Academia de Catálisis A.C.

Boletín de la Academia de Catálisis A.C.

www.acat.org.mx

Nº 23

Mayo 2025

Contenido

Editorial 2

Congresos

X Congreso Internacional de Catálisis y XIX Congreso Mexicano de Catálisis 2025 (CMC2025) 3

Notas de divulgación

La Ciencia y la Tecnología Cuántica en Catálisis 6

Difusión de los programas de Posgrado

Posgrados de la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco que realizan investigación en temas de catálisis 12

Editorial

En este número 23 del Boletín de la Academia de Catálisis (ACAT) A. C. presentamos información sobre el próximos X Congreso Internacional de Catálisis y XIX Congreso Mexicano de Catálisis 2025 (CMC2025) sus áreas temáticas, actividades programadas, las conferencias magistrales, las fechas de interés, así como la cede que en esta ocasión se realizará en Poza Rica, Veracruz. Se incluye también, una nota de divulgación de alto interés refiriéndose al Año Internacional de la Ciencia y tecnología cuántica. Además, el número también incluye una nota de difusión de los programas de posgrado en México que ofrecen estudios relacionados con la Catálisis. La primera nota de divulgación se titula "La Ciencia y la Tecnología Cuántica en Catálisis". En ella se comenta por qué se designó este 2025 como el Año Internacional de la Ciencia y la Tecnología Cuántica (AIQ) por la UNESCO. Además, se menciona cómo ha influido la ciencia y la tecnología cuántica en los estudios catalíticos en el desarrollo de nuevos materiales, así como las nuevas oportunidades en catálisis. En la nota "Difusión de los programas de Posgrado" en esta ocasión se presenta los programas de Maestrías y Doctorados que se ofertan en la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco que realizan investigación en temas relacionados con Catálisis. Además, se presentan líneas de investigación, los datos de contacto y la página web donde se puede encontrar más información académica y administrativa útil para aspirantes.

Esperamos que este boletín sea de su agrado y si tienen algún comentario, o propuestas hacia el Consejo Directivo de la ACAT no duden en externarlas para que sientan más suyo esta pequeña, pero valiosa publicación.

Alejandra Espinosa de los Monteros Reyna

Congresos

X Congreso Internacional de Catálisis y XIX Congreso Mexicano de Catálisis 2025 (CMC-2025)

"Catálisis, eje central para la innovación de los procesos sustentables"

Figura 1. Logo del X Congreso Internacional de Catálisis y XIX Congreso Mexicano de Catálisis 2025

La Academia de Catálisis, Asociación Civil (ACAT, A.C.), en colaboración con la Universidad Veracruzana y con apoyo de la sección Sur-Sureste de la ACAT, se complacen en invitar a estudiantes, docentes, investigadores, profesionistas e interesados en temas de catálisis y áreas afines, a participar en el: X Congreso Internacional de Catálisis y XIX Congreso Mexicano de Catálisis, 2025. Que se llevará a cabo del 19 al 24 de octubre de 2025 en la Ciudad de Poza Rica, Veracruz, México.

El CMC-2025 busca reunir a la comunidad científica nacional e internacional especializada en catálisis y disciplinas relacionadas, con el propósito de fomentar el análisis y el intercambio de ideas sobre los avances más recientes en esta área. Este congreso brindará un espacio para:

- Difundir los avances científicos y tecnológicos más recientes en catálisis.
- Fomentar la creación de redes de colaboración entre científicos, académicos e investigadores de diferentes países.

- Establecer vínculos entre la academia y la industria, promoviendo el intercambio de conocimientos y experiencias.
- Difundir los programas de posgrado en catálisis que se ofrecen en México, con el fin de promover la formación de nuevos talentos en este campo.

Dentro de las actividades del CMC-2025 se incluye una variada agenda, que abarca:

- Conferencias magistrales a cargo de expertos internacionales.
- Conferencias invitadas y sesiones orales.
- Sesiones de carteles
- Cursos cortos sobre temas especializados.
- Exposición de materiales y equipos de última tecnología.
- Eventos culturales para conocer y disfrutar de la riqueza de la región.

