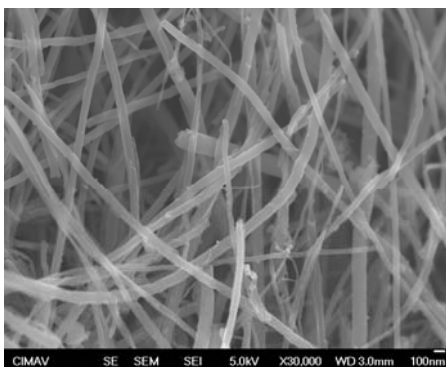


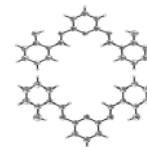
Figura 2. Imagen de HRSEM de la adsorción del éster sobre la superficie de MWCNT.

### Agradecimientos:

Se agradece el apoyo técnico de W. Antunes, C. Ornelas y al proyecto PAPIIT-IN102509-3

### Referencias

1. Sun, Y.; Fu, K.; Lin, Y.; Huang, W.; *Acc. Chem. Res.* 2002, 35, 1096
2. Balasubramanian, K.; Burghard, M.; *Small* 2005, 1, 2, 180
3. Koshio, A.; Yudasaka, M.; Zhang, M.; Iijima, S.; *Nano Lett.*, 2001, 1, 361
4. Lyle, I.; Diederich, F.; *Helvetica Chimica Acta*, 1993, 76, 2454



## SELF-ASSEMBLY FILM OF CHOLESTEROL MOLECULES ON THE Au (111): AN STM STUDY

Aristeo Segura<sup>1,2\*</sup> and Nikola Batina<sup>2</sup>

(1) *Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Autónoma Benito Juárez de Oaxaca, Av. Univ. S/N, Col. 5 Señores. C.P. 68120. Oaxaca, Oax., México.*

*ass@aristeosegura.com.mx*

(2) *Laboratorio de Nanotecnología e Ingeniería Molecular, Depto. de Química, UAM-I, Av. San Rafael Atlixco No. 186, Col. Vicentina, Del. Iztapalapa, C.P. 09340. México, D.F., México. bani@xanum.uam.mx*

Cholesterol is a molecule of special importance in medicine, biology and biochemistry, due to its role in the human body and relation to different diseases. In the past, the biologically important aggregates of cholesterol: LDL and HDL were extensively studied by different techniques. However, there is a considerable lack of information about molecular cholesterol and mechanisms of interaction with lipoproteins. One of specially interesting and primary task is a visualization of the individual molecule of cholesterol, which we believe could be achieved by modern high-resolution tool, as it is the Scanning Tunneling Microscopy (STM). However the lack of experience in respect to preparation and handling of biological molecules during the STM imaging is what makes this task rather difficult. Our study is based on development of new methodology for preparation and the STM visualization of monomolecular thick films of cholesterol consisted of individual molecules or cholesterol supramolecular aggregates. Films were prepared on the Au (111) as a substrate, using different solvents: water, methanol and ethylene glycol, at different concentration range. Imaging was carried out by STM (ex-situ, in air) in order to characterize the topographic properties of the cholesterol films, at the nano-scale level. In dependence of the preparation conditions, the STM images revealed cholesterol films in a form of closely packed monolayer, consisted from the individual molecules. Using the molecular modeling simulation programs, we were able to determinate exact position of the adsorbed molecule, with

hydrophilic part anchored to the flat gold substrate. Although, we observed that surface morphology of the cholesterol film depends on the used solvent, in all cases, large vacancies (defects) in the film were detected (Fig.1). Beside identification and visualization of the individual cholesterol molecule in the adsorbed film, we also successfully prepared and visualized molecular films of the cholesterol self-assemblies. A self-assembly unit consists of two cholesterol molecules, organized into very specific, quasi-quadratic boxes (0.68 nm x 0.68 nm) (Fig.2). Images and models, developed in our study, clearly revealed that supramolecular boxes of the cholesterol dimers are organized into monolayer thick film and connected via interactions between the electron rich cyclic hydrocarbons. In the center of each supramolecular box a quadratic cavity with atomic space dimensions: 0.278 nm x 0.278 nm, and depth of 0.173 nm, was found. Boxes are separated by insulating (electron poor) aliphatic chains. The obtained results are interesting from several points of view. First of all, we believe it is the first report of the successful visualization of the cholesterol film at molecular level. Note that imaging of lipids with STM technique is a rather difficult task. Formation and characterization of the cholesterol supramolecular assemblies (boxes) at the Au (111) substrate are very promising issue from the point of the surface functionalization and design of the nano-scale devices.

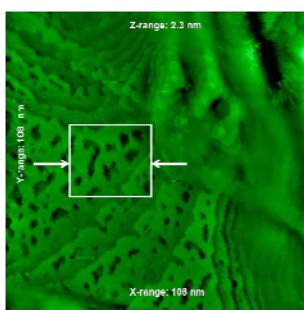


Figure 1.

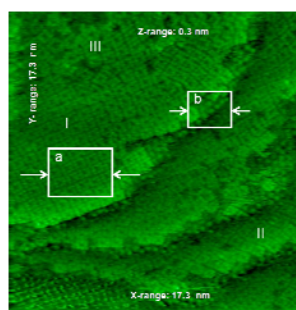
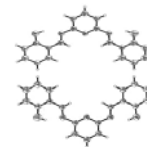


Figure 2.

STM revealed cholesterol monolayer film on the Au (111), prepared from  $2 \times 10^{-4}$  M methanol solution. High resolution images show individual molecules

Cholesterol self-assemblies in form of quadratic boxes on Au (111) substrate, prepared from  $8 \times 10^{-12}$  M methanol solution.



