



Casa abierta al tiempo

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA**  
**Unidad Iztapalapa**

**DQ.0001.2024**

Enero 17, 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 José Luis Gázquez Mateos, del Área de Físicoquímica Teórica del Departamento de Química. Dicho informe sabático comprende el período de 16 meses a partir del 4 de julio de 2022 al 3 de noviembre de 2023.

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: José Luis Gázquez Mateos N° empleado: 10659  
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: 4 julio 2022 Fecha de terminación: 3 nov 2023  
Institución donde se realizará: Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa  
Depto., Laboratorio, etc.: Departamento de Química  
Domicilio de la institución: San Rafael Atlixco 186, Cd. de México  
Teléfono: [REDACTED] Fax: [REDACTED] E-mail [REDACTED]@xanum.uam.mx

### OBJETIVOS DEL PERÍODO SABÁTICO

Ampliar y profundizar en los temas de investigación relacionados con la teoría de funcionales de la densidad de átomos, moléculas y sistemas extendidos.

### 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 checked="" 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 type="checkbox"/> Otros (especifique): _____                 |   |   |

\* 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 type="checkbox"/> Otros (especifique): _____		

**RESUMEN DEL PLAN DE ACTIVIDADES ACADÉMICAS DESARROLLADAS**

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

De acuerdo con el plan de actividades académicas a desarrollar durante el periodo sabático en el tema de desarrollo y validación de funcionales de intercambio y correlación se respondió dos veces a los árbitros sobre el trabajo que se había sometido antes de iniciar el sabático y el artículo fue finalmente aprobado en el Journal of Chemical Physics. Mientras que en el tema de desarrollo y aplicación de nuevos criterios de reactividad se publicaron 5 artículos en revistas indexadas y un capítulo en libro (en prensa), y se presentaron 2 conferencias invitadas en los Congresos de la Sociedad Química de México de 2022 y 2023. Se mantuvo la coordinación del grupo de los 15 investigadores de 5 instituciones de educación superior mexicanas más 10 posdoctorantes en el proyecto sinergia de Conahcyt y se presentó el informe de la segunda etapa. Finalmente, como se planteó en el plan de trabajo obtuvieron su grado de doctor los alumnos José Alejandro Piedras Pérez y Maurizio Alejandro Pantoja Hernández, mientras que el alumno Eduardo Zúñiga Rivera ha tenido un avance significativo.

**PARA USO DEL JEFE DE DEPARTAMENTO**

Después de haber evaluado el informe detallado de actividades del periodo 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

17/01/2024  
Fecha

**PARA USO DEL CONSEJO DIVISIONAL**

El Consejo Divisional, en su Sesión No. \_\_\_\_\_ del \_\_\_\_\_ sobre el Periodo 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 para el periodo sabático**

**José Luis Gázquez Mateos**

En la actualidad, los cálculos de estructura electrónica se han convertido en una herramienta muy útil para el estudio de una gran variedad de tópicos en física, química y biología. La combinación de información experimental, junto con estudios teóricos de estructura electrónica ha sido utilizada con gran éxito en muchos sistemas para alcanzar una mejor comprensión de diferentes fenómenos a nivel microscópico. Este avance ha sido posible, en parte, por el crecimiento en las capacidades computacionales, junto con mejoras muy importantes en los métodos utilizados para determinar la estructura electrónica, y en las herramientas que se han desarrollado para analizar la compleja información matemática, en términos de conceptos con gran significado químico. En relación con los últimos dos aspectos, la teoría de funcionales de la densidad ha jugado un papel fundamental, pues se ha convertido en la herramienta más utilizada, ya que, por un lado, ofrece un buen balance entre la precisión requerida para la descripción de diversas propiedades y el esfuerzo computacional para alcanzarla, y, por otro lado, proporciona un marco teórico idóneo para la fundamentación de conceptos básicos y para la generación de nuevos criterios de reactividad química.

