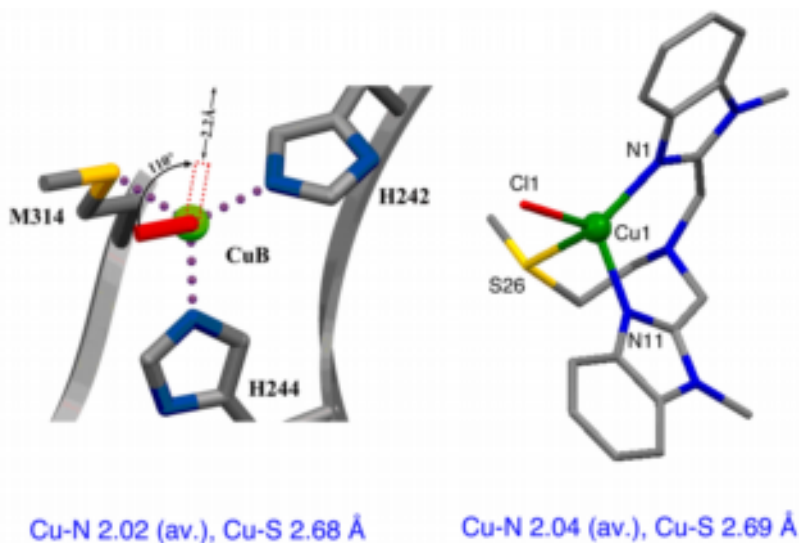


## Ligantes polidentados con donadores N y S en complejos con metales de relevancia biológica

Dr. Iván Castillo Perez  
Instituto de Química UNAM

Nuestro grupo de investigación desarrolla ligantes quelatantes con donadores nitrógeno y azufre análogos a los que están presentes en sitios activos de diversas metaloenzimas. Entre ellas se encuentran la Dopamina- $\beta$ -monooxigenasa (DbM) y la Monooxigenasa  $\alpha$ -hidroxilante de peptidilglicina (PHM) dependientes de Cu, mismas que llevan a cabo la activación selectiva de enlaces C-H no activados. A pesar de conocerse la estructura en estado sólido, el papel del donador tioéter no se ha establecido, de ahí la importancia del estudio de sistemas modelo en la activación de O<sub>2</sub> y subsecuente hidroxilación de sustratos. Otro sistema de interés es el de la enzima Nitrogenasa, que reduce nitrógeno molecular a amoníaco en un sitio activo polinuclear de Fe y Mo. Para ello hemos desarrollado ligantes polidentados amino-tiofenol modulares con un grado de impedimento estérico que debe impedir la formación de cúmulos normalmente observada con este tipo de sistemas. Estos y otros sistemas de inspiración biológica basados en Cu y Fe serán abordados en la presentación.



Sitio activo de PHM y modelo inorgánico

## **Estudios de modelacion molecular en reacciones de gasificacion de materiales carbonosos**

Dr. Juan Fernando Espinal Lopez

Instituto de Quimica, Universidad de Antioquia, Medellin, Colombia

La principal fuente de energía a nivel mundial son los combustibles fósiles. Sin embargo, las reservas probadas de petróleo y gas natural son muy inferiores a las del carbón. Si no se descubren nuevos yacimientos, se espera que a futuro el carbón sea la principal fuente de energía. Por lo tanto, el carbón debe usarse de la forma más eficiente posible. La gasificación del carbón con agentes oxidantes parece ser la mejor alternativa para usar el carbón debido a que se alcanzan altas eficiencias y se facilita el control de los contaminantes. La gasificación puede realizarse con  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{O}_2$  e incluso con  $\text{H}_2$  dependiendo de los productos deseados. Las reacciones con  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{O}$  son procesos endotérmicos mientras que para  $\text{O}_2$  y  $\text{H}_2$  es una reacción exotérmica. Adicionalmente, se ha reportado que metales como sodio, calcio y hierro tienen un efecto catalítico en estas reacciones. Sin embargo, aun no se tiene claridad sobre los mecanismos de la gasificación catalítica a nivel molecular debido a la complejidad de la estructura de los materiales carbonosos y a las limitaciones de las técnicas experimentales disponibles, por lo que la modelación molecular es una buena alternativa para estudiar este sistema. En esta presentación se mostrarán algunos de los resultados de las investigaciones más recientes que hemos desarrollado haciendo uso de la modelación molecular para mejorar nuestro entendimiento de los mecanismos de reacción de materiales carbonosos con diferentes agentes gasificantes.