



**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA  
UNIDAD IZTAPALAPA  
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA**

**DQ.0233.2024**

Agosto 20, 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, la solicitud de prórroga del contrato como profesor visitante del Dr. Alexander Pérez de la Luz del 16 de octubre de 2024 al 15 de octubre de 2025.

Agradezco su atención a la presente 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 C.P. 09210. CdMx, México.  
Apartado Postal 55-534.

**SOLICITUD DE PRÓRROGA DE PERSONAL ACADÉMICO**

**PERSONA TITULAR DE LA SECRETARÍA GENERAL**

DRA. NORMA RONDERO LÓPEZ

FECHA

DÍA	MES	AÑO
20	08	2024

CONFORME A LO PREVISTO EN EL REGLAMENTO DE INGRESO, PROMOCIÓN Y PERMANENCIA DEL PERSONAL ACADÉMICO ARTÍCULOS 151 BIS, 156, 156-12 SE SOLICITA LA SIGUIENTE PRÓRROGA:

CONCURSO DE EVALUACIÓN CURRICULAR <input type="checkbox"/>	PERSONAL ACADÉMICO VISITANTE <input checked="" type="checkbox"/>	PERSONAL ACADÉMICO QUE OCUPA CÁTEDRA <input type="checkbox"/>
NÚM. DE CONVOCATORIA _____	FOLIO VISITANTE O CATEDRÁTICO PV.ICBI.e.004.2023	
NOMBRE DE LA CÁTEDRA _____		
APELLIDO PATERNO PÉREZ	APELLIDO MATERNO DE LA LUZ	NOMBRE (S) ALEXANDER
UNIDAD IZTAPALAPA <input checked="" type="checkbox"/>		DEPARTAMENTO QUÍMICA <input checked="" type="checkbox"/>
DIVISIÓN CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA <input checked="" type="checkbox"/>		DEPARTAMENTO QUÍMICA
CATEGORÍA Y NIVEL TITULAR "C"		HORARIO DE LUNES A VIERNES DE 9:00 A 17:00 HRS
FECHA DE INICIO DE LA CONTRATACIÓN	DÍA 16 MES 10 AÑO 2023	FECHA DE TÉRMINO DE LA CONTRATACIÓN
DÍA 16 MES 10 AÑO 2024	FECHA DE TÉRMINO DE LA PRÓRROGA	DÍA 15 MES 10 AÑO 2025
NÚM. DE PLAZA DEFINITIVA QUE CUBRE (sólo en caso de evaluación curricular)		212

**ACTIVIDADES A REALIZAR**

LAS PROFESORAS Y PROFESORES TITULARES DEBERÁN ADEMÁS DE PODER REALIZAR LAS FUNCIONES DE LAS Y LOS ASISTENTES Y EL PROFESORADO CON CATEGORÍA DE ASOCIADO, PLANEAR, DEFINIR, ADECUAR, DIRIGIR, COORDINAR Y EVALUAR PROGRAMAS ACADÉMICOS EN EL ÁREA DE FÍSICOQUÍMICA DE SUPERFICIES, RESPONSABILIZÁNDOSE DIRECTAMENTE DE LOS MISMOS. REALIZAR LAS ACTIVIDADES ESTABLECIDAS EN EL ARTÍCULO 7-4 DEL RIPPA Y DEMÁS NORMAS APLICABLES. REALIZAR LAS FUNCIONES DE DOCENCIA, INVESTIGACIÓN, DIFUSIÓN Y PRESERVACIÓN DE LA CULTURA. IMPARTIR CURSOS RELACIONADOS CON LOS PROGRAMAS DOCENTES DE QUÍMICA EN LOS TRES NIVELES, TG, LICENCIATURA Y POSGRADO. REALIZAR LAS SIGUIENTES ACTIVIDADES:

1. Realizar a través de dinámica molecular la evaluación de los campos de fuerza para reproducir la solubilidad experimental de los fármacos sulfacilopirazina, sulfametoxazol, sulfametazina y metformina usando el programa Gromacs17 y programas propios. Las simulaciones de Monte Carlo se harán con el programa GOMC en el colectivo gran canónico.
2. Relacionar parámetros del potencial de interacción (cargas atómicas y parámetros de Lennard-Jones) con propiedades fisicoquímicas de varios solventes.
3. Encontrar los sitios de interacción fármaco-arcilla.LOS

**DOCUMENTOS QUE ANEXA**

DOCUMENTOS PROBATORIOS DE LA SUBSISTENCIA DE LA NECESIDAD ACADÉMICA <input type="checkbox"/>	FORMA MIGRATORIA (FM) <input type="checkbox"/>
PROYECTO DE CONTRATO ANTERIOR <input checked="" type="checkbox"/>	INFORME DE ACTIVIDADES ACADÉMICAS <input type="checkbox"/>
	PASAPORTE <input type="checkbox"/>

