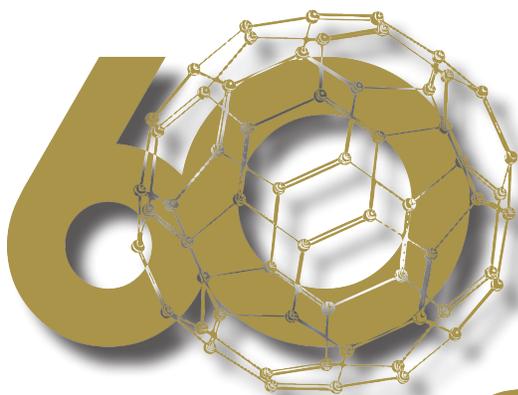




Boletín de la Sociedad Química de México

Volumen 10
Número 2



Sociedad Química
de México, A.C.

Aniversario

“La Química por mexicanos para México”
Jornada Académica



EDITORES

Dra. Margarita Viniegra Ramírez
Dra. Verónica García Montalvo

COMITÉ EDITORIAL

Dra. Catalina Pérez Berumen
Dr. Miguel Ángel Méndez Rojas
Dr. Miguel Ángel Muñoz Hernández

ASISTENCIA EDITORIAL

Estefanie Luz Ramírez Cruz
boletin.sqm@gmail.com

MAQUETACIÓN

Estefanie Luz Ramírez Cruz
Boletín de la Sociedad Química de México,
publicación cuatrimestral.

Certificado de Reserva otorgado por el Instituto
Nacional de Derecho de Autor:

04-2016-021511381800

Certificado de Licitud de Contenido: en trámite.

Registro postal de impresos depositados por sus editores o
agentes otorgado por SEPOMEX: IM09-0312

Derechos reservados Sociedad Química de México, A.C.
La reproducción total o parcial del contenido de esta
publicación está prohibida sin el consentimiento del titular
de los derechos.

Las ideas y opiniones contenidas en esta publicación son
total responsabilidad de los autores.

Editada y distribuida por:

Sociedad Química de México, A.C.
Barranca del Muerto 26,
Col. Crédito Constructor,
Del. Benito Juárez, C.P. 03940,
Ciudad de México
Tel. +5255 56626837;
+5255 56626823
soquimex@sqm.org.mx
http: www.sqm.org.mx

Impreso en Formas e imágenes
formaseimagenes@gmail.com

Tiraje: 600 ejemplares



**LA SOCIEDAD QUÍMICA DE MÉXICO
EN SU 60° ANIVERSARIO**

Es para mí un motivo de alegría y orgullo el que la Sociedad Química de México celebre el 60° Aniversario de su fundación estando yo al frente como Presidente Nacional. El sostenimiento de una organización como la nuestra por sesenta años, no es una tarea sencilla, se necesita del compromiso de muchos, de la participación constante en las actividades que la SQM organiza y además la confianza de todos sus miembros en la pertinencia de su existencia, la importancia de su continuidad y presencia en el quehacer cotidiano de la Química en México.

La Sociedad Química de México es una organización con tradición, comprometida con los profesionales de las ciencias químicas en México y que ve hacia el futuro, reconociendo las áreas de oportunidad para ofrecer mejores servicios a sus socios. En este contexto no podemos dejar de agradecer a los fundadores de nuestra organización, quienes sembraron la semilla para dar cabida en la vida nacional a la SQM y en paralelo, desencadenar un proceso de integración y desarrollo de las ciencias químicas en nuestro país, el cual no se detendrá.

Para celebrar nuestro sesenta aniversario organizamos diferentes actividades especiales, la primera de ellas es la Jornada Académica "Química por Mexicanos para México" llevada a cabo en el CINVESTAV Unidad Zacatenco; y no podemos dejar de lado la celebración del 51° Congreso Mexicano de Química y el 35° Congreso Nacional de Educación Química, los cuales, en esta oportunidad habrán de desarrollarse en la Ciudad de Pachuca de Soto en el estado de Hidalgo contando con la participación de la Universidad Autónoma del Estado.

A lo largo de estos años han sido muchos los logros y los retos vividos por la SQM; en su desarrollo y consolidación han participado y seguirán participando destacados profesionales, investigadores, profesores, estudiantes. A todos, ellas y ellos, les debemos la permanencia de la organización y hoy por este medio, les invito a mantenerse cerca de la Sociedad Química de México, asistir a sus congresos, preparar trabajos destacados que impacten en la formación de los jóvenes. Todos tenemos algo que aportar a la SQM y estoy seguro, que muchas cosas buenas vendrán como resultado de ese apoyo.

Gracias a todos, amigos, socios, colaboradores, empresas, por acompañarnos y participar con nosotros a lo largo de estos años. Sigamos trabajando juntos para hacer de la Sociedad Química de México un