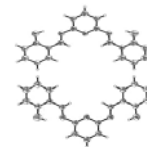
## **EFEECTO DE LA METFORMINA SOBRE EL CONTROL GLUCÉMICO POSTPRANDIAL EN PACIENTES MEXICANOS CON DM2**

Martha Rosales Aguilar<sup>1\*</sup>, José Manuel Cornejo Bravo<sup>2</sup>, Eugenia Gabriela Carrillo Cedillo<sup>2</sup>, Gerardo Cesar Díaz Trujillo<sup>2</sup>

*(1)Universidad Autónoma de Baja California, Facultad de Medicina Tijuana B.C. México  
Circuito del Árbol Ed.P-403, Tel: (664) 6074826, tessy61@gmail.com*

*(2)Universidad Autónoma de Baja California, FCQI, Tijuana B.C. México  
Calzada Universidad No.14418 Parque Industrial Internacional Tijuana B.C. CP 22390,  
Tel: (664) 9797500-01 Fax. (664) 6-82-27-90*

La diabetes mellitus tipo 2 (DM2) considerada como una enfermedad compleja que se caracteriza por un daño pancreático en la producción de la insulina causando hiperglucemia crónica que de no controlarse va originar una serie de complicaciones microvasculares en los ojos, el riñón y las extremidades inferiores y frecuentemente lesiones macrovasculares y coronarias<sup>1</sup>. El origen de este síndrome es probablemente la presencia de una resistencia a la insulina en el tejido adiposo, hepático y muscular<sup>2</sup>. La importancia del control glucémico en la prevención de las complicaciones microvasculares y cardiovasculares que son la principal causa de mortalidad en la DM23 Aunque el tratamiento inicial de la DM2 incluye medidas higiénico-dietéticas, la mayoría de los pacientes requieren intervención farmacológica para mantener los controles glucémicos adecuados. Los efectos de metformina son favorables en el peso corporal y en los lípidos del plasma sugieren a los científicos considerar la metformina como una terapia de primera línea en pacientes diabéticos obesos y cuando no es favorable el control glucémico se puede utilizar la terapia combinada de metformina con sulfonilureas<sup>2</sup>. El estudio UKPDS (United Kingdom Prospective Study por sus siglas en inglés) muestra que en pacientes con DM2 obesos, la elección de metformina ante el fracaso del tratamiento dietético conlleva mayores beneficios que riesgos, cuando se compara con el tratamiento con otros fármacos (sulfonilureas o insulina)<sup>2</sup>. Reduciendo el riesgo, no sólo de complicaciones microvasculares, sino también de las macrovasculares y la mortalidad.



El objetivo de este trabajo es determinar si hay un efecto benéfico en la reducción de la glucosa postprandial después de haber ingerido la dosis de metformina recomendada por el medico en pacientes con DM2.

En esta investigación 47 pacientes fueron estudiados con glucosas de ayuno y postprandial, ingiriendo su dosis recomendada de metformina (500 y 850 mg) se determinó la glucosa total en suero por espectrofotometría a 540 nm.

Variable	N	$\bar{X}$	S	EE
Glucosa ayuno	47	173.851	77.028	11.236
Glucosa postprandial	47	195.319	86.590	12.630
	47	-.21468	50.718	7.398

$t = -2.902$ ,  $gl=46$   $p(0.006)$ , paso la prueba de normalidad  $p>0.200$

Ecuación de regresión del control glucémico

Glucosa postprandial=  $0.915$  [glucosa de ayuno] +  $36.23$ ,  $r^2 = 0.662$ ,  $r = 0.814$

Se observa una diferencia significativa, lo que indica que se reduce la glucosa postprandial, después de ingerir la metformina.

## Referencias

1. Martín M.; Albarrán M.; Lumbreras M.; An Med Interna, 2004, 21, 450-5.
2. United Kingdom Prospective Study (UKPDS 34); Lancet 1998, 352, 854-65.
3. Morrish J.; Wang L.; Stevens K.; Fuller H; Keen H.; Diabetología 2001, 44, 14-22.

## SYNTHESIS OF N-HEXANOYL-N(4)- FENIL-2-IMIDAZOLINE AND EVALUATION OF ITS BIOLOGICAL ACTIVITY IN SERRATIA MARCESCENS

Alicia Reyes Arellano,<sup>1\*</sup> Mabel Montenegro Sustaita,<sup>1</sup> Alejandro Bucio Cano,<sup>1</sup> Javier Peralta Cruz,<sup>1</sup> Gerardo Aparicio Ozores,<sup>2</sup> Gerardo Aguirre<sup>3</sup>

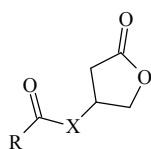
(1) *Departamento de Química Orgánica. Escuela Nacional de Ciencias Biológicas, IPN. Carpio y Plan de Ayala S/N. Colonia Santo Tomás. 11340; México, D. F. México.*

*E mail: areyesarellano@yahoo.com.mx.*

(2) *Departamento de Microbiología. Laboratorio de Microbiología Médica. Escuela Nacional de Ciencias Biológicas, IPN. 11340 México, D. F. México.*

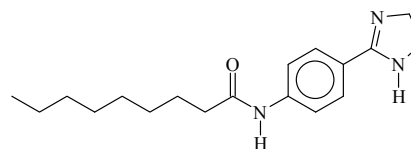
(3) *Centro de Graduados e Investigación, Instituto Tecnológico de Tijuana. Apartado Postal 1166, Tijuana, B. C. México.*

The cell to cell communication in gram-negative bacteria depends, among other factors on small molecules of easy spreading such as N-acyl homoserine lactones (AHL), which are related to virulence factors.<sup>1</sup> Hence it is important to design and synthesize bioisosters<sup>2</sup> of AHL. Since some time ago, we have worked on the design and the synthesis of these kind of compounds, and the synthesis of N-hexanoyl-N-4-phenyl-2-imidazoline, **1** is presented here as well as the evaluation of its activity in *Serratia marcescens*.