Los ejes temáticos del CMC-2025 son:

1. Biocatálisis
2. Captura y transformación de CO_2
3. Catálisis ácido-base
4. Catálisis ambiental
5. Catálisis computacional
6. Catálisis de biomasa
7. Catálisis homogénea
8. Catálisis y energías limpias
9. Fotocatálisis, electrocatálisis y fotoelectrocatálisis
10. Ingeniería de las reacciones catalíticas
11. Nanocatálisis
12. Procesos catalíticos sustentables y transición energética
13. Química fina
14. Síntesis y caracterización de catalizadores

Tendremos el honor de contar con las Conferencistas Magistrales de:

- Michael S. Wong — Rice University, US

- José Antonio de los Reyes Heredia — Universidad Autónoma Metropolitana, MX
- Ajay K. Dalai — Universidad de Saskatchewan, CA
- Víctor Gabriel Baldovino Medrano — Universidad Industrial de Santander, CO
- Tatiana Klimova Berestneva — Universidad Nacional Autónoma de México, MX
- José G. Santiesteban Polanco — Jubilado ExxonMobil, US

Las actividades se realizarán en el Hotel sede Poza Rica Inn, la inscripción incluye acceso a todas las sesiones de conferencias, posters, recepción de bienvenida, cena de gala. Asimismo, se conserva el espíritu académico incluyendo la membresía de la ACAT para el año 2026. Para los colegas estudiantes de licenciatura y posgrados asociados a la ACAT se otorgarán las tradicionales becas de inscripción de acuerdo con la convocatoria publicada en la página del CMC-2025. Visita nuestra página WEB o envía un correo a la dirección: becas@cmc2025.com

Fechas Importantes

Recepción de trabajos: **14 de febrero al 16 de mayo** de 2025

Aceptación de trabajos: **A partir del 17 de mayo** de 2025

Congreso: **19 al 22 de octubre** de 2025

Escuela de Catálisis: **23 y 24 de octubre** de 2025

El CMC2025 es una excelente oportunidad para actualizar tus conocimientos, compartir tu investigación, y conectar con colegas y expertos de todo el mundo. ¡Te invitamos a formar parte de este evento internacional de gran relevancia para el futuro de la catálisis y los procesos sustentables!

Para más detalles sobre el congreso, inscripción y envío de resúmenes, visita nuestra página oficial www.acat.org, www.cmc2025.com o al correo: contacto@cmc2025.com

Atentamente

Comité organizador
Consejo Directivo 2024-2025

Notas de divulgación

AÑO INTERNACIONAL DE LA Ciencia y Tecnología Cuántica

La Ciencia y la Tecnología Cuántica en Catálisis

María Guadalupe Cárdenas Galindo (UASLP)

Este año se celebra el centenario del inicio del desarrollo de la mecánica cuántica. Para conmemorar este importante acontecimiento, la Organización de las Naciones Unidas ha designado el año **2025** como el **Año Internacional de la Ciencia y la Tecnología Cuántica** (**AIQ**). La propuesta inicial fue presentada por México al consejo Ejecutivo de la UNESCO y aprobada por unanimidad el 19 de mayo del 2023. Es probable que varios miembros de la ACAT hayan participado en actividades organizadas por diversas instituciones para celebrar este evento. Un ejemplo es el Global Women's Breakfast-IUPAC, que tuvo lugar en la Facultad de Ciencias Químicas de la UASLP el 11 de febrero de 2025. Con el tema *"La Niña y la Mujer en la Ciencia 2025: Impulsando la equidad en la ciencia y tecnología cuántica".*

Figura 2. Poster informativo sobre conferencias en el Global Women's Breakfast-IUPAC, en día de "La Niña y la Mujer en la Ciencia 2025"

Figura 3. Participantes al evento Global Women's Breakfast-IUPAC

Estos eventos buscan que el público en general se familiarice y aprenda más sobre la **ciencia y la tecnología cuántica**. Diversas universidades, empresas y sociedades científicas, entre ellas la Sociedad Mexicana de Física, la UNAM, la UASLP, la Universidad de Guanajuato, la American Physical Society y la International Union of Pure and Applied Physics, se han unido a este esfuerzo, promoviendo actividades en varios países, incluyendo a México. Aunque esta iniciativa fue de los físicos, en el ámbito de la química también existe un gran interés en divulgar la **ciencia y tecnología cuánticas** debido a sus aplicaciones, que entre los miembros de la **ACAT** se centra especialmente en la Catálisis.

¿Pero cómo ha influido la ciencia y la tecnología cuántica en los estudios catalíticos? Principalmente ha tenido gran influencia en el desarrollo de nuevos materiales y en la comprensión de los mecanismos de reacciones catalíticas.