**NOTA: DENTRO DE LOS DIEZ DÍAS HÁBILES TRANSCURRIDOS A PARTIR DE LA RECEPCIÓN DE ESTA NOTIFICACIÓN DE INICIO DE LABORES EN LA RECTORÍA GENERAL, LA PERSONA GANADORA DEBERÁ ACUDIR AL ÁREA ASIGNADA EN SU UNIDAD UNIVERSITARIA DE ADSCRIPCIÓN PARA LA FIRMA AUTÓGRAFA DEL CONTRATO DE TRABAJO CORRESPONDIENTE.**

JEFATURA DE DEPARTAMENTO

  
 Dr. Jorge Garza Olguín

NOMBRE Y FIRMA

DIRECCIÓN DE DIVISIÓN / PRESIDENCIA DEL CONSEJO DIVISIONAL

Dr. Román Linares Romero

NOMBRE Y FIRMA

PERSONAL ACADÉMICO

  
 Dr. Alexander Pérez de la Luz

NOMBRE Y FIRMA

**PARA USO EXCLUSIVO DE LOS PROFESORES VISITANTES Y DE CÁTEDRA**

Aprobada en la Sesión Núm. \_\_\_\_\_

del Consejo Divisional de fecha

DÍA	MES	AÑO
-----	-----	-----

NOTA: SE UTILIZA ÚNICAMENTE AL REVERSO DEL TANTO 1

Vº. BO. PLANTILLA DE UNIDAD

SELO

Vº. BO. PLANTILLA DE RECTORÍA GENERAL

SELO

CODIFICACIÓN INTERNA (NÚM. DE PLAZA EN PLANTILLA) 212
CONTROL DE PLANTILLA
NOMBRE Y FIRMA



# UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

## Plan de Trabajo segundo año

Dr. Alexander Pérez de la Luz  
Profesor visitante  
Departamento de Química, UAM-I

Periodo 16 octubre 2024 – 15 octubre 2025

### Docencia

En base a mi formación académica puedo impartir asignaturas de Licenciatura y Posgrado.

- **Licenciatura:** Cursos complementarios. *Tronco General:* Química, Transformaciones Químicas, Estructura de la Materia y Método Experimental II. *Formación Específica:* Programación Aplicada a la Química. *Formación Disciplinar:* Físicoquímica I y Físicoquímica IV. *Formación Profesional:* Físicoquímica V, Laboratorio de Físicoquímica Computacional, Proyecto terminal I Físicoquímica y Proyecto terminal II Físicoquímica. *Optativas:* Métodos de Simulación Molecular, Química Cuántica Aplicada, Temas Selectos de Química Cuántica y Simulación Molecular I y II, Teoría de Grupos y Aplicaciones en Química, Estructura Electrónica.
- **Posgrado:** *Cursos Obligatorios:* Estructura Atómica y Molecular, Termodinámica Química. *Cursos Optativos Básicos:* Enlace Químico, Termodinámica Estadística, *Cursos Optativos Complementarios:* Físicoquímica General, Físicoquímica Computacional, Introducción al Cómputo Científico, Teoría de Grupos Aplicada a la Química, Temas Selectos de Química Cuántica, Introducción a la Investigación I, II y III, además de Trabajos de Investigación I, II, III, IV, V y VI.

Además de impartir clases de Docencia, se brindará asesorías tanto a los alumnos de la Licenciatura en Química, dirección de Proyecto Terminal, Servicio Social y dirección de Tesis de Posgrado (Maestría).

### Difusión y Promoción de la Ciencia y del Conocimiento

Se impartirán seminarios nacionales e internacionales de simulación molecular orientados al campo de los fármacos, se impartirán talleres en eventos nacionales de simulación molecular, se organizarán eventos de simulación molecular en el grupo de trabajo, se organizarán seminarios de divulgación de los alcances de la simulación molecular.

Además de participar en conferencias para la difusión de la ciencia que se desarrollan en el Departamento de Química, en sitios dentro de la universidad y fuera de ella. Además de seguir participando como editor asociado en el podcast del Departamento de Química y desarrollo de artículos de divulgación científica enfocados en simulación molecular.

### UNIDAD IZTAPALAPA

División de Ciencias Básicas e Ingeniería  
Departamento de Química

Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, 09340, Ciudad de México, México.



## UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

### Proyecto de investigación:

*Diseño de complejos híbridos fármaco-arcilla, estudio teórico-experimental.*

### Resumen

Continuación del proyecto que se enfoca en la re-parametrización de campos de fuerza para simular fármacos en fase cristalina con dinámica molecular; con la finalidad de realizar un estudio teórico-experimental sobre la solubilidad de los fármacos propuestos en el presente proyecto en agua, líquidos iónicos y solventes orgánicos. Posteriormente, los fármacos propuestos serán usados para ser intercalados en nanomateriales; como es la montmorillonita<sup>1-3</sup> (arcilla) para ser utilizados como potenciales soportes del principio activo, ya que pueden ser útiles en el diseño de complejos capaces de aumentar la estabilidad, la solubilidad y obtener una mejor liberación controlada de distintos ingredientes activos, por ejemplo de la metformina, usada en el tratamiento de una enfermedad de alta incidencia en México, como lo es la Diabetes Mellitus tipo 2. Para su realización, se propone el uso y desarrollo integrado de los métodos de estructura electrónica, así como de simulación molecular para generar metodologías que permitan la investigación y desarrollo de nuevas formulaciones de complejos fármaco-arcilla. Además, de continuar con el desarrollo de la parte experimental en colaboración con el área académica de Química Inorgánica y Biofisicoquímica del Departamento de Química.

