



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

Unidad Iztapalapa

DQ.00117.2024

Mayo 08, 2024

Dr. Román Linares Romero
Presidente del Consejo Divisional
de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería
PRESENTE



A través de este medio le solicito incluir en el orden del día de la próxima sesión del Consejo Divisional el informe sabático del Profesor Andrés Cedillo Ortiz, del Área Académica de Físicoquímica Teórica del Departamento de Química. Dicho informe sabático comprende el período de 16 meses a partir del 10 de octubre de 2022.

Agradezco su atención a esta solicitud y le envío un cordial saludo.

Atentamente
Casa abierta al tiempo



Dr. Jorge Garza Olguín
Jefe del Departamento de Química

UNIDAD IZTAPALAPA

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Departamento de Química

Ave. Ferrocarril San Rafael Atlixco 186. Col. Leyes de Reforma 1A Sección. Iztapalapa 09310. CdMx, México.

Edificio R primer piso. Oficina R-118. Apartado Postal 55-534. Tel: [REDACTED]

E-mail: [REDACTED]@izt.uam.mx. <http://www.quimica.izt.uam.mx>



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

CONSEJO DIVISIONAL DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERIA

INFORME DE PERÍODO SABÁTICO

DATOS GENERALES

Nombre del profesor: JOSE ANDRES CEDILLO ORTIZ N° empleado: 15105
Departamento: QUIMICA Área: FISICOQUIMICA TEORICA
Teléfono particular: [REDACTED] Extensión UAM-I: [REDACTED] E-mail: [REDACTED]@xanum.uam.mx

DATOS DEL PERÍODO SABÁTICO SOLICITADO

N° meses solicitados: 16 Fecha de inicio: 10/Oct/22 Fecha de terminación: 9/Abr/24
Institución donde se realizará: Universidad de Oviedo; Vilniaus Universitetas
Depto., Laboratorio, etc.: Departamento de Química Física y Analítica; Institute of Chemical Physics
Domicilio de la institución: Oviedo, España; Vilnius, Lituania
Teléfono: _____ Fax: _____ E-mail: [REDACTED]@xanum.uam.mx

OBJETIVOS DEL PERÍODO SABÁTICO

Continuar con mis líneas de investigación relacionadas con el estudio y el diseño de criterios para predecir la reactividad química.
Fortalecer la colaboración con grupos de investigación en instituciones del extranjero.

METAS ALCANZADAS EN EL PERÍODO SABÁTICO

- | | | |
|---|---|---|
| <input type="checkbox"/> Memorias in extenso en libro de resúmenes* | <input checked="" type="checkbox"/> Artículos de investigación en revista indexada* | <input type="checkbox"/> Presentaciones en congresos |
| <input checked="" type="checkbox"/> Libros o capítulos de libros | <input type="checkbox"/> Grado | <input type="checkbox"/> % Avance de estudios de posgrado |
| <input checked="" type="checkbox"/> Otros (especifique): <u>2 Manuscritos en preparación y uno más enviado.</u> | | |

* Indicar en anexo si se trata de trabajo publicado, aceptado o sometido

TIPO DE ACTIVIDADES ACADÉMICAS DESARROLLADAS

(Indique aquellas relacionadas con las actividades desarrolladas)

- | | | |
|--|--|--|
| <input checked="" type="checkbox"/> Investigación | <input checked="" type="checkbox"/> Docencia | <input checked="" type="checkbox"/> Difusión |
| <input type="checkbox"/> Formación académica | <input type="checkbox"/> Formación profesional | <input type="checkbox"/> Entrenamiento técnico |
| <input checked="" type="checkbox"/> Otros (especifique): <u>Formación de recursos humanos.</u> | | |

RESUMEN DEL PLAN DE ACTIVIDADES ACADÉMICAS DESARROLLADAS

(El llenado de esta sección no sustituye el informe detallado de actividades)

La estancias en las instituciones propuestas se completaron con éxito y se desarrollaron actividades de investigación en temas afines. Los resultados de estas actividades conducen a la escritura de un manuscrito que está en la fase final de revisión y en el análisis de los resultados obtenidos para la escritura de otro. Como parte de mis líneas de investigación, se publicó un artículo, otro está sometido para su publicación (con la participación de un alumno de licenciatura de la UAM) y uno más está en escritura. Se publicó un libro de texto. Un alumno concluyó su servicio social y pronto culminará su proyecto terminal.

