

Ciudad de México a 30 de octubre de 2024

Dr. Salomón de Jesús Alas Guardado

Departamento de Ciencias Naturales

PROGRAMA DE ACTIVIDADES ACADÉMICAS A DESARROLLAR DURANTE EL PERIODO SABÁTICO

En el periodo sabático de doce meses, comprendidos entre el 01 de febrero de 2025 al 31 de enero de 2026, se realizarán las actividades siguientes:

1. La estancia de investigación se efectuará, durante los 12 meses del periodo sabático, en el Área Académica de Fisicoquímica de Superficies (FQS) del Departamento de Química de la UAM – Iztapalapa. Se hará colaboración con los investigadores: Dr. Salomón Cordero Sánchez y Dr. Juan Marcos Esparza Schulz, desarrollando el proyecto **“Estudio de reacciones químicas en cúmulos percolantes”**.

Resumen

El estudio de las reacciones heterogéneas gas-sólido tienen un gran impacto a nivel industrial, económico y ambiental, ya que conocer los mecanismos de reacción ayudan a mejorar los sustratos, reducir costos y mitigar las emisiones de gases contaminantes. En particular, las reacciones de oxidación de CO por O₂ y NO sobre superficies metálicas de Pt, Rh y Ni han sido extensamente estudiadas tanto a nivel experimental como computacional. En el ámbito computacional los trabajos han estado dirigidos principalmente sobre superficies homogéneas, esto es, los sustratos se consideran bien mezclados con geometrías Euclidianas. Sin embargo, en la realidad, los sustratos presentan heterogeneidades, están mal agitados, son tortuosos y su geometría es de tipo fractal

Justificación

Este proyecto es la continuación del trabajo desarrollado durante años anteriores. En los años 2021 y 2022 fui asesor de la tesis de maestría de la alumna I. Q. Annabel Lee Tellez Gonzalez, quien se tituló en abril de 2023, haciendo la disertación pública del trabajo “Estudio fractal de reacción de oxidación CO en Pt(100) por Monte Carlo”. Este hecho se hizo en el Área Académica de Fisicoquímica de Superficies, del Departamento de Química, UAM – Iztapalapa, en colaboración con el Dr. Armando Domínguez Ortiz (†) y el Dr. Juan Marcos Esparza Schulz. El pasado mes de julio la alumna Tellez Gonzalez aprobó su

examen predoctoral y fue aceptada para realizar su doctorado en el programa del Posgrado en Química y estoy asignado como co-asesor de su tesis, en conjunto con el Dr. Salomón Cordero Sánchez. El trabajo que desarrollará la M. en C. Annabel L. Tellez G. lleva por título “Estudio computacional de la reacción de oxidación de CO en cúmulos percolantes en 2D impregnados de Pt”. Por tanto, la intención que se tiene durante el periodo sabático es continuar con la colaboración con los profesores del área de FQS y dedicar más tiempo a la dirección de la tesis de la alumna Tellez Gonzalez.

2. Escribir al menos dos artículos de investigación relacionados con la línea de generación y/o aplicación del conocimiento Fisicoquímica y Diseño Molecular, y su posterior envío para su publicación en revistas indizadas que cuenten con arbitraje internacional.

Artículo 1

Este manuscrito se hará con los resultados actuales que ha obtenido la M. en C. Annabel L. Tellez G. en su tesis de doctorado. El manuscrito tiene por título: **Fractal analysis of the CO oxidation reaction on Pt(100) by dynamic Monte Carlo.**

Artículo 2

Este manuscrito es producto del trabajo de investigación de los proyectos de servicio social de la alumna Melisa Sujey Anzures Mendoza y el alumno José Yari Sol Fragoso. El manuscrito tiene por título: **Exploring the thermal stability of CheY proteins from a hyperthermophilic and a mesophilic organism by molecular dynamics simulations.**

3. Escribir y enviar al menos dos artículos de divulgación a revistas que cuenten con arbitraje para su publicación. Los artículos que se pretenden publicar son:

Artículo 1

Título: Estudio de la estabilidad térmica y estructural en proteínas.

Autores: E. López, S. J. Alas

Artículo 2

Título: La importancia de las histonas arqueales en la evolución del genoma

Autores: Juan J. J. Gómez, Salomón J. Alas G

4. Asistencia y participación en al menos dos congresos especializados, ya sean nacionales o internacionales, en el área de la Fisicoquímica. Los congresos que se tienen contemplados en este momento son:

Congreso 1

IX Congreso de Fisicoquímica, Estructura y Diseño de Proteínas, octubre de 2025, Ciudad de Zacatecas, Zacatecas.

Congreso 2

XXIII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, noviembre de 2025, Ciudad de Guanajuato, Guanajuato.

5. Continuación con la dirección de Proyectos Terminales de las alumnas Lizbeth Itzamarait Gómez Tagle Vázquez y Melisa Isabel Martínez Martínez y el alumno David Franco Carrillo, quienes cursan la Licenciatura en Biología Molecular y actualmente están inscritos en el UEA Proyecto terminal I. Las dos alumnas y el alumno desarrollarán los siguientes proyectos:
 - a) Lizbeth Itzamarait Gómez Tagle Vázquez
Análisis de puentes salinos y cúmulos ILV del homodímero de la histona rHMfB de la arquea hipertermófila *Methanothermus fervidus* por dinámica molecular
 - b) Melisa Isabel Martínez Martínez
Estudio de la estabilidad estructural del complejo gliadina y la cadena A de la proteína MHC por dinámica molecular
 - c) David Franco Carrillo
Estudio de la estabilidad térmica del monómero de la proteína Ssh10b de la arquea hipertermófila *Sulfolobus shibatae* por dinámica molecular
6. Continuación con la dirección del proyecto de Servicio Social del alumno David Franco Carrillo, quien iniciará su investigación a partir del 15 de noviembre, desarrollando el tema: Análisis de la temperatura de desnaturalización media de las proteínas histidina fosfotransportadora (HPr) de las bacterias termófila *Bacillus stearothermophilus* (BstHPr) y mesófila *Bacillus subtilis* (BsHPr) por dinámica molecular
7. Posible continuación con la dirección del proyecto de Servicio Social de la alumna Lizbeth Itzamarait Gómez Tagle Vázquez. Aún falta saber si la alumna se incorpora a desarrollar su proyecto con mi dirección, ya que está explorando otras opciones. En

caso de que se decida hacerlo, realizará investigaciones acerca del tema: Estudio de la estabilidad térmica de la proteínas histidina fosfotransportadora (HPr) de la bacteria termófila *Thermoanaerobacter tengcongensis* (TiHPr) por dinámica molecular

A t e n t a m e n t e
“CASA ABIERTA AL TIEMPO”



Dr. SALOMÓN DE JESÚS ALAS GUARDADO
PROFESOR TITULAR C
DEPARTAMENTO DE CIENCIAS NATURALES