### Motivación

El principal problema de muchos ingredientes activos que podrían ser candidatos para usarse como fármacos es su baja solubilidad y velocidad de disolución en agua; como lo son las sulfonamidas (antibióticos bacteriostáticos) y biguanidas (antidiabéticos orales). Esto afecta el transporte y la absorción del medicamento en el cuerpo humano. Por lo tanto, los fármacos al tener una baja solubilidad por lo regular presentan baja biodisponibilidad<sup>4</sup>, por lo que se deben administrar dosis mayores para aumentar su efectividad. Esto puede provocar efectos secundarios que pueden ser más graves que la propia enfermedad; como es la cristalización del fármaco en los riñones, por lo que es necesario administrarlas de forma apropiada y efectiva.

Otro problema en la actualidad es el consumo de grandes cantidades de fármacos cada año alrededor del mundo; un ejemplo son las grandes cantidades usadas en el tratamiento de la Diabetes.<sup>5</sup> Los medicamentos se han vuelto imprescindibles en nuestra vida cotidiana, pero el alto consumo de fármacos ha llevado a dos problemas. El primero es que después de la administración terapéutica, un gran porcentaje de producto farmacéutico se excreta como ingrediente activo o metabolitos. El segundo problema es que los fármacos desechados por el cuerpo humano entran a los sistemas de aguas residuales, que a su vez llegan a ríos y lagunas. Estos residuos al no ser tratados previamente conllevan a consecuencias químicas en los ecosistemas por su baja biodegradación. Por lo que, con el paso de los años, las

### UNIDAD IZTAPALAPA

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Departamento de Química

Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, 09340, Ciudad de México, México.

## UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

cantidades de fármacos que se encuentran en los mantos acuíferos han pasado de ng/L a  $\mu\text{g/L}$  en muchos lugares del mundo y estos siguen aumentando.<sup>6-8</sup>

### Planteamiento del problema

Existen potenciales de interacción reportados en la literatura<sup>9-12</sup>, pero se ha mostrado que fallan en reproducir la solubilidad experimental de muchos grupos funcionales de la química orgánica en fase líquida para líquidos orgánicos e iónicos.<sup>13-16</sup> El problema es mucho más grave en fase cristalina, como es el caso los ingredientes activos o fármacos. Por lo que, los campos de fuerza que se reportan en la literatura se deben de re-parametrizar para poder describir correctamente varias propiedades fisicoquímicas tanto de líquidos como de sólidos y la solubilidad experimental.

### Sistemas a estudiar

Los fármacos con los que se trabajará son sulfonamidas, tales como: sulfacetamida, sulfacloropirazina, sulfametoazol y sulfametazina, además de la metformina, un fármaco usado en el tratamiento de la Diabetes Mellitus tipo 2 (Ver Figura 1). Cabe resaltar el grado de dificultad de simular los distintos sistemas que conllevan la realización del presente proyecto, ya que son sistemas multicomponentes, sistemas en diferentes fases, determinación de propiedades en fase líquida, fase sólida, equilibrios; líquido vapor, líquido-líquido y sólido-líquido.

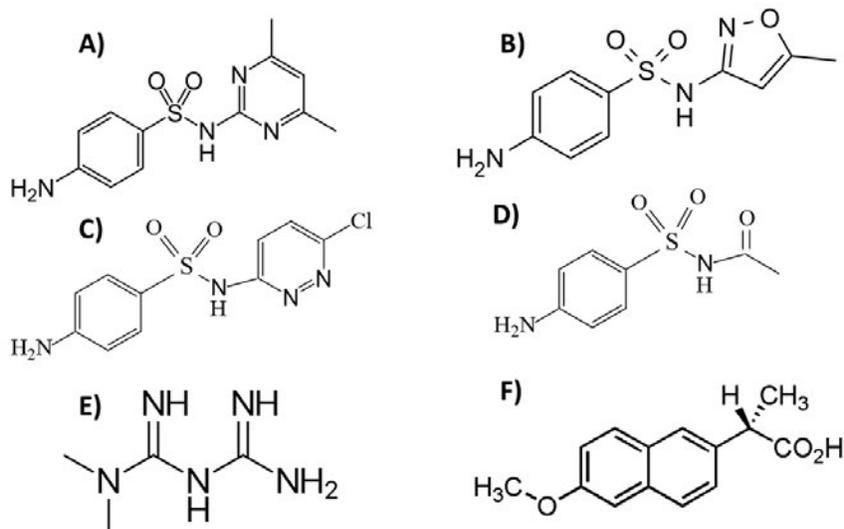


Figura 1. Estructuras moleculares de fármacos. A) sulfametazina. B) sulfametoazol. C) sulfacloropirazina. D) sulfacetamida. E) metformina. F) paracetamol

### UNIDAD IZTAPALAPA

División de Ciencias Básicas e Ingeniería  
Departamento de Química

Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, 09340, Ciudad de México, México.