PARA USO DEL JEFE DE DEPARTAMENTO

Después de haber evaluado el informe detallado de actividades del período sabático del interesado según los lineamientos establecidos para tal efecto; informo al Consejo Divisional que:

- Los objetivos SE cumplieron satisfactoriamente
- Los objetivos SE cumplieron parcialmente
- Los objetivos NO se cumplieron
- NO se cumplió el propósito del sabático


Firma del Jefe de Departamento

08/05/2024
Fecha

PARA USO DEL CONSEJO DIVISIONAL

El Consejo Divisional, en su Sesión No. _____ del _____ sobre el Período sabático del interesado acordó que:

- Los objetivos SE cumplieron satisfactoriamente
- Los objetivos SE cumplieron parcialmente
- Los objetivos NO se cumplieron
- NO se cumplió el propósito del sabático

Secretario del Consejo Divisional

*Además de este formato-resumen, el interesado deberá entregar su Informe detallado de actividades junto con la documentación probatoria correspondiente.

PLAN DE ACTIVIDADES ACADÉMICAS

PERÍODO SABÁTICO 2022-2023

Fechas de inicio y terminación.

Período sabático por 12 meses, del 10 de octubre de 2022 al 9 de octubre de 2023.

Objetivos a desarrollar.

Iniciar un proyecto de investigación en colaboración con el Prof. Ángel Martín Pendás, de la Facultad de Química en la Universidad de Oviedo (España).

Justificación.

El Prof. Martín tiene gran experiencia en el análisis de la función de onda y sus propiedades en subregiones moleculares. Este tipo de análisis ha generado distintas herramientas para el análisis de la reactividad química de las moléculas. El trabajo realizado en la Universidad de Oviedo encuentra una gran concordancia con las líneas de investigación asociadas a la predicción de la reactividad química que he desarrollado en la UAM-Iztapalapa. Por esta razón, la colaboración de ambos grupos permitirá conjuntar la experiencia en la búsqueda de respuesta en un problema de interés común.

Descripción de las actividades académicas.

Iniciar un proyecto de investigación en el campo de estructura electrónica y la reactividad química de cadenas de fragmentos iguales (del tipo de los homopolímeros) y tratar de describir a la molécula en términos de sus fragmentos.

Comparar diferentes metodologías para la partición de una especie química en fragmentos moleculares.

Analizar la transferibilidad de los fragmentos obtenidos con las metodología de fragmentación.

Proponer esquemas de aditividad para las propiedades moleculares basadas en las características electrónicas de los fragmentos. Inicialmente, en el caso de los fragmentos con baja polaridad.

Participar en eventos en el campo de la estructura electrónica.

Continuar con el desarrollo de las líneas de investigación del cuerpo académico "Desarrollo y aplicaciones de la teoría de funcionales de la densidad".

Vinculación con los planes y programas académicos de la Universidad.

Las actividades descritas anteriormente forman parte de las líneas de investigación de mi cuerpo académico.

Lugar donde se desarrollará.

Universidad de Oviedo (España).

Resultados previstos.

Identificar las condiciones que permiten generar fragmentos moleculares transferibles.

Contar con esquemas aditivos para las propiedades moleculares. En esta etapa, el análisis se concentra en la energía electrónica molecular.

Someter un manuscrito para su publicación en una revista indexada.



Andrés Cedillo

Dept. Química, UAM-I



Vb.Bo.

Tarse Gargan Q.

PLAN DE ACTIVIDADES ACADÉMICAS PARA LA EXTENSIÓN DEL PERÍODO SABÁTICO 2023-2024

Fechas originales de inicio y terminación.