Desarrollo de nuevos materiales

Entre nuevos materiales que han tenido impacto en catálisis están los puntos cuánticos, nanocristales semiconductores que por su pequeño tamaño exhiben **propiedades cuánticas**. Cuando un fotón llega a un punto cuántico, se reemite como luz o se disipa como calor, lo que permite su aplicación en optoelectrónica, biomedicina, paneles solares y nuevos sistemas de iluminación, pero también en biocatálisis, fotocatálisis y electrocatálisis.

La conjugación de los puntos cuánticos de carbono (PCC) con enzimas permiten mejorar la estabilidad y actividad de las enzimas, propiedades que combinadas con la baja toxicidad y biocompatibilidad de los PCCs ofrecen un área de oportunidad para desarrollar nuevos biocatalizadores [Cruz-Cruz y col, 2024]. En fotocatálisis Chávez-García y col (2024) mostraron que PCCs preparados a partir de biomasas fueron activos para la degradación de azul de metileno con luz solar. Los PCCs también han sido usados para modificar las propiedades de electrodos de grafito en conjunto con óxidos metálicos (ZnO) en aplicaciones como sensores electroquímicos para reconocer antibióticos. Estos materiales exhibieron propiedades electrocatalíticas mejores que las del electrodo sin modificar permitiendo bajar los límites detección a valores mucho más bajos que los reportados con otros electrodos [Almada-Leyva y col, 2024].

Mecanismos de Reacción

Para comprender los mecanismos de reacción catalíticos necesitamos un modelo que represente a la superficie catalítica y a las moléculas que interactúan sobre ella y entre sí mismas. Para comprender estas interacciones, es necesario conocer la energía involucrada en cada etapa de la reacción. Esto permite identificar las barreras energéticas que limitan la velocidad de reacción y predecir el efecto de los cambios en la estructura y composición de los catalizadores. La información teórica y experimental incorporada en un mecanismo de reacción facilita el análisis microcinético, lo cual permite estudiar estos efectos detalladamente.

Los estudios teóricos requieren una representación exacta de la superficie catalítica, pero esto no es algo sencillo, debido a que los catalizadores pueden tener composición y estructura complejas, ser amorfos, con presencia de materiales activos con diferentes tamaños soportados en un material que no es necesariamente inerte. Aquí la **ciencia cuántica** es importante porque se pueden realizar estudios *ab initio* y de Teoría de los Funcionales de la Densidad (DFT) con cúmulos y con superficies periódicas para comprender lo que sucede en el ciclo catalítico.

Varios grupos de investigación se han enfocado con éxito al estudio teórico de mecanismos de reacción catalíticos, pero también se han publicado trabajos enfocados a combinar estudios teóricos y experimentales sobre catalizadores. Por citar algunos, entre los primeros tenemos el estudio teórico basado en DFT+U (DFT con la corrección de potencial de interacción de Coulomb) de la reformación de metanol sobre CeO_2 y Ni/CeO_2 desarrollado por Reyna-Alvarado y col. [2022]; el estudio de Chávez-Rocha y col [2023] sobre la adsorción del CO_2 en óxidos metálicos tipo rutilo

utilizando DFT para modelos periódicos; estudios de DFT fueron usados para elucidar la actividad de átomos aislados de metales de transición sobre grafeno dopado con especies de nitrógeno piridínico en la reducción de oxígeno [Alvarado-Leal y col, 2024].

Entre los trabajos que combinan estudios teóricos con experimentales está el de Camposeco y col [2023] sobre la oxidación catalítica de propano sobre nanoestructuras de Ru/TiO_2, donde resultados de caracterización y actividad catalítica fueron explicados en base a resultados de cálculos DFT para modelos periódicos. En el trabajo de Arce y col [2015] DFT para superficies periódicas permitió relacionar los diferentes calores de adsorción de amoníaco observados experimentalmente sobre una superficie de ZrO_2 a la estructura del catalizador y a la densidad de sitios activos.