Sin embargo, es necesario mejorar la predicción de propiedades termodinámicas, cinéticas y estructurales con funcionales relativamente sencillos, más allá de los límites actuales, para contar con métodos confiables que puedan ser utilizados en la descripción de una gran variedad de sistemas químicos, sencillos y complejos, con diferentes características. Y también es necesario continuar con la generación y fundamentación de conceptos que permitan convertir la compleja información matemática, en información sencilla y relevante desde el punto de vista químico.

Por otro lado, es importante señalar que en la actualidad se están desarrollando muchas investigaciones, en una gran variedad de campos, utilizando técnicas de inteligencia artificial, que han alcanzado resultados muy relevantes.

En este contexto, en la convocatoria de Ciencia de Frontera 2019, un grupo de quince investigadores de la Universidad Nacional Autónoma de México, del Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, de la Universidad Veracruzana, de la Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo y de la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, sometimos un proyecto en la modalidad de sinergia, cuyo título es "Estructura Electrónica e Inteligencia Artificial Aplicada a Problemas Actuales de Tecnología Química en México", que cubre cinco temas muy importantes:

- a) Desarrollo de catalizadores para la desulfuración del petróleo mexicano.
- b) Estructura electrónica del silicio amorfo para aplicaciones en electrónica.
- c) Polimorfismo en cristales aplicado al estudio de actividad farmacológica.
- d) Toxicidad de pesticidas y alternativas de reemplazo, particularmente el glifosato.
- e) Materiales magnéticos para el desarrollo de sensores.

El desarrollo de este proyecto requiere, de acuerdo con las técnicas de inteligencia artificial, de la elaboración de bases de datos, muy confiables sobre la estructura electrónica y la reactividad química de una gran variedad de moléculas vinculadas con los temas antes mencionados.

Este proyecto fue aprobado en enero de 2021, con una duración de tres años, y yo soy el Responsable Técnico del mismo ante Conacyt.

Dado todo lo anterior, el objetivo que persigo en este periodo sabático es el de ampliar y profundizar en los temas vinculados con:

- 1) El desarrollo y validación de funcionales de intercambio y correlación para alcanzar una mejor descripción de la estructura electrónica de átomos, moléculas y sistemas extendidos.
- 2) El desarrollo y aplicación de nuevos criterios de reactividad para incorporar más herramientas al estudio del comportamiento de sistemas químicos.

Además, como la duración del proyecto es de tres años, y ya sólo quedan dos, considero que es necesario que concentre mis esfuerzos, como Responsable Técnico, en la coordinación de los grupos temáticos, para alcanzar los objetivos planteados en el proyecto.

También presento en la siguiente página de este Plan de Actividades, las relacionadas con la asesoría a los estudiantes de doctorado que trabajan bajo mi dirección, con el visto bueno del Coordinador del Posgrado en Química.



---

Dr. José Luis Gázquez Mateos



---

Dr. Jorge Garza Olguín  
Jefe del Departamento de Química  
Vo. Bo.

## Asesoría de alumnos en proceso

Actualmente soy asesor de tres estudiantes de doctorado en el Posgrado en Química. Dado que voy a permanecer en la Ciudad de México durante el periodo sabático, tengo planeado asistir un día a la semana a la Unidad Iztapalapa para trabajar con ellos y, además, nos mantendremos en comunicación permanente todo el tiempo, como lo hemos hecho durante la pandemia. A continuación, describo la situación de cada uno de ellos y las actividades que realizaremos durante mi periodo sabático:

### 1) José Alejandro Piedras Pérez

Ya concluyó todo el trabajo experimental y todo el trabajo teórico contemplados en su proyecto y ya escribió cuatro de los cinco capítulos contemplados en su tesis. Los resultados del capítulo cuatro ya fueron publicados, y se está escribiendo un segundo artículo, a la vez que se está escribiendo el último capítulo y las conclusiones. Se espera que en este trimestre se concluya todo esto, para iniciar la revisión por parte de los sinodales que le asignen, y que durante el trimestre 22-P pueda llevar a cabo la defensa de su tesis.

