



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

DQ.0342.2025

Octubre 01, 2025

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 Marcelo Galván Espinosa, del Área Académica de Fisicoquímica Teórica. Dicho informe sabático comprende el período de 14 meses a partir del 26 de febrero de 2024.

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

Atentamente
Casa abierta al tiempo



Dr. Juan Marcos Esparza Schulz
Jefe del Departamento de Química

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

CONSEJO DIVISIONAL DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERIA

INFORME DE PERÍODO SABÁTICO

DATOS GENERALES

Nombre del profesor: Marcelo Enrique Galván Espinosa N° empleado: 11351
Departamento: Química Área: Fisicoquímica Teórica
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: 26/02/2024 Fecha de terminación: 25/04/2025
Institución donde se realizará: _____
Depto., Laboratorio, etc.: Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM,
Domicilio de la institución: Circuito Exterior S/N Circuito de la Investigación Científica, CU
Teléfono: _____ Fax: _____ E-mail: [REDACTED]

OBJETIVOS DEL PERÍODO SABÁTICO

Enfocar mi trabajo académico en desarrollar los proyectos de investigación en los que
estoy involucrado. Asesorar a mi estudiante de doctorado. Participar en las actividades
de la Junta Directiva de la UAM y de la comisión divisional de aulas virtuales.

METAS ALCANZADAS EN EL PERÍODO SABÁTICO

- | | | |
|---|--|---|
| ☐ Memorias in extenso
en libro de resúmenes* | ☒ Artículos de investigación en
revista indexada* | ☒ Presentaciones en congresos |
| ☐ Libros o capítulos de libros | ☐ Grado | ☐ % Avance de estudios de
posgrado |
| ☒ Otros (especifique): <u>Desarrollo de proyectos de investigación. Participación Universitaria</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)



Investigación



Docencia



Difusión



Formación académica



Formación profesional



Entrenamiento técnico



Otros (especifique): _____

RESUMEN DEL PLAN DE ACTIVIDADES ACADÉMICAS DESARROLLADAS

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

Se publicaron 6 artículos en revistas indexadas.

Se dió seguimiento al doctorado de la alumna Josseline Aguilar incluyendo la impartición de las UEA asociadas.

Se dió seguimiento a los proyectos de investigación financiados y se concluyó uno de ellos de 10 años de duración.

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

6/06/2025

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.

 QUÍMICA
UAM IZTAPALAPA
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

Ciudad de México a 1 de octubre de 2025.

Informe del Período Sabático del Profesor Marcelo Enrique Galván Espinosa

Honorable Consejo Divisional de la División de CBI de la Unidad Iztapalapa,

Presente,

A continuación, me permito presentar el informe de actividades desarrolladas durante mi periodo sabático comprendido del 26/02/2024 al 25/04/2025.

Investigación

En mi plan de trabajo propuse:

“En este rubro continuaré trabajando en los proyectos en los que estoy involucrado, todos relacionados con el proyecto registrado ante el consejo divisional “Estructura Electrónica de Sólidos, Superficies y Biomoléculas”. Uno de ellos es un proyecto grupal financiado por el CONAHCYT que se llama “Diseño de materiales para el almacenamiento electroquímico de energía a gran escala, basado en la “sintetizabilidad” y en un espacio químico de especies abundantes en la minería mexicana”; de este proyecto soy responsable técnico y se encuentra en la etapa inicial. Participan en él investigadores de la UAM-Cuajimalpa, del Instituto de Investigaciones en Materiales de la UNAM (IIM-UNAM) y de la UAM-Iztapalapa. Una de las motivaciones principales para tomar un periodo sabático es poder trabajar directamente con el grupo del IIM-UNAM en el desarrollo de la primera etapa del proyecto ya que esta etapa implica colaborar muy cercanamente con un grupo experto en síntesis de sólidos. Soy también responsable de un proyecto de investigadores por México y seguiré colaborando con los investigadores asociados con esta propuesta. También seguiré participando en un proyecto apoyado por el CONAHCYT del tipo sinergias que es mutiinstiucional. Asistiré a la Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, que es un congreso nacional, en noviembre de 2024.”

De este rubro pude desarrollar lo siguiente:

A) En relación con el desarrollo de los proyectos de investigación en los que estoy involucrado se publicaron los siguientes artículos:

- 1. Conformational preference of dipeptide zwitterions in aqueous solvents, Francisco Adasme-Carreño, Alvaro Ochoa-Calle, Marcelo Galván, Joel Ireta, Physical Chemistry Chemical Physics, 26, 8210-8218 (2024). <https://doi.org/10.1039/d3cp05742a>*
- 2. Redox properties of PbO₂, IrO₂ and SnO₂ (110) surfaces with an adsorbed OH molecule: a chemical reactivity study in the grand canonical ensemble, Claudia Islas-Vargas, Alfredo Guevara-García, Marcelo Galván, Theoretical Chemistry Accounts, 143, 34, (2024). <https://doi.org/10.1007/s00214-024-03103-2>*

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.