Una característica común de todos estos trabajos es que involucran reactivos y productos con pocos átomos (CH_3OH, CO_2, C_3H_8, NH_3, átomos aislados) y superficies catalíticas cristalinas (CeO_2, grafeno, ZrO_2, TiO_2). Pero existen catalizadores muy interesantes que pueden ser amorfos, dopados o servir como soportes desde átomos simples hasta nanoestructuras. Adicionalmente, los reactivos y productos suelen ser moléculas con un gran número de átomos, como es el caso de los polímeros. Representar estos materiales es crucial para calcular las energías involucradas en las reacciones químicas de interés. Estos modelos se fundamentan en sistemas base, que son conjuntos de funciones matemáticas utilizadas para describir los estados electrónicos de los átomos y moléculas. Además, los métodos de cálculo, como DFT, permiten aproximar las energías electrónicas y predecir las propiedades químicas y físicas de los materiales. Por tanto, el modelo químico debe considerar varios factores clave, como la geometría molecular de los catalizadores y las interacciones electrónicas. Un modelo periódico permite representar de forma más precisa lo que ocurre sobre la superficie catalítica sin requerir el gran número de átomos que son necesarios en un modelo de cúmulos. Al utilizarse una celda unitaria que se repite un número infinito de veces, se reduce el tiempo de cómputo, pero lo limita a sistemas cristalinos, aun así, es necesario hacer aproximaciones, por ejemplo para los funcionales de intercambio y correlación. El número de orbitales y electrones involucrados en los sitios catalíticos y los átomos vecinos o las moléculas que se adsorben y reaccionan sobre su superficie resulta en que el estudio de mecanismos de reacción sea intratable porque el tiempo del cómputo se incrementa exponencialmente con el número de orbitales.

Es en estos casos donde nuevas alternativas se deben considerar como son los algoritmos cuánticos [Hariharan y col, 2024]. En la computadora cuántica el qubit es análogo al bit de una computadora clásica, pero existe una gran diferencia, mientras que el bit es de naturaleza binaria, el

qubit es la superposición de dos estados base. Por ser más reciente, su principal impacto se empieza apenas a vislumbrar. Permitirá realizar cálculos de mayor complejidad que los que son posibles en computadoras convencionales, muy en particular en sistemas catalíticos heterogéneos donde existen sistemas fuertemente correlacionados. Y el uso de sistemas híbridos (computadora cuántica-computadora convencional) será más común, como lo que se ha comenzado a hacer con las computadoras quánticas en estudios recientes de optimización de bioprocesos [Hernández-Romero y col, 2025]. Aunque el uso de computadoras quánticas es accesible para unos pocos investigadores actualmente, su desarrollo hará su uso cada vez más común con el tiempo.

Nuevas Oportunidades para Catálisis

Es importante que se realice más colaboración entre los investigadores con énfasis en conjuntar el trabajo experimental de investigadores en catálisis y el trabajo de los especialistas en trabajo teórico. Este año habrá múltiples oportunidades para iniciar nuevas colaboraciones o ampliar las que se tienen actualmente por ejemplo en el CMC-2025 o asistiendo al evento *Zeolitas y Materiales Micro-Mesoporos Jerárquicos-Quantum Chemistry inside Zeolite Matrices* organizado por el CNyN y la UNAM del 19 al 21 de noviembre de este año como parte de las actividades del **AIQ 2025**.

1. Almada-Leyva, L., M., Tecuapa-Flores, E. D., García Rojas, L. M., & Thangarasu, P. (2024). Ionic liquid and ZnO/carbon quantum dots derived from cat hair as an electrochemical sensor for ciprofloxacin in food samples: Experimental and cell-imaging studies. *Electroanalysis*, *36*(9), e202300398. https://doi.org/10.1002/elan.202300398

2. Alvarado-Leal, L. A., Paez-Ornelas, J. I., Fernández-Escamilla, H. N., Perez-Tijerina, E. G., Guerrero-Sánchez, J., Romo-Herrera, J. M., & Takeuchi, N. (2024). Influence of the Atomic Local Environment on the ORR Activity of Single-Atom Catalysts in N-Doped Graphene. *ACS Applied Energy Materials*, *7*(11), 4794-4802. https://doi.org/10.1021/acsaem.4c00518

3. Arce-Ramos, J. M., Grabow, L. C., Handy, B. E., & Cárdenas-Galindo, M. G. (2015). Nature of acid sites in silica-supported zirconium oxide: a combined experimental and periodic DFT study. *The Journal of Physical Chemistry C*, *119*(27), 15150-15159. https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b02394

4. Chávez-Rocha, R., Mercado-Sánchez, I., Vargas-Rodríguez, I., Hernández-Lima, J., Bazán-Jiménez, A., Robles, J., & García-Revilla, M. A. (2023). Modeling adsorption of CO2 in rutile metallic oxide surfaces: implications in CO2 catalysis. *Molecules*, *28*(4), 1776. https://doi.org/10.3390/molecules28041776

5. Chávez-García, D., Guzmán, M., Sánchez, V., & Cadena-Nava, R. D. (2024). Green synthesis of

biomass-derived carbon quantum dots for photocatalytic degradation of methylene blue. *Beilstein Journal of Nanotechnology*, *15*(1), 755-766. https://doi.org/10.3762/bjnano.15.63