Período sabático por 12 meses, del 10 de octubre de 2022 al 9 de octubre de 2023.

Fechas solicitadas de inicio y terminación de la extensión.

Extensión del período sabático por 6 meses, del 10 de octubre de 2023 al 9 de abril de 2024.

Objetivos a desarrollar.

Continuar con el proyecto de investigación en colaboración con el Prof. Ángel Martín Pendás, del Departamento de Química Física y Analítica en la Universidad de Oviedo (España), octubre y noviembre de 2023.

Continuar con el proyecto de investigación en colaboración con el Prof. Kestutis Aidas, del Instituto de Física Química en la Universidad de Vilnius (Lituania), noviembre de 2023 a abril de 2024.

Justificación.

Los avances del proyecto con el Prof. Martín (Oviedo) han sido muy alentadores y continuar en su grupo de investigación por algunas semanas más ayudará a concluir algunas ideas adicionales e iniciar la preparación de un manuscrito para someterlo a una revista indexada para su publicación.

En 2015 se inició la colaboración con el Prof. Aidas (Vilnius) en el proyecto de investigación "Predicción de las constantes de acidez en disolución para especies con equilibrio tautomérico". Como resultado de esta interacción, en 2020 se publicaron los resultados del proyecto en una revista indexada, "Prediction of the tautomer stability and acidity of phenacylpyridines in aqueous solution", A. Cedillo, S. Kvedaravičiūtė, and K. Aidas, *Theor.*

Chem. Acc. **139**, 52 (2020), doi: 10.1007/s00214-020-2558-3. Adicionalmente se inició la exploración del estudio de las fluctuaciones del gradiente del campo eléctrico de iones en disolución. La estancia en el grupo del Prof. Aidas permitirá consolidar la colaboración entre los grupos de ambas instituciones en los temas comunes del estudio de la reactividad química.

Descripción de las actividades académicas.

Culminar el proyecto de la descripción a las propiedades electrónicas de moléculas lineales en términos de las propiedades de sus fragmentos y analizar la transferibilidad de los fragmentos obtenidos con las metodologías de fragmentación.

Analizar las ventajas del uso de orbitales no ortogonales en la descripción del tipo de enlace denominado 3 electrones/2 centros.

Avanzar en el proyecto de las fluctuaciones del gradiente del campo eléctrico de especies en disolución.

Explorar otros temas de investigación a desarrollar en el futuro en colaboración con las universidades de Oviedo y Vilnius.

Continuar con las líneas de investigación del cuerpo académico "Desarrollo y aplicaciones de la teoría de funcionales de la densidad".

Vinculación con los planes y programas académicos de la Universidad.

Las actividades descritas anteriormente forman parte de las líneas de investigación de mi cuerpo académico.

Lugar donde se desarrollará.

Universidad de Oviedo (España), octubre y noviembre de 2023; Universidad de Vilnius (Lituania), noviembre de 2023 a abril de 2024.

Resultados previstos.

Identificar las condiciones que permiten generar fragmentos moleculares transferibles y contar con esquemas aditivos para las propiedades moleculares.

Preparar una metodología para la evaluar las propiedades estadísticas de la fluctuación del gradiente del campo eléctrico de un sistema en disolución y estimar los tiempos de relajación del espín nuclear del soluto. Comparar los resultados del análisis con las determinaciones experimentales obtenidas por resonancia magnética nuclear.

Someter un manuscrito para su publicación en una revista indexada.



Andrés Cedillo

Dept. Química, UAM-I



Vo.Bo. Jorge Garza Olguín

INFORME DE ACTIVIDADES ACADÉMICAS

PERÍODO SABÁTICO 2022-2024

Fechas de inicio y terminación.

Período sabático por 16 meses, del 10 de octubre de 2022 al 9 de abril de 2024.

Descripción de las actividades académicas realizadas.