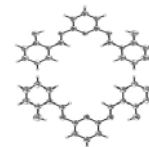
ACIL HOMOSERIN LACTONAS (AHL)

X = O ó N

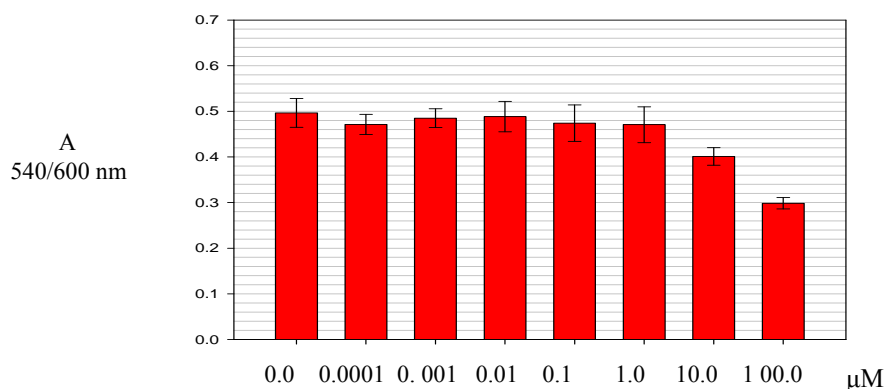


**1**

The compound **1** was synthesized from p-aminobenzonitrile in two steps with a total performance of 40 %. Imidazoline **1** was characterized by IR, <sup>1</sup>H NMR; <sup>13</sup>C NMR and MSHR. The biological evaluation on *Serratia marcescens* was carried out immediately afterwards. The biological activity of the compound **1** was measured, at eight different concentrations in the stump *Serratia marcescens* ATCC 8100, the sample was incubated for 17 hours at 22°C, subsequently prodigiosin pigment was extracted,



with ethanol/HCl at 4% and we proceeded to measure the absorbance through an ELISA's reader at 540 nm, these data allowed us to establish the concentration of prodigiosin contained in each compound concentration tested. All data were analyzed by ANOVA with the sigma Stat program; graphic 1 represents the mean of a population of 6 more less the standard error. Experiments are currently in process to synthesize other compounds as well as there are other measurements being made between 10 and 100  $\mu\text{M}$



## Conclusions

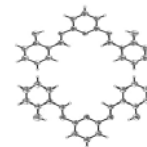
The N-hexanoyl-N-4-phenyl-2-imidazoline was synthesized for first time and characterized.

The activity in *Serratia marcescens* was evaluated, and it was found that N-hexanoyl-N-4-phenyl-2-imidazoline inhibits the production of prodigiosin and that the best activity is obtained at 100  $\mu\text{M}$ .

## References

1. Sackler, M. A.; Colloquim of de National Academy of Sciences. "Chemical communication in a post genomic world", 2003, Irvine C. A. USA
2. Patani, A. G.; LaVoie, J.; Bioisosterism. A rational approach in drug design. Chem., 1996, 96, 3147-3176. Miller, M. B.; Bassler, B. L.; Annu. Rev. Microbiol. 2001, 55, 165-199.





## ESTUDIO FITOQUÍMICO DE LA SOLANUM MARGINATUM SILVESTRE DEL ESTADO DE SINALOA

Raúl Padilla-Chávez,<sup>1</sup> Hernán Melendrés-Melendrés,<sup>1</sup> Eder Lugo-Medina,<sup>1\*</sup> M. Salvador Cota-Villegas,<sup>1</sup> Berenice Vargas-Coronel,<sup>2</sup> Domingo Madrigal-Peralta<sup>2</sup>

(1) *Departamento de Ingeniería Química, Instituto Tecnológico de Los Mochis, Blvd. Juan de Dios Batiz y 20 de Noviembre. Los Mochis, Sin. C.P. 81250.*

(2) *Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22500, México.*

La *Solanum marginatum* es nativa de África, pero naturalizada accidentalmente en México y en altitudes elevadas y en los Andes de Sudamérica. En México se ha localizado en el Distrito Federal y los estados de, Hidalgo, Estado de México, Michoacán, Querétaro, Veracruz y Sinaloa. También se ha localizado en el sur de Estados Unidos. Se caracteriza por ser una planta medicinal ya que sus hojas y frutos molidos en agua se recomiendan para aliviar la reuma, también se utiliza como cicatrizante de heridas y úlceras, contra infecciones en la piel, diarrea, bronquitis y tos. Los lugareños del norte de Sinaloa le atribuyen a esta planta que sirve como adelgazante, de ahí su nombre “sacamanteca”.

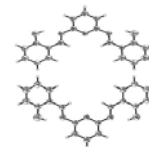
En el trabajo se reporta el análisis de la raíz de la *Solanum marginatum*, haciendo una extracción con metanol en un equipo Soxhlet, se realizan pruebas preliminares coloridas y posteriormente cromatografía en columna para separar el mayor número de fracciones, y estas se caracterizaron en un cromatógrafo de gases con detector de masas.

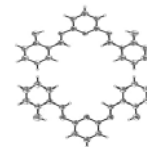
### Referencias

1. Sánchez, O.; “La flora en el valle de México”, 1980, 6ta edición, México.
2. <http://www.conabio.gob.mx/malezasdemexico/solanaceae/solanum-marginatum/fichas/pagina1.htm>



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.





## RECEPTORES TIPO “BIS-UREA” PARA EL RECONOCIMIENTO DE ANIONES: POSIBLES QUIMIOSENSORES ÓPTICOS

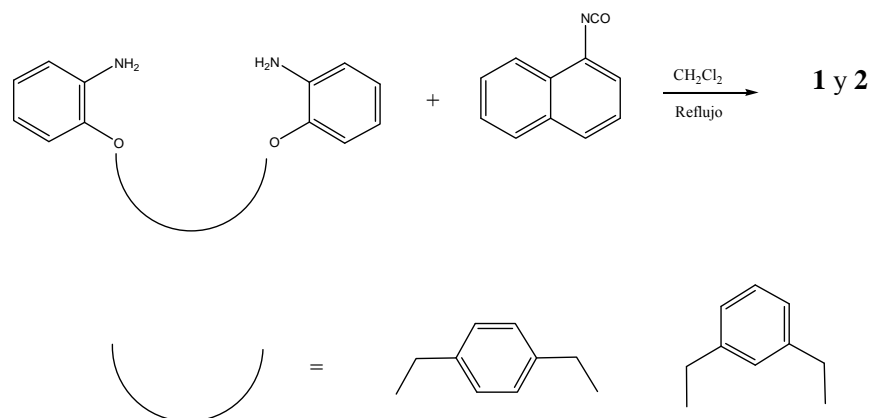
Erika Pérez López,<sup>1</sup> Ramón Moreno-Corral,<sup>1</sup> Hisila Santacruz-Ortega,<sup>1</sup> Herbert Höpfl<sup>2</sup> y Karen Ochoa Lara.<sup>1\*</sup>