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

3. *Hydrodesulfurization of Dibenzothiophene: A Machine Learning Approach*, Guadalupe Castro, Julián Cruz-Borbolla, Marcelo Galván, Alfredo Guevara-García, Joel Ireta, Myrna H Matus, Amilcar Meneses-Viveros, Luis Ignacio Perea-Ramírez, Miriam Pescador-Rojas, *ChemistryOpen*, e202400062, (2024). <https://doi.org/10.1002/open.202400062>
4. *Theoretical study of the oxidative desulfurization reaction in sulfur compounds present in crude oil*, Luis Ignacio Perea-Ramírez, Paulino Zerón, Luis Ángel Zárate-Hernández, Guadalupe Castro, Marcelo Galván, Marco Franco-Pérez, Myrna H. Matus, Julián Cruz, *Computational and Theoretical Chemistry* 1241 (2024) 114887. <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2024.114887>
5. *Adsorption grand potential of OH on metal oxide surfaces*, Claudia Islas-Vargas, Alfredo Guevara-García, Marcelo Galván, *Journal of Molecular Modeling* (2024) 30:379. <https://doi.org/10.1007/s00894-024-06170-1>
6. *The Use of Grand Canonical Density Functional Theory Global and Local Reactivity Parameters to Study Electrochemical Processes in Energy Storage Materials*, Claudia Islas-Vargas, Alfredo Guevara-García, Marcelo Galván, *Journal of the Mexican Chemical Society* Vol. 69 No. 1 (2025): Special Issue Celebrating 50 years of Chemistry at the UAM Part 2.

B) En particular en el proyecto, Diseño de materiales para el almacenamiento electroquímico de energía a gran escala, basado en la "sintetizabilidad", se logró establecer un protocolo basado en el diseño de "prompts" para recabar de manera sistemática información sobre la síntesis de materiales. Este protocolo se diseñó en colaboración con los colaboradores del Instituto de Materiales de la UNAM, de la UAM Cuajimalpa y del departamento de química de la UAMI.

C) También durante 2024, se concluyó, con evaluación satisfactoria, el proyecto grupal de investigadores por México (apoyado por CONACYT hoy SECIHTI) del cual fui responsable técnico: "Diseño y construcción de sistemas sustentables de generación y almacenamiento de energía". En este proyecto, participamos dos profesores del departamento de Química, el Dr. Ignacio Gonzales y yo; tuvo una duración de 10 años (2014-2024) y apoyó el desarrollo del tema de dispositivos de almacenamiento de energía en la DCBI. De los jóvenes investigadores participantes en este proyecto algunos siguen su actividad en la DCBI: el Dr. Guadalupe Ramos, ahora profesor de IPH; y el Dr. Alfredo Guevara, renovó por otros 10 años su estancia como investigador por México en nuestra institución. Otros, se insertaron como profesores en el IPN: la Dra. Issis Romero y el Dr. Jorge Vázquez. Durante los 10 años del proyecto, el grupo de trabajo en su conjunto, graduó 9 alumnos de posgrado e integró a 5 investigadores posdoctorales; y publicó alrededor de 50 artículos relacionados con el tema.

D) Impartí dos conferencias y asistí a un congreso:

1. *La Estructura Electrónica en el Estudio de Materiales para el Almacenamiento Electroquímico de Energía*, Seminario Institucional, Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM, 5 de junio de 2024.

2. *El Formalismo Gran Canónico de la Teoría de Funcionales de la Densidad en el Estudio de Interfases Sólido Líquido*, Seminario del Departamento de Baja dimensionalidad del Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM, 9 de diciembre de 2024.

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.

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

3. Estructura electrónica de compuestos de valencia mixta: el caso de Cr_2F_5 y Co_3O_4 , Josseline Aguilar, Marcelo Galván, XXII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, 7 al 9 de noviembre de 2024, Chihuahua, México.

Formación de Recursos Humanos

En formación de recursos humanos en el plan de trabajo mencioné lo siguiente: **Tengo una alumna de Doctorado, Josseline Leonor Aguilar López. Ella aprobó su examen predoctoral el trimestre pasado y seguiré asesorando su trabajo por medio de reuniones presenciales semanales y por medio de videoconferencias en la medida de que se requiera.**

A) Durante mi sabático le di seguimiento a las UEA relacionadas con mi alumna de doctorado: Trabajo de Investigación III, Doctorado en ciencias, 24I; Trabajo de Investigación IV, Doctorado en ciencias, 24P; Trabajo de Investigación V, Doctorado en ciencias, 24°.

B) Y mi alumna, Josseline Aguilar, avanzó en su trabajo doctoral y ya aprobó la uea de Trabajo de investigación VI; y está en el proceso de escribir los resultados de su tesis para publicación y su tesis de grado.

En Participación Universitaria me propuse **seguir participando como miembro de la Junta Directiva de la Universidad Autónoma Metropolitana y de una comisión divisional relacionada con la evaluación de aulas virtuales.**

Durante mi sabático continué desarrollando mis actividades como miembro de la Junta Directiva de la UAM. Desafortunadamente, no pude avanzar en los trabajos de la comisión de aulas virtuales de la DCBI.

Atentamente



Dr. Marcelo Enrique Galván Espinosa
Área Académica de Fisicoquímica Teórica
Departamento de Química
División de CBI, UAM-Iztapalapa

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.