### 2) Maurizio Alejandro Pantoja Hernández

Está cursando el Trabajo de Investigación V, por lo que ya tiene un avance importante en su proyecto doctoral. Todo el desarrollo teórico básico ya se realizó, y actualmente se están escribiendo dos artículos y además se están estudiando varios sistemas químicos, a través de los nuevos conceptos desarrollados. Esperamos que durante mi periodo sabático él concluya y presente la defensa de su tesis.

### 3) Eduardo Zúñiga Rivera

En este caso se trata de una codirección junto con el Dr. Javier Carmona Espíndola. Está cursando el trabajo de Investigación I. Ya se realizó el desarrollo teórico básico, pero el proyecto tiene una fuerte componente de programación no trivial en el código de estructura electrónica de Mon2k, que llevará varios trimestres, para proceder posteriormente a las aplicaciones de la nueva metodología. Esperamos que durante mi periodo sabático se lleve a cabo toda la programación y se avance en una de las dos aplicaciones contempladas en el proyecto.



---

Dr. Rafael Arturo Zubillaga Luna  
Coordinador del Posgrado en Química

Vo. Bo.

## **Informe de actividades del periodo sabático**

**Del 04/07/2022 al 03/11/2023**

**José Luis Gázquez Mateos**

El objetivo que establecí para mi periodo sabático fue el de realizar actividades que me permitieran ampliar y profundizar en los temas de investigación relacionados con la teoría de funcionales de la densidad de átomos, moléculas y sistemas extendidos.

Para ello, el plan de actividades propuesto fue el siguiente:

- 1) Realizar investigaciones orientadas al desarrollo y validación de funcionales de intercambio y correlación para alcanzar una mejor descripción de la estructura electrónica de átomos, moléculas y sistemas extendidos.
- 2) Realizar investigaciones orientadas al desarrollo y aplicación de nuevos criterios de reactividad para incorporar nuevas herramientas al estudio del comportamiento de sistemas químicos.
- 3) Coordinar las actividades del grupo de investigadores que participamos en el proyecto de Ciencia de Frontera (modalidad sinergia), para alcanzar los objetivos planteados en él.
- 4) Mantener la asesoría a los estudiantes de doctorado que trabajan bajo mi dirección.

Las metas planteadas para el periodo sabático que sometí al Consejo Divisional fueron de publicar artículos de investigación en revistas de circulación internacional, con arbitraje estricto y participar al menos en un congreso. Además, también presenté en el Plan de Actividades, las relacionadas con la asesoría a los estudiantes de doctorado que trabajan

bajo mi dirección, en el que establecí que dos de ellos concluirían su doctorado y el tercero avanzaría en su trabajo de investigación doctoral.

Así, los resultados alcanzados son los siguientes:

Para el tema 1, se respondió dos veces a los árbitros sobre el trabajo que se había sometido antes de iniciar el sabático y el artículo fue finalmente aprobado,

1. Hardness of molecules and bandgap of solids from a generalized gradient approximation exchange energy functional  
Javier Carmona-Espíndola, Anaid Flores, José L. Gázquez, Alberto Vela and S. B. Trickey  
Journal of Chemical Physics 157, 114109 (2022)

Para el tema 2 se publicaron 5 artículos en revistas indexadas y un capítulo en libro (en prensa), desarrollándose nuevos indicadores de tipo local (reactividad de sitios) y no-local (reactividad de enlaces).