- (1) *Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora 83000, Hermosillo, Sonora, México. E-mail: karenol@polimeros.uson.mx*  
(2) *Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, 6221, Cuernavaca, Morelos, México.*

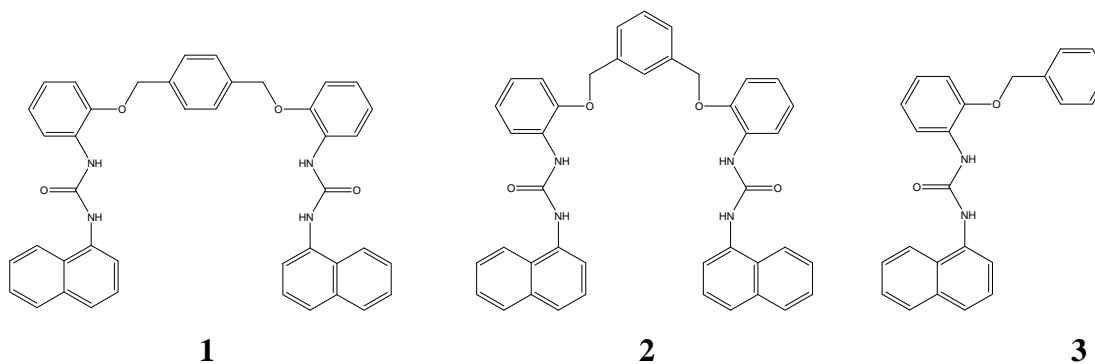
En los últimos años, se ha incrementado el interés por el diseño y síntesis de moléculas con la habilidad de reconocer selectivamente y sentir a huéspedes neutros y cargados. Al respecto, particularmente los aniones han atraído la atención de múltiples investigaciones, ya que estas especies juegan un papel muy importante en los procesos químicos, bioquímicos y ambientales.<sup>1</sup> Tomando en cuenta lo antes mencionado, nuestro grupo de investigación ha realizado algunos trabajos encaminados a la síntesis de receptores para el reconocimiento molecular de aniones.<sup>2</sup> Cabe mencionar que algunos de estos compuestos incluían en sus estructuras unidades de antraquinona y acridina como cromóforos y fluoróforos, con la intención de sentir el proceso de complejación.<sup>2a</sup>

En este trabajo se presenta la síntesis (Esquema 1) y caracterización de dos receptores tipo bis-urea con unidades de naftaleno (receptores **1** y **2**, Figura 1), con el propósito de ser evaluados como quimiosensores de aniones en disolución. Para fines comparativos, también fue sintetizado el receptor monocromofórico **3**. Los compuestos obtenidos han sido caracterizados por técnicas convencionales tales como IR, RMN de <sup>1</sup>H y FAB-MS. Por otro lado, se incluye además la caracterización en disolución de los compuestos en disolventes tales como CHCl<sub>3</sub>, MeCN y EtOH, así como los estudios de complejación en CHCl<sub>3</sub>, dirigidos al reconocimiento de aniones orgánicos e inorgánicos de importancia biológica tales como acetato, fosfato y sulfato, por las técnicas de UV/Vis, fluorescencia y RMN de <sup>1</sup>H. Los resultados obtenidos hasta el momento mediante estos estudios, indican que ambos receptores forman complejos estables con los aniones

probados. Al respecto, destaca el hecho de que los receptores son selectivos por ciertas especies y que durante el proceso de complejación, los compuestos observan respuestas espectrales significativas, lo cual los hace candidatos prometedores como quimiosensores ópticos.



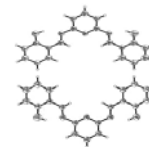
**Esquema 1.** Método Sintético para la Obtención de **1** y **2**.



**Figura 1.** Estructura de los receptores **1-3**

### Referencias

1. Bianchi, A., Bowman-James, K., García-España, E., Eds.; Wiley: New York, 1997.
2. Prados, P., Quesada, R. *Supramol. Chem.* 2008, 20 (1-2), 201-216.
3. a) Moreno-Corral, R. A.; Lara, K. O. *Supramol. Chem.* 2008, 20 (4), 427-435. b) Lara, K. O.; Godoy-Alcántar, C.; Eliseev, A. V.; Yatsimirsky, A. K. *Org. Biomol. Chem.* 2004, 2, 1712-1718. c) Lara, K. O.; Godoy-Alcántar, C.; Rivera, I. L.; Eliseev, A. V.; Yatsimirsky, A. K. *J. Phys. Org. Chem.* 2001, 14, 453-462.



## ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES FLUORESCENTES DE 1,3-OXAZOLIDIN-2-ONAS ENANTIOPURAS Y SU INTERACCIÓN CON IONES METÁLICOS

Adrián Ochoa Terán\*,<sup>1</sup> Jorge Luis Gabayet Domínguez,<sup>2</sup> Georgina E. Pina Luis,<sup>1</sup> Ignacio A. Rivero Espejel.<sup>1</sup>

- (1) Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22500, México. E-mail: aochot.itt@gmail.com  
(2) Depto. de Ings. Química y Bioquímica del ITT. Calzada Tecnológico s/n Fracc. Tomás Aquino, Tijuana B.C., 22414. México.

Existe un grupo de compuestos tipo 1,3-oxazolidin-2-onas 5-sustituidas como la Linzolidina (1) (distribuida comercialmente como Zyvox) y Eperozolidina (2) que son una nueva clase de agentes antibacteriales con actividad potente frente a ciertos patógenos anaerobios y gram-positivos<sup>1</sup>, la respuesta antibacteriana de estos compuestos se encuentra en la actividad inhibitoria de la síntesis de proteínas.<sup>1</sup> Mediante el marcaje con diversos grupos fluorescentes se ha determinado que la actividad bacteriostática de estos compuestos se realiza en los ribosomas<sup>2</sup>

Recientemente, se ha reportado la síntesis de 1,3-oxazolidin-2-onas enantiopuras (5) a partir de la adición estereoselectiva de cianuro de trimetilsilano (TMSCN) a alfa-dibencilamino aldehídos derivados de  $\alpha$ -aminoácidos quirales, seguido de una reducción y ciclación del correspondiente aminolacohol.<sup>3</sup> El objetivo de este trabajo es estudiar las propiedades fluorescentes de estos nuevos compuestos, así como su posible interacción con iones metálicos de diversa naturaleza.