## **UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA**

### **Metodología**

Primero, mediante Dinámica Molecular se realizará una evaluación de los campos de fuerza que se encuentran en la literatura para evaluar la calidad de los parámetros para reproducir, la solubilidad experimental de los fármacos mencionados en el presente proyecto, para ello se utilizara el programa Gromacs<sup>17</sup> y programas del grupo. La evaluación permitirá escoger que campos de fuerza tienen los mejores parámetros como punto de partida para su parametrización.

La parametrización de los solventes en los que sean solubles los fármacos, se hará uso de la metodologías propuestas por los métodos (Three and four Steps Systematic Parametrization Procedure)<sup>18,19</sup> que consisten en relacionar parámetros del potencial de interacción (cargas atómicas y parámetros de Lennard-Jones) con propiedades termodinámicas (constante dieléctrica, tensión superficial y densidad del líquido, solubilidad). Para el cálculo de las geometrías, barreras rotacionales, estudio conformacional y cargas atómicas iniciales, se hará uso del programa Gaussian 09.<sup>20</sup> Para parametrizar los campos de fuerza en fase cristalina se relacionarán los parámetros del potencial de interacción (cargas atómicas y parámetros de Lennard-Jones) con propiedades de termodinámicas y de estructura del sólido (densidad del sólido, parámetros de red, solubilidad en solventes polares y el coeficiente de reparto octanol-agua (Kow)). Para el cálculo de las geometrías y cargas atómicas iniciales se hará uso de los programas Materials Studio<sup>21</sup> y Quantum Espresso.<sup>22</sup>

Las simulaciones moleculares que se llevarán a cabo de los cristales serán de diferentes tipos como son: anisotrópica, para las posiciones atómicas de los cristales se tienen los archivos cif de los fármacos a estudiar. Las simulaciones que conlleva este proyecto son: Simulaciones NPT: isotrópico (líquido), semi-isotrópica (líquido-líquido) y anisotrópica (sólido y sólido-líquido). Simulaciones NVT (líquido-vapor). Automatización de simulaciones y análisis de resultados, usando el lenguaje de Python. Buscar parámetros de interacción a través de inteligencia artificial usando propiedades del método de 4 pasos. Para las simulaciones de los complejos fármaco-arcilla se llevarán a cabo en NPT: anisotrópica (sólido-líquido).

### **Resultados**

Publicar al menos un artículo de investigación en un año en revistas indexadas. Además de continuar colaboraciones con los siguientes investigadores: Dr. Edgar Rojas Núñez, Dr. Frank Salas. Además de la Dra. Catalina Soriano Correa, FES-Zaragoza, el Dr. C. Ignacio Sainz Díaz del Instituto Andaluz de Ciencias de la Tierra (IACT) CSIC- Universidad de Granada, España y el Dr. Julio Cesar Alva Ensastegui, Universidad Autónoma del Estado de México (UAEM), Toluca. Dra. Ana Borrego Sánchez, Universidad de Valencia, Valencia, España. M. C. Ana María Soto Estrada, área académica de Inorgánica UAM-I. Dr. Rodolfo Esquivel Olea, área académica de Química Cuántica UAM-I. Dr. Humberto Laguna Galindo, área académica

#### **UNIDAD IZTAPALAPA**

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Departamento de Química

Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, 09340, Ciudad de México, México.

## UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

de Química Cuántica UAM-I, Dr. José Alejandro Ramírez, área académica de Química Cuántica UAM-I y el Dr. Ponciano García Gutiérrez, área académica de Biofisicoquímica UAM-I.

Finalizar el manual para la UEA: Laboratorio de Fisicoquímica Computacional en formato escrito en colaboración con el Dr. Humberto Laguna Galindo y el Dr. Edgar Núñez Rojas.