Investigación

De octubre de 2022 a noviembre de 2023 realicé una estancia de investigación en el Departamento de Química Física y Analítica de la Universidad de Oviedo, en Oviedo, España. En colaboración con el Prof. Ángel Martín Pendás, iniciamos un proyecto de investigación en el campo de estructura electrónica y la reactividad química de cadenas de fragmentos iguales (del tipo de los homopolímeros). El objetivo es tratar de describir a la molécula en términos de sus fragmentos y sus interacciones. Los resultados de este proyecto han permitido la escritura de un manuscrito que está en la fase final de revisión y se someterá a una revista indexada para su publicación.

De noviembre de 2023 a abril de 2024 estuve en la Universidad de Vilnius, en Vilnius, Lituania, en una estancia de investigación. Las actividades de investigación con el Prof. Kestutis Aidas se centran en la predicción de la acidez de moléculas de interés biológico en disolución. En particular, durante este período, se trabajó con un conjunto de fármacos de la familia de las sulfanilamidas. El análisis de los resultados obtenidos está en la fase final y se iniciará la escritura de un manuscrito para su futura publicación en una revista indexada.

Como parte del desarrollo de mis líneas de investigación se publicó un artículo de investigación, se ha enviado otro con la participación de un alumno de licenciatura y uno más está en la fase de escritura.

Estas actividades forman parte de las líneas de investigación del cuerpo académico consolidado "Desarrollo y aplicaciones de la teoría de funcionales de la densidad".

Docencia y formación de recursos humanos

Un libro de texto de mi autoría fue publicado por la UAM-I en la colección CBI y se encuentra disponible en el portal Libros CBI.

Un alumno de la Licenciatura en Química culminó su servicio social bajo mi tutela en 2023 y terminó su Proyecto Terminal. El reporte final de su proyecto está en la fase final de la escritura.

Listado de los productos académicos.

Artículos

Publicado

Chemical reactivity insights from the use of constrained methods, A. Cedillo. En *Chemical Reactivity. Theories and principles*, S. Kaya, L. von Szentpaly, G. Serdaroğlu, and L. Guo, (Eds.), ISBN 9780323902571, cap 13, pp 409-420, Elsevier (2023), doi: 10.1016/B978-0-32-390257-1.00020-6

Enviado

The use of constrained methods to analyze the molecular reactivity and to define a new type of pseudo atoms, A. Cedillo y José-Remy Martínez-Aguilar, *J. Mol. Model.* (sometido).

En preparación

Convergence of the QTAIM properties of the chemical groups in linear chain molecules, A. Cedillo, Á. Martín-Pendás, and E. Francisco, (en preparación).

The use of pseudo atoms from constrained methods to analyze the substituent effect and molecular reactivity of sulfonamides, A. Cedillo, (en preparación).

Seminarios

La energía de los n-alcanos y otras moléculas lineales y la sensibilidad del modelo ante los criterios de convergencia. A. Cedillo, 11 de noviembre de 2022, Departamento de Química Física y Analítica, Universidad de Oviedo, Oviedo, España.

Insights of chemical reactivity from the use of constrained SCF methods. A. Cedillo, 8 de marzo de 2024, Institute of Chemical Physics, Vilnius University, Vilnius, Lituania.

Libro de texto

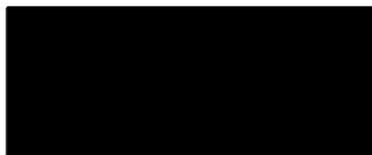
Curso de Química Cuántica, A. Cedillo, UAM-I, Colección CBI, México (2023). ISBN: 978-607-28-2870-4, disponible en <https://librosabi.izt.uam.mx/index.php/lcabi/catalog/book/37>

Servicio Social

Elaboración de un libro de texto para los cursos de Química Cuántica del Departamento de Química, José Remy Martínez Aguilar, Licenciatura en Química, UAM-I, 2023.

Proyecto terminal

El efecto de la restricción de la carga de un átomo sobre las propiedades electrónicas de algunas moléculas sustituidas, José Remy Martínez Aguilar, Licenciatura en Química, UAM-I (en preparación).



Andrés Cedillo
Dept. Química, UAM-I