Las cinco dibencilamino oxazolidinonas que se sintetizaron a partir de alfa-aminoácidos quirales presentaron espectros de fluorescencia con bandas de excitación entre los 260 a 280 nm y de emisión entre los 290 a 320 nm empleando metanol como solvente. En la Figura 1 se muestran los espectros de fluorescencia para cada uno de éstos a una concentración de  $1 \times 10^{-3}$  M.

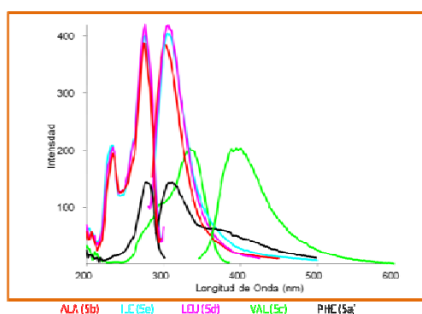
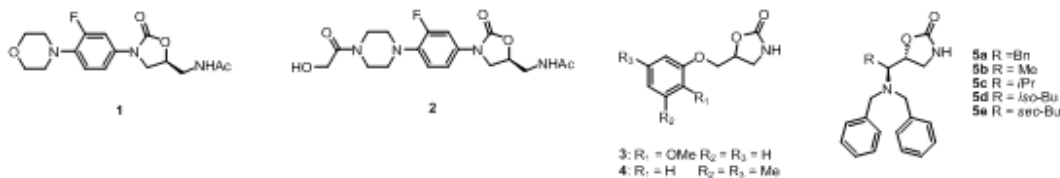
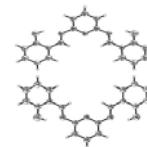


Figura 1. Espectros de fluorescencia de las oxazolidinonas 5a-5d medidos a una concentración  $1 \times 10^{-3}$  M en metanol.

Para determinar la interacción de las oxazolidinonas con iones metálicos se prepararon mezclas de cada uno de los compuestos (ligandos) con sales metálicas de  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Cs}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Ba}^{2+}$  y  $\text{Ni}^{2+}$  y  $\text{Cu}^{2+}$  en distintas proporciones manteniendo la concentración final del ligando constante a  $1 \times 10^{-4}$  M. Para los iones metálicos alcalino y alcalino térreos de menor tamaño como  $\text{Li}^+$  o  $\text{Na}^+$  no se observaron cambios significativos en las intensidades de las bandas de emisión. Sin embargo, con iones voluminosos como el  $\text{Cs}^+$  y  $\text{Ba}^{2+}$  así como con los metales de transición se presentó una mayor respuesta. Otro aspecto importante, es que en proporciones de 0.25 hasta 0.75 equivalentes del metal con respecto a un equivalente del ligando se observa una nueva banda de emisión desplazada a mayor longitud de onda (310 nm) con mayor intensidad de fluorescencia. La aparición de esta nueva banda puede explicarse por la formación de agregados entre el ión metálico y el ligando que solo se observa en proporciones específicas.

## Referencias

1. (a) Evans, D. A.; *Aldrichimica Acta* 1982, 15, 23. (b) Ager, D. J.; Prakash, I.; Schaad, D. R.; *Chem. Rev.* 1996, 96, 835. (c) Ager, D. J.; Prakash, I.; Schaad, D. R. *Aldrichimica Acta* 1997, 30, 3. (d) Hintermann, T.; Seebach, D. H.; *Chim. Acta* 1998, 81, 2093. (e) Fukuzawa, S.; Matsuzawa, H.; Yoshimitsu, S. J.; *Org. Chem.* 2000, 65, 1702.
2. Tang, J. S.; Verkade, J. G.; *J. Org. Chem.* 1996, 61, 8750.
3. Ochoa-Terán, A.; Rivero, I. A.; *ARKIVOC* 2008, xiv, 330.



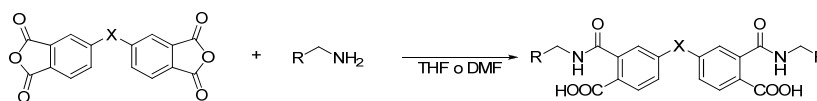
## SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE UNA BIBLIOTECA DE COMPUESTOS TIPO BISÁCIDO BENZOICO Y BISÁCIDO NAFTOICO

Marisela Martínez Quiroz, Adrián Ochoa Terán,\* Georgina Pina-Luis

*Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22000, México. E-mail: aochot.itt@gmail.com*

La síntesis de compuestos orgánicos a partir de anhídridos es un tema de interés actual en el área ambiental y biológica. Con este fin, se han desarrollado nuevos quimiosensores fluorescentes que presentan reconocidas ventajas para el desarrollo de sistemas selectivos y sensibles, tanto en solución como en fase sólida.<sup>1-3</sup> Una estrategia novedosa en el diseño de quimiosensores fluorescentes de metales es la unión de dos fluoróforos aromáticos idénticos a través de una cadena de interconexión. La simple interacción de estos compuestos con metales o con iones hidronio, puede modular la distancia o relación geométrica existente entre los grupos aromáticos y favorecer un cambio en las señales espectroscópicas. En el presente trabajo se realizó la síntesis de una biblioteca de compuestos bisácidos benzoico y naftoico constituidos por unidades receptoras con grupos amida y unidades fluorofóricas unidas por una cadena de interconexión central. Los grupos ácidos se introdujeron en los ligandos con el objetivo de obtener receptores que presenten respuesta en solución acuosa y que sean sensibles al pH, lo que puede facilitar su posterior aplicación en sistemas biológicos y ambientales.