### Bibliografía

- (1) Jayrajsinh, S.; Shankar, G.; Agrawal, Y. K.; Bakre, L. Montmorillonite Nanoclay as a Multifaceted Drug-Delivery Carrier: A Review. *Journal of Drug Delivery Science and Technology* **2017**, *39*, 200–209. <https://doi.org/10.1016/j.jddst.2017.03.023>.
- (2) Soriano-Correa, C.; Pérez De La Luz, A.; Sainz-Díaz, C. I. Adsorption of Capsaicin into the Nanoconfined Interlayer Space of Montmorillonite by DFT Calculations. *Journal of Pharmaceutical Sciences* **2023**, *112* (3), 798–807. <https://doi.org/10.1016/j.xphs.2022.10.024>.
- (3) Pérez De La Luz, A.; Soriano-Correa, C.; Francisco-Márquez, M.; Barrientos-Salcedo, C.; Hernández-Laguna, A.; Sainz-Díaz, C. I. Intercalation of Sulfonamides in Montmorillonite by Molecular Dynamics and DFT Calculations for Bioavailability Control. *Journal of Molecular Structure* **2023**, *1291*, 136085. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2023.136085>.
- (4) Kalepu, S.; Nekkanti, V. Insoluble Drug Delivery Strategies: Review of Recent Advances and Business Prospects. *Acta Pharmaceutica Sinica B* **2015**, *5* (5), 442–453. <https://doi.org/10.1016/j.apsb.2015.07.003>.
- (5) Triggler, C. R.; Ding, H. Cardiovascular Impact of Drugs Used in the Treatment of Diabetes. *Therapeutic Advances in Chronic Disease* **2014**, *5* (6), 245–268. <https://doi.org/10.1177/2040622314546125>.
- (6) Zuccato, E.; Calamari, D.; Natangelo, M.; Fanelli, R. Presence of Therapeutic Drugs in the Environment. *The Lancet* **2000**, *355* (9217), 1789–1790. [https://doi.org/10.1016/S0140-6736\(00\)02270-4](https://doi.org/10.1016/S0140-6736(00)02270-4).
- (7) Jones, O. A.; Lester, J. N.; Voulvoulis, N. Pharmaceuticals: A Threat to Drinking Water? *Trends in Biotechnology* **2005**, *23* (4), 163–167. <https://doi.org/10.1016/j.tibtech.2005.02.001>.
- (8) Pomati, F.; Castiglioni, S.; Zuccato, E.; Fanelli, R.; Vigetti, D.; Rossetti, C.; Calamari, D. Effects of a Complex Mixture of Therapeutic Drugs at Environmental Levels on Human Embryonic Cells. *Environ. Sci. Technol.* **2006**, *40* (7), 2442–2447. <https://doi.org/10.1021/es051715a>.
- (9) Jorgensen, W. L.; Maxwell, D. S.; Tirado-Rives, J. Development and Testing of the OPLS All-Atom Force Field on Conformational Energetics and Properties of Organic

### UNIDAD IZTAPALAPA

División de Ciencias Básicas e Ingeniería  
Departamento de Química

Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, 09340, Ciudad de México, México.

- Liquids. *J. Am. Chem. Soc.* **1996**, *118* (45), 11225–11236. <https://doi.org/10.1021/ja9621760>.
- (10) Jorgensen, W. L.; Tirado-Rives, J. The OPLS [Optimized Potentials for Liquid Simulations] Potential Functions for Proteins, Energy Minimizations for Crystals of Cyclic Peptides and Crambin. *J. Am. Chem. Soc.* **1988**, *110* (6), 1657–1666. <https://doi.org/10.1021/ja00214a001>.
- (11) Vanommeslaeghe, K.; Hatcher, E.; Acharya, C.; Kundu, S.; Zhong, S.; Shim, J.; Darian, E.; Guvench, O.; Lopes, P.; Vorobyov, I.; Mackerell, A. D. CHARMM General Force Field: A Force Field for Drug-like Molecules Compatible with the CHARMM All-Atom Additive Biological Force Fields. *J. Comput. Chem.* **2009**, NA-NA. <https://doi.org/10.1002/jcc.21367>.
- (12) Wang, J.; Wolf, R. M.; Caldwell, J. W.; Kollman, P. A.; Case, D. A. Development and Testing of a General Amber Force Field. *J. Comput. Chem.* **2004**, *25* (9), 1157–1174. <https://doi.org/10.1002/jcc.20035>.
- (13) de Jesús-González, N. E.; Pérez de la Luz, A.; López-Lemus, J.; Alejandre, J. Effect of the Dielectric Constant on the Solubility of Acetone in Water. *J. Chem. Eng. Data* **2018**, *63* (5), 1170–1179. <https://doi.org/10.1021/acs.jced.7b00573>.
- (14) de la Luz, A. P.; Méndez-Maldonado, G. A.; Núñez-Rojas, E.; Bresme, F.; Alejandre, J. A New Force Field of Formamide and the Effect of the Dielectric Constant on Miscibility. *J. Chem. Theory Comput.* **2015**, *11* (6), 2792–2800. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.5b00080>.
- (15) Pérez de la Luz, A.; Aguilar-Pineda, J. A.; Méndez-Bermúdez, J. G.; Alejandre, J. Force Field Parametrization from the Hirshfeld Molecular Electronic Density. *J. Chem. Theory Comput.* **2018**, *14* (11), 5949–5958. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.8b00554>.
- (16) García-Melgarejo, V.; Núñez-Rojas, E.; Alejandre, J. United Atom Model via Interactions with Explicit Water (UAMI-EW): Alcohols and Ketones. *Journal of Molecular Liquids* **2021**, *323*, 114576. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114576>.
- (17) Hess, B.; Kutzner, C.; van der Spoel, D.; Lindahl, E. GROMACS 4: Algorithms for Highly Efficient, Load-Balanced, and Scalable Molecular Simulation. *J. Chem. Theory Comput.* **2008**, *4* (3), 435–447. <https://doi.org/10.1021/ct700301q>.
- (18) Salas, F. J.; Méndez-Maldonado, G. A.; Núñez-Rojas, E.; Aguilar-Pineda, G. E.; Domínguez, H.; Alejandre, J. Systematic Procedure To Parametrize Force Fields for Molecular Fluids. *J. Chem. Theory Comput.* **2015**, *11* (2), 683–693. <https://doi.org/10.1021/ct500853q>.
- (19) Núñez-Rojas, E.; García-Melgarejo, V.; Pérez de la Luz, A.; Alejandre, J. Systematic Parameterization Procedure to Develop Force Fields for Molecular Fluids Using Explicit Water. *Fluid Phase Equilibria* **2019**, *490*, 1–12. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2019.02.018>.
- (20) Frisch MJ, Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. GW, Schlegel HB, Scuseria GE, Robb, R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson,



## UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

H., Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G.; Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J.; Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T.; Vreven, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J.; Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand,; K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi,; M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V.; Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O.; Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin,; K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg,; S. Dapprich, A. D. Daniels, O. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J.; Cioslowski, D. J. Fox; Frisch MJ, Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. GW, Schlegel HB, Scuseria GE, Robb, R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Gaussian 09, Revision A.08; Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, 2009.

(21) BIOVIA, Dassault Systèmes, BIOVIA Workbook, Release 2020; BIOVIA Pipeline Pilot, Release 2020, San Diego: Dassault Systèmes.

(22) Giannozzi, P.; Baroni, S.; Bonini, N.; Calandra, M.; Car, R.; Cavazzoni, C.; Ceresoli, D.; Chiarotti, G. L.; Cococcioni, M.; Dabo, I.; Dal Corso, A.; De Gironcoli, S.; Fabris, S.; Fratesi, G.; Gebauer, R.; Gerstmann, U.; Gougoussis, C.; Kokalj, A.; Lazzeri, M.; Martin-Samos, L.; Marzari, N.; Mauri, F.; Mazzarello, R.; Paolini, S.; Pasquarello, A.; Paulatto, L.; Sbraccia, C.; Scandolo, S.; Sclauzero, G.; Seitsonen, A. P.; Smogunov, A.; Umari, P.; Wentzcovitch, R. M. QUANTUM ESPRESSO: A Modular and Open-Source Software Project for Quantum Simulations of Materials. *J. Phys.: Condens. Matter* **2009**, *21* (39), 395502. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>.

### UNIDAD IZTAPALAPA

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Departamento de Química

Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, 09340, Ciudad de México, México.



**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA  
UNIDAD IZTAPALAPA  
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA**

Ciudad de México a 20 de agosto de 2024

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

Estimado Dr. Linares,

a través de este medio le informamos que el Departamento de Química en su conjunto analizó los informes del año 2023-2024 y sus respectivos planes de trabajo del año 2024-2025 de los profesores:

Dr. Juan Edgar Carrera Crespo  
Dr. Ponciano García Gutiérrez  
Dr. Gregorio Guzmán González  
Dr. José Luis Ortíz Quiñonez  
Dr. Ricardo Atahualpa Peralta Ávila  
Dr. Alexander Pérez de la Luz  
Dr. Víctor Manuel Trejos Montoya

Dicho análisis nos lleva a solicitar la prórroga de las respectivas plazas para el año 2024-2025.

Sin más por el momento quedamos a sus órdenes por cualquier duda o comentario que tenga a esta solicitud.

Atentamente

  
Dra. Liliana Iraís Vera Robles  
Jefa del Área de Biofisiología

  
Dra. Nancy Coromoto Martín Guaregua  
Jefa del Área de Catálisis

**UNIDAD IZTAPALAPA**

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Departamento de Química

Ave. Ferrocarril San Rafael Atlixco 185. Col. Leyes de Reforma 1A Sección. Iztapalapa C.P. 09310. CdMx, México.  
Apartado Postal 55-534.

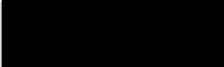


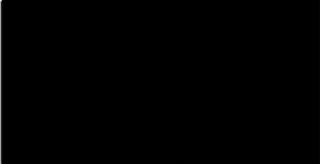
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA  
UNIDAD IZTAPALAPA  
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA**

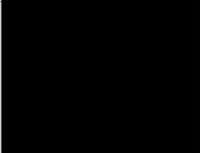
  
Dra. Laura Galicia Luis  
Jefa del Área de Electroquímica

  
Dr. Salomón Cordero Sánchez  
Jefe del Área de Físicoquímica de Superficies

  
Dra. Rubicelia Vargas Fosada  
Jefa del Área de Físicoquímica Teórica

  
Dr. Guillermo Arnulfo Vázquez Coutiño  
Jefe del Área de Química Analítica

  
Dr. Rodolfo Esquivel Olea  
Jefe del Área de Química Cuántica

  
Dr. Eduardo González Zamora  
Jefe del Área de Química Inorgánica

  
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 C.P. 09310, CdMx, México.  
Apartado Postal 55-534.



## FORMACIÓN ACADÉMICA

---

### Universidad Autónoma Metropolitana - Unidad Iztapalapa

Periodo: 2014 – 2019

Grado: Doctorado en Ciencias – Química.

### Universidad Autónoma Metropolitana - Unidad Iztapalapa

Periodo: 2012 – 2014

Grado: Maestría en Ciencias – Química.

### Universidad Autónoma Metropolitana - Unidad Iztapalapa

Periodo: 2006 - 2012

Grado: Licenciatura en Química.