6. Camposeco, R., Miguel, O., Torres, A.E. *et al.* Highly active Ru/TiO_2 nanostructures for total catalytic oxidation of propane. *Environ Sci Pollut Res* **30**, 98076–98090 (2023). https://doi.org/10.1007/s11356-023-29153-w

7. Cruz-Cruz, A., Rivas-Sanchez, A., González-González, R. B., & Parra-Saldívar, R. (2024). Tuning catalytic attributes of enzymes by conjugation with functionalized carbon dots. *Topics in Catalysis*, 1-13. https://doi.org/10.1007/s11244-024-01911-1

8. Hariharan, S., Kinge, S., & Visscher, L. (2024). Modeling Heterogeneous Catalysis Using Quantum Computers: An Academic and Industry Perspective. *Journal of chemical information and modeling*. https://doi.org/10.1021/acs.jcim.4c01212

9. Hernández-Romero, I. M., Gibford, S. M., Clements, W., Savoie, C. J., Flores-Tlacuahuac, A., & Mansouri, S. S. (2025). Exploring Hybrid Quantum-Classical Algorithms for Multiscale Bioprocess Optimization. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. https://doi.org/10.1021/acs.iecr.4c04624

10. Reyna-Alvarado, J., López-Galán, O. A., Ramos, M., Rodríguez, J., & Pérez-Hernández, R. (2022). A theoretical catalytic mechanism for methanol reforming in CeO2 vs Ni/CeO2 by energy transition states profiles. *Catalysis Today*, *392*, 146-153. https://doi.org/10.1016/j.cattod.2021.05.009

Promoción de Posgrados con Líneas de Investigación en Catálisis

Posgrados de la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco que realizan investigación en temas de catálisis

Figura 4. Logo de la UJAT

La Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, ubicada en el estado de Tabasco cuenta con 12 Divisiones. En la División Académica de Ciencias Básicas (DACB) ubicada en Cunduacán, Tabasco se encuentran dos posgrados integrales que tienen una línea de investigación afín al área de catálisis. Los programas educativos de maestría y doctorado se encuentran registrados en el Sistema Nacional de Posgrados (SNP).

Figura5. Edificio del CICTAT.

La convocatoria los posgrados disponibles en la página https://www.ujat.mx/dacb, para mayores informes pueden escribir al correo de la jefatura de posgrado posgrado.dacb@ujat.mx.

A continuación, se presentan los posgrados que de acuerdo con sus líneas de investigación lideran proyectos con temas relacionados con la catálisis. Asimismo, se presentan los datos de contacto y la página web donde se puede encontrar información académica y administrativa útil para aspirantes.

Tabla 1. Posgrados impartidos en la UJAT orientados al area de catálisis

División	**Posgrados**	**Contacto**	**Campo de conocimiento**	**Líneas de Generación y Aplicación del Conocimiento**
DACB	Maestría en Ciencias con orientación: en Materiales, Nanociencias y Química Orgánica	Coordinador: Dr. Miguel Ángel Vilchis Reyes miguel.vilchis@Ujat.mx *posgrado.dacb@ujat.mx* Página web: https://www.ujat.mx/mco	II. Materiales	I. Propiedades Físicas y Químicas de la Materia Condensada
	Doctorado en Ciencias con orientación: en Materiales, Nanociencias y Química Orgánica	Dr. Carlos Ernesto Lobato García carlos.lobato@Ujat.mx *posgrado.dacb@ujat.mx* Página web: https://www.ujat.mx/dco	II. Materiales	I. Propiedades Físicas y Químicas de la Materia Condensada
	Maestría en Ciencias en Química Aplicada	Dr. José Gilberto Torres Torres gilberto.torres@Ujat.mx *posgrado.dacb@ujat.mx* Página web: https://www.ujat.mx/mcqa	II. Fisicoquímica	2. Fisicoquímica Teórica y Experimental.
	Doctorado en Ciencias en Química Aplicada	Dr. José Gilberto Torres Torres gilberto.torres@Ujat.mx *posgrado.dacb@ujat.mx* Página web: https://www.ujat.mx/dcqa	II. Fisicoquímica	2. Fisicoquímica Teórica y Experimental

Bolétin 23 elaborado por *Alejandra Elvira Espinosa de los Monteros Reyna de la UJAT, María Guadalupe Cárdenas Galindo de la UASLP y Raúl Alejandro Luna Sánchez de la UV*