Los derivados de ácido benzoico y naftoico se prepararon haciendo reaccionar el dianhídrido correspondiente con una amina primaria de acuerdo a la metodología que se muestra en el esquema de síntesis. La caracterización de estos compuestos se realizó mediante espectroscopia de infrarrojo, resonancia magnética nuclear y espectroscopia de fluorescencia. Se estudió el comportamiento fluorescente de los compuestos sintetizados a diferentes concentraciones obteniendo los espectros de excitación y emisión.



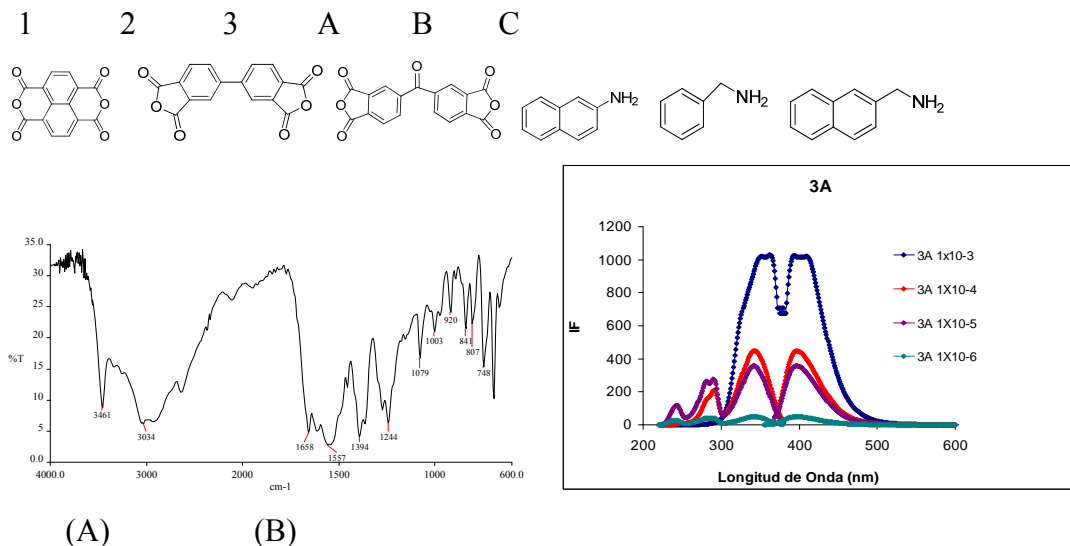


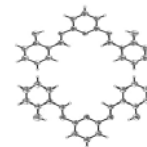
Figura 1. (A) Espectro de IR del derivado **3B**, (B) Espectro de fluorescencia del derivado **3A** a diferente concentración.

Se observa en todos los derivados un desplazamiento de la banda de excitación y de emisión hacia mayores longitudes de onda a medida que aumenta la concentración ( $10^{-6}$  M- $10^{-3}$  M) y una pérdida de la linealidad a medida que aumenta la concentración del ligando, debido a un efecto de autoabsorción. Se corroboró que los derivados con dos unidades de benceno, presentan menor fluorescencia que los derivados bisnaftaleno. En conclusión se sintetizaron nueve derivados del tipo bisácidos y se estudiaron sus propiedades fluorescentes variando la concentración del ligando encontrando características fluorescentes interesantes.

### Referencias

1. Vélez, E; Pina, G; Suárez, J. L.; Rivero, I. A.; Díaz, M. E.; Sensors and Actuators B, 2003, 90, 256-263.
2. González, T.; Pina, G.; Rivero, I. A.; J. Comb. Chem. 2005, 6, 46-53.
3. Pina, G.; Ochoa, A.; Rivero, I. A.; J. Comb. Chem. 2009, 11, 83-90.





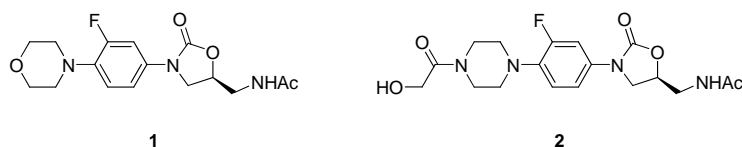
## SÍNTESIS DE 1,3-OXAZOLIDIN-2-ONAS ENANTIOPURAS: ADICIÓN ESTEREOSELECTIVA TMSCN A ALFA-DIBENCILAMINO ALDEHÍDOS QUIRALES

Sandy Denisse Ramírez Zatarain<sup>1</sup> y Adrián Ochoa Terán<sup>2\*</sup>

(1) Facultad de Ciencias Químico Biológicas de la Universidad Autónoma de Sinaloa. Blvd. de las Américas, Ciudad Universitaria, C.P. 80040. Culiacán, Sinaloa, México.

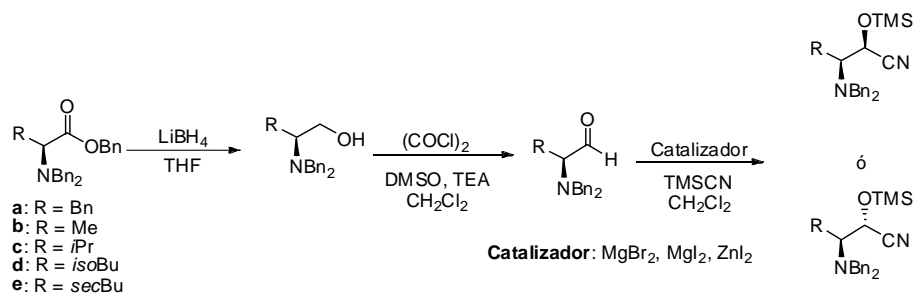
(2) Centro de Graduados e Investigación. Instituto Tecnológico de Tijuana. Apdo. Postal 1166. Tijuana, B. C. 22500, México. E-mail: aochoat.itt@gmail.com

Las 1,3-oxazolidin-onas son compuestos que contienen un anillo de cinco miembros con dos heteroátomos y han despertado un gran interés debido a la actividad farmacológica que presentan.<sup>1</sup> Tal es el caso de la linezolida (**1**) y eperozolida (**2**), una nueva clase de agentes antibacterianos sintéticos que son activos contra organismos gram positivos incluyendo cepas resistentes de estafilococos meticilino-resistentes y enterococos vancomicina-resistentes. Estructuralmente, la molécula de linezolida y otras 1,3-oxazolidin-2-onas farmacológicamente activas contienen un solo centro quiral.<sup>2</sup> Se ha propuesto desarrollar un método que permita sintetizar análogos de linezolida que contengan dos centros quirales y evaluar su efecto sobre la actividad antimicrobiana. Particularmente, en este trabajo se estudió el efecto de varios catalizadores sobre la estereoselectividad en la creación de nuevos centros quirales.