## RECONOCIMIENTOS

---

Miembro del Sistema Nacional de Investigadores (SNI) con el nombramiento de Nivel 1 desde enero del 2025, actualmente estoy con el nivel de candidato.

## CONGRESOS

---

1. Electronic Structure Principles and Applications (ESPA 2024), del 3 al 7 Junio, Tarragona, España. Theoretical study on the intercalation of organic compounds in clays (montmorillonite) for bioavailability control.
2. The COST Action Chemobrionics Annual Meeting organized by Hacettepe University, Graduate School of Science and Technology in Ankara, Turkey, 22 – 24 September 2021. Experimental and theoretical studies on the intercalation of organics into the  $Mg_2Al$  and  $Zn_2Al$  layered double hydroxides.
3. 10<sup>th</sup> Meeting on Molecular Simulation: from simple fluids to chemicals reactions. México D.F., del 8 al 10 de noviembre de 2018. Force field Parametrization via Atoms-in-Molecules.
4. 9<sup>th</sup> Meeting on Molecular Simulations: from simple fluids to chemicals reactions. México D.F., del 6 al 8 de Diciembre de 2017. Development of a force field for amides using the Hirshfeld partition scheme.
5. 8<sup>th</sup> Meeting on Molecular Simulations: from simple fluids to chemicals reactions. México D.F., del 7 al 9 de Diciembre de 2016. Development of a force field for amides that are self-assembled by hydrogen bonds.
6. 7<sup>th</sup> Meeting on Molecular Simulations: from simple fluids to chemicals reactions. México D.F., del 7 a 9 de diciembre de 2015. Re-parameterizing a force field for formamide molecule.

7. 6th Meeting on Molecular Simulations: From simple fluid to chemical reactions. México D.F., del 9 a 11 de diciembre de 2014. Re-parameterizing a force field for Formamide molecule.
8. 11th Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. Toluca L., Edo. de México, México, del 8 al 10 de noviembre de 2012. “Estudio Teórico de la Reacción de Vinil Éteres con el Radical OH en Fase Gas y Análisis de la Reactividad Química por medio de las funciones de Fukui de espín Polarizado.”
9. 10th Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. Pachuca, Hgo. México, del 10 al 12 de noviembre de 2011. “Estudio Teórico de la Reacción de Etilenglicol Mono-vinil Éter (EGMVE), Etilenglicol Di-vinil Éter (EGDVE), Dietilenglicol Di-vinil Éter (DEGDVE) con Radical OH en Fase Gas propuestos como nuevos solventes”.
10. 9th Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica. Pachuca, Hgo. México, del 11 al 13 de noviembre de 2010. “Estudio Teórico de la Reacción de Etilenglicol Mono-Vinil Éter con el Radical OH en Fase Gas”.
11. 3th Reunión de la Red de Química Teórica para Medio Ambiente y Salud, Puerto Escondido, Oaxaca, México, del 10 al 14 de enero de 2011. “Estudio Teórico de la Reacción de Etilenglicol Mono-vinil Éter con Radical OH en Fase Gas”.
12. 3th Reunión de la Red de Química Teórica para Medio Ambiente de Salud, Puerto Escondido, Oaxaca, México, del 16 al 19 de diciembre de 2009. “Asistencia y apoyando en su desarrollo”.

## ARTÍCULOS

---

1. Debido al 50 aniversario de la Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa, la revista Contactos publicará un número especial por cada Departamento de CBI, por tal motivo se envió un artículo, el cual será publicado próximamente.
2. JC Alva-Ensastegui, Enrique Morales-Avila, Alexander Pérez de la Luz, MJ Bernad-Bernad, Determination of pKa values and deprotonation order of methotrexate using a combined experimental-theoretical study and binding constants of the methotrexate-Laponite complex at different pH values. *J. Photochem. Photobiol. A*, 449, 115406, 2024. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2023.115406>
3. AP de la Luz, C Soriano-Correa, M Francisco-Márquez, C Barrientos-Salcedo, A Hernández-Laguna, CI Sainz-Díaz. Intercalation of sulfonamides in montmorillonite by molecular dynamics and DFT calculations for bioavailability control, *Journal of Molecular Structure*, 1291, 136085, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2023.136085>
4. C Soriano-Correa, AP de la Luz, CI Sainz-Díaz. Adsorption of Capsaicin into the nanoconfined interlayer space of montmorillonite by DFT calculations. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 112 (3), 798-807. 2023 DOI: <https://doi.org/10.1016/j.xphs.2022.10.024>
5. CI Sainz-Díaz, AP de la Luz, C Barrientos-Salcedo, M Francisco-Márquez, C Soriano-Correa. Crystal polymorphism and spectroscopical properties of sulfonamides in solid state by means of First Principles calculations. *Journal of computer-aided molecular design* 36 (7), 549-562, 2022. DOI: <https://link.springer.com/article/10.1007/s10822-022-00465-2>