Artículos Publicados:

2. Perturbed reactivity descriptors in the two parabolas model of fractional electron number  
Maurizio A. Pantoja-Hernández, Marco Franco-Pérez, Ramón Alain Miranda-Quintana and José L. Gázquez  
Theoretical Chemistry Accounts 142, 92 (2023)
3. Study of a smooth interpolation between Hirshfeld and iterative Hirshfeld population analyses  
Javier Carmona-Espíndola and José L. Gázquez  
Computational and Theoretical Chemistry 1229, 114335 (2023)
4. Can we predict ambident regioselectivity using the chemical hardness?  
Ramón Alain Miranda-Quintana, Alberto Vela, Frank De Proft, Marco Martínez González and José L. Gázquez  
Physical Chemistry Chemical Physics 25, 13611 (2023)

5. Perturbed reactivity descriptors in the grand canonical ensemble  
Maurizio A. Pantoja-Hernández, Marco Franco-Pérez, Ramón Alain Miranda-Quintana and José L. Gázquez  
Molecular Physics e2199105 (2023). <https://doi.org/10.1002/qua.27076>
6. A conceptual density functional theory approach to substituent effects in fluorescence processes: The case of naphthalimide derivatives  
Alejandro Piedras, Javier Carmona-Espíndola, Rubén Arroyo and José L. Gázquez  
International Journal of Quantum Chemistry 123, e27076 (2023).

#### Capítulo en Libro:

1. Local and non-local descriptors of site and bond chemical reactivity of molecules  
José L. Gázquez, Paulino Zerón, Maurizio A. Pantoja-Hernández, Marco Franco-Pérez  
En “Electron Density: Concepts, Computation and DFT Applications”  
Eds. P. Chattaraj and D. Chakraborty, Wiley (En Prensa)

#### Presentación en congresos (Pláticas por invitación)

1. Conceptual Density Functional Theory for Interacting Species  
Congreso Internacional de la Sociedad Química de México 2022 (Simposio en honor al Prof. José Luis Gázquez Mateos)  
Mérida, Yucatán, México.
2. Frontier orbitals and chemical reactivity in density functional theory  
Congreso Internacional de la Sociedad Química de México 2023 (Simposio de Química Teórica)  
San Luis Potosí, SLP, México.

En el Plan de Actividades también se presentaron las relacionadas con la asesoría a los tres estudiantes de doctorado que trabajaron bajo mi dirección y los resultados son:

1. José Alejandro Piedras Pérez

Se graduó de doctorado el 29 de septiembre de 2022 con la tesis

Síntesis y estudio teórico de la fluorescencia en una familia de moléculas tipo naftalimidadas.

## 2. Maurizio Alejandro Pantoja Hernández

Se graduó de doctorado el 18 de diciembre de 2023 con la tesis

Descriptores de reactividad química para especies interactuantes en la teoría de funcionales de la densidad.

## 3. Eduardo Zúñiga Rivera

Ha avanzado de una manera importante en su proyecto de tesis que trata sobre la teoría de funcionales de la densidad con restricciones en las componentes del momento dipolar. Ya desarrollo la teoría correspondiente a este tema e implementó la metodología en el programa de estructura electrónica DeMon2k. Adicionalmente ya realizó el estudio de transferencia de carga en sistemas no-covalentes con excelentes resultados (ya se está escribiendo un primer artículo). En los próximos meses aplicará esta metodología a otros temas. Considero que para julio del próximo año podría concluir sus estudios.

Finalmente, durante todo el periodo sabático llevé a cabo las labores de coordinación del grupo de 15 investigadores de 5 instituciones de educación superior mexicanas que participamos en el proyecto de Ciencia de Frontera (modalidad sinergia). Cabe destacar que en este proyecto también participan 10 posdoctorantes y se están formando recursos humanos a nivel de maestría y de doctorado. En agosto de 2023 elaboré y presenté el informe correspondiente a la segunda etapa del proyecto.

En conclusión, este periodo sabático me ha permitido profundizar en las líneas de investigación que cultivo, por lo que considero que los objetivos planteados originalmente se cumplieron.

Atentamente,

A solid black rectangular box used to redact the signature of the sender.

Dr. José Luis Gázquez Mateos

Se anexan los documentos probatorios.