Se realizaron una serie de reacciones empleando aminoésteres quirales dibencilados derivados de alfa-amino ácidos como materiales de partida. Estos amino ésteres fueron reducidos para formar un aminoalcohol, el cual al realizarle una oxidación bajo las condiciones de Swern permitió obtener el correspondiente aminoaldehído quiral. Posteriormente se llevó a cabo una reacción de adición de cianuro de trimetilsilano (TMSCN) empleando diferentes catalizadores determinando la estereoquímica y los ed de

los productos obtenidos a través de resonancia magnética nuclear (RMN), los catalizadores empleados fueron  $MgBr_2$ ,  $MgI_2$  y  $ZnI_2$ . Los resultados se muestran en la siguiente tabla.

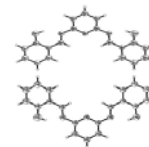


R	Cat	% rend.	sin:anti	R	Cat	% rend.	sin:anti
Bn	$ZnI_2$	99	1:>99	<i>i</i> Pr	$ZnI_2$	82	1:>99
Bn	$MgBr_2$	98	70:30	<i>i</i> Pr	$MgBr_2$	97	55:45
Bn	$MgI_2$	94	38:62	<i>iso</i> Bu	$ZnI_2$	94	1:>99
Me	$ZnI_2$	97	1:92	<i>sec</i> Bu	$ZnI_2$	72	1:>99
Me	$MgBr_2$	91	34:66	<i>sec</i> Bu	$MgI_2$	96	53:47

Una vez obtenido el producto de adición, se realizó una reacción de reducción con el fin de obtener un aminoalcohol y a partir de éste se llevó a cabo una reacción de ciclación obteniendo las 1,3-oxazolidin-2-onas correspondientes. A través de la metodología propuesta se logró la obtención de 1,3-oxazolidin-onas con dos centros quirales en su estructura. También se evaluó el efecto de nuevos catalizadores sobre la estereoselectividad en la reacción de adición de TMSCN sobre alfa-dibencilamino aldehídos quirales y se determinó que las sales de yoduro inducen selectividad anti mientras que el bromuro induce selectividad sin.

## Referencias

- Negwer, M.; Scharnow, H. G.; Organic Chemical Drugs and Their Synonyms, 8th Edn.; Wiley-VCH: Weinheim, 2001, 2760.
- (a) Brickner, S. J.; Barbachyn, M. R.; Hutchinson, D. K.; Manninen, P. R.; J. Med. Chem. 2008, 51, 1981. (b) Perry, C. M.; Jarvis, B. Drugs 2001, 61, 525.



## ÍNDICE

<b>A</b>	
Aguilar Martínez, M.	93
Aguirre, Gerardo	33, 51, 57, 157, 159, 161, 209, 215
Alexander-Katz, R.	133
Almaral-Sánchez, J. L.	115
Álvarez-Sánchez, J.	127
Aparicio Ozores, G.	215
Arndt, K. F.	123
Ávalos, M.	209

<b>B</b>	
Balgavy, P.	99
Batina, N.	211
Beristain Ortiz, G.	109, 111
Bernès, S.	159
Beyer, J.	175
Bojórquez-Zavala, E. L.	115
Bucio Cano, A.	215
Bustos-Figueroa, L. A.	197
Butrón Vargas, E. J.	61

<b>C</b>	
Cadena-Ramírez, A.	73
Calvillo Castorena, M. P.	141
Camarena, J. P.	209
Campos-Alvarez, J.	87
Cao, Z.	139
Carrillo Cedillo, E. G.	213
Castillón Barraza, F.	153
Castro-Contreras, R.	185
Cerda Sumbarda, Y. D.	161
Chávez, D.	51, 57
Cleto González, R. F.	67
Cooksy, A. L.	101
Córdova Guerrero, I.	141, 143
Cornejo Bravo, J. M.	71, 121, 123, 127, 131, 213
Cortes, N. A.	33, 129, 193
Cortes, S.	155, 167
Cota-Villegas, M. S.	217
Cuan, A.	103

<b>D</b>	
Del Ángel-Sánchez, T. J.	65
Díaz Trujillo, G. C.	213

Díaz, A.	209
Díaz, M. E.	37
DiPasquale, A. G.	155
Dzakuma, S.	25

<b>E</b>	
Escobar-Guerrero, V.	73
Escobedo Robledo, J. T.	45
Espinoza-Gómez, J. H.	7, 69, 209
Espinoza, M. G.	205
Espinoza-Beltran, F. J.	163, 165
Espinoza-Salgado, S.	125
Estopare, V.	201
Evangelista H., V.	153

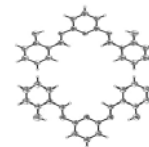
<b>F</b>	
Fee, D.	175
Félix Navarro, R. M.	7, 39, 135, 177, 183, 185, 191
Fernández, A.	37
Flores-Castro, K.	163, 165
Frank, C. W.	127

<b>G</b>	
Gabayet Domínguez, J. L.	221
Gálvez Ruiz, J. C.	93, 151
García, J. J.	31
García-Alamilla, R.	63, 65, 179, 181
García-Hernández, E.	119, 125, 197
Gerwick, W.	139
Golen, J.	167
Gómez López, I. G.	177
Gómez Pineda, L. E.	103
Gonzalez, I.	67, 71, 73
Gonzalez, J. G.	33
González-Bravo, F. J.	21
Grotjahn, D. B.	9, 155, 167
Guerrero Rosales, L.	43
Guerrero, V.	51
Guerrero-Gutiérrez, O.	71
Guilbert-García, E.	119

<b>H</b>	
Hernandez, E.	37, 81, 111
Hernández-Campos, F. J.	125



<b>H</b>	
Hernandez-Garcia, L.	25
Hernández-Landaverde, M. A.	163, 165
Herrera Rodríguez, F.	171
Hinks, M.	203
Höpfl, H.	47, 91, 219

<b>I</b>	
Ibarra, A. F.	151
Iglesias, A.	31

<b>J</b>	
Jouikov, V.	135

<b>K</b>	
Klacsova, M.	99
Koros, W. J.	19
Kottke, M.	175
Kucerka, N.	99

<b>L</b>	
Labastida-Núñez, I.	67
Landeros, B.	143
Lev, D. A.	155
Licea-Claverie, A.	121, 123, 127, 129, 131, 133, 135, 177, 199
Lin Ho, S. W.	7, 69, 71, 191
Lima-Ballesteros, H. M.	179, 181
López Cuadras, C. A.	147
López González, S. K.	193
López López, J. R.	183
López, J. L.	7
López-García, F. J.	191
Lugo Medina, E.	115, 217

<b>M</b>	
Machi Lara, L.	17, 91
Madrigal Peralta, D.	55, 147, 149, 217
Mai, T.	207
Maldonado Mendoza, C.	169
Maldonado, C. C.	97
Malibrán-Domínguez, M.	63
Manzanares Guevara, L. A.	161
Martínez Quiroz, M.	77, 223
Martínez Rubio, C. A.	115,
Meléndrez-Meléndrez, H.	217
Mendoza, M. A.	187
Mendoza-Espinosa, M.	163, 165
Moctezuma-Velázquez, E.	63, 65

Montenegro Sustaita, M.	215
Moore, C.	155, 167
Morales Cuevas, J. B.	183
Morales-Morales, D.	13, 51
Moreno Corral, R.	91, 219
Moreno-Armenta, M. G.	97, 169, 171
Murillo-Rivera, B.	67
Murray, T. F.	139

<b>N</b>	
Narváez Garayzar, O. F.	161
Navarrete Guzman, J.	147
Navarro-Vega, P.	199
Neuburger, M.	175
Núñez, G. A.	39, 157, 209

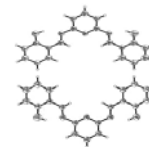
<b>O</b>	
Ochoa Lara, K.	47, 91, 219
Ochoa Terán, A.	43, 45, 49, 77, 81, 221, 223, 225
Olayo, R.	23
Olivas, A.	115
Olivo, H. F.	25
Oropeza Guzmán, M. T.	61, 67, 71, 107, 109, 111, 141
Osuna Galindo, V. C.	45, 53

<b>P</b>	
Padilla-Chávez, R.	217
Parra-Hake, M.	33, 51, 79
Peralta Cruz, J.	215
Pereira-Badilla, A.	139
Pérez Jara, U.	187
Pérez López, E.	219
Pérez Sicarios, S.	7, 183, 185
Pérez-García, M. R.	107
Peterson, B.	205
Peterson, K. I.	205
Petranovskii, V.	153
Picos-Corrales, L. A.	123, 127
Pina Luis, G.	77, 79, 81, 103, 193, 221, 223
Ponce-Vargas, S. M.	131
Puente-Hernández, R.	85
Pullman, D.	175, 201, 203, 205, 207

<b>Q</b>	
Quintana, J. M.	171
Quiroa-Montalván, C. M.	79



<b>R</b>	
Ramírez Zatarain, S. D.	225
Ramírez-Cardona, M.	163, 165
Rancudo, K.	155
Rangel-Vazquez, N. A.	119
Reyes Arellano, A.	215
Reyes Márquez, V.	47
Reyes, H.	57
Reynoso, E. A.	37, 39, 111
Rheingold, A.	155, 167
Rivero, I. A.	37, 43, 45, 49, 53, 81, 111, 221
Rocha-Alonzo, F.	51
Rodríguez Iznaga, I.	153
Rogel-Hernández, E.	69, 209
Romero-Gándara, A.	159
Romero-Ortega, M.	25
Rosales Aguilar, M.	213
Rubio-Rosas, E.	119, 197
<b>S</b>	
Salgado-Delgado, R.,	119, 125, 197
Sámamo, E. C.	117
Sánchez, M.	91
Sánchez, R.	143
Sandoval-Robles, G.	63, 65
Sandoval-Robles, J. G.	179, 181
Santacruz Ortega, H.	79, 219
Sarmiento-Sánchez, J. I.	49
Segura, A.	211
Serrano Medina, A.	121
Servín-Nájera, F. A.	157
Simakov, A.	153
Somantahan, R.	33, 57, 157, 159, 161, 193, 201, 209
Sánchez-Castro, M. E.	173
Sánchez-Vazquez, M.	173
Soria-Mercado, I. E.	139
Soto Álvarez, F.	187
Soto, G.	189
Soto-Gomez, W.	85, 87, 195
Specht, Z.	155, 167
Sumbarda-Ramos, E.	67, 71
<b>T</b>	
Tamariz, J.	5
Teixeira, J.	99
Teniente-Silva, C.	179, 181
Tiburcio, J.	47
Tiznado, H.	189, 209
Tordoff, A. Luis	25
Torres-López, A.	195
Tran, H.	155
<b>U</b>	
Uhrikova, D.	99
Urquijo Ángel, A. F.	177
<b>V</b>	
van Niekerk, C.	155, 167
Vargas Coronel, B.	55, 149, 217
Vargas Durazo, J. T.	151
Vargas-Gallarza, Z.	119, 125, 197
Veja-Rios, A.	133, 199
Velasco-Santos, C.	15, 159
Vélez López, J. E.	209
<b>X</b>	
Xu, D.	101
<b>Z</b>	
Zaera, F.	3
Zajac, P.	99, 101
Zizumbo Lopez, A.	133, 135, 177, 199



*VII Simposio Internacional: Investigación Química en la Frontera*  
17, 18 y 19 de noviembre de 2009, Tijuana, B. C.