6. M Pires-Figueiredo, A Borrego-Sánchez, C Pimentel, AP de la Luz, C Viseras, CI Sainz-Díaz. Experimental and theoretical studies on the intercalation of naproxen into the Mg<sub>2</sub>Al and Zn<sub>2</sub>Al Layered Double Hydroxides by ion exchange reaction. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 111 (8), 2369-2377, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.xphs.2022.05.012>
7. M Francisco-Márquez, AP de la Luz, C Soriano-Correa, C Barrientos-Salcedo, CI Sainz-Díaz. Tautomerism and IR spectroscopy of arylsulfonamides by quantum mechanical calculations. *Journal of Molecular Structure* 1250, 131717, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.131717>
8. C Pimentel, AP de la Luz, A Hernández-Laguna, CI Sainz-Díaz. Effects of the cation ordering in Mg: Al and Zn: Al layered double hydroxides on crystallographic and spectroscopical properties by means of first principles calculations. *Applied Clay Science* 223, 106496, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.clay.2022.106496>
9. AP de la Luz, C Iuga, A Vivier-Bunge. An effective force field to reproduce the solubility of MTBE in water. *Fuel*, 264, 116761, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.116761>
10. E Núñez-Rojas, V García-Melgarejo, AP de la Luz, J Alejandro. Systematic parameterization procedure to develop force fields for molecular fluids using explicit water. *Fluid Phase Equilibria* 490, 1-12, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2019.02.018>
11. AP de la Luz, JA Aguilar-Pineda, JG Méndez-Bermúdez, J Alejandro. Force field parametrization from the Hirshfeld molecular electronic density. *Journal of Chemical Theory and Computation* 14 (11), 5949-5958, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.8b00554>
12. E Núñez-Rojas, JA Aguilar-Pineda, AP de la Luz, EN de Jesús González, J Alejandro. Force Field Benchmark of the TraPPE-UA for Polar Liquids: Density, Heat of Vaporization, Dielectric Constant, Surface Tension, Volumetric Expansion Coefficient, and Isothermal Compressibility. *The Journal of Physical Chemistry B* 122 (5), 1669-1678, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b10970>
13. NE de Jesús-González, AP de la Luz, J López-Lemus, J Alejandro. Effect of the Dielectric Constant on the Solubility of Acetone in Water. *Journal of Chemical & Engineering Data* 63 (5), 1170-1179, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jced.7b00573>
14. AP de la Luz, GA Méndez-Maldonado, E Núñez-Rojas, F Bresme, J Alejandro. A new force field of formamide and the effect of the dielectric constant on miscibility. *Journal of Chemical Theory and Computation* 11 (6), 2792-2800, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.5b00080>
15. AP de la Luz, C Iuga, JR Alvarez-Idaboy, E Ortiz, A Vivier-Bunge. Tropospheric Degradation of Ethylene Glycol Monovinyl and Divinyl Ethers: A Mechanistic and Kinetic Study. *International Journal of Quantum Chemistry*, 112 (21), 3525-3534, 2012. DOI: <https://doi.org/10.1002/qua.24159>

## APOYO Y DIFUSIÓN

---

1. A partir del trimestre 24-I pertenezco al comité editorial del Podcast del Departamento de Química “Q-UAM-I “, como editor asociado.
2. Participación como parte del comité organizador del 13vo Taller de Dinámica Molecular y 14Th Meeting on Molecular Simulations, que se llevará a cabo del 3 al 5 de noviembre del 2024, CDMX, México. Además de ser coordinador del nivel de principiantes del 13vo Taller de Dinámica Molecular.
3. Participación como parte del comité organizador del 12vo Taller de Dinámica Molecular y el 13Th Meeting on Molecular Simulations, llevado a cabo del 23 al 25 de noviembre del 2023, Cuernavaca, Morelos.
4. Participación en la impartición de un seminario en el Departamento de Física, Desarrollo de un campo de fuerzas para sistemas que se auto ensamblan con puentes de hidrogeno. Ciudad de México, 29 de mayo del 2018.
5. Participación como parte del comité local de la organización y realización del X Meeting on Molecular Simulations: from simple fluids to chemicals reactions. Cuernavaca, Morelos, del 8 al 10 de diciembre de 2018.
6. Participación como parte del comité local de la organización y realización del IX Meeting on Molecular Simulations: from simple fluids to chemicals reactions. México D.F. del 6 al 8 de diciembre de 2017.
7. Participación como expositor en la 9ª feria de ciencias y humanidades llevada en la Universidad Autónoma Metropolitana unidad Iztapalapa, Ciudad de México, del 16 al 19 de Noviembre, 2015.
8. Participación como parte del jurado en el concurso de experimentos químicos dentro del programa: “Talentos pre-universitarios en química”, el 28 de noviembre de 2014.
9. Participación como parte del jurado en el concurso de experimentos químicos dentro del programa: “Talentos pre-universitarios en química”, el 6 de noviembre de 2013.
10. Participación como expositor con el tema “Química en la UAM y en la vida cotidiana”, del 17 al 19 octubre 2013.

## DATOS COMPLEMENTARIOS

---

Idiomas:

- Inglés – B2 TOELF

Conocimientos de informática a nivel usuario:

- Linux Avanzado
- Windows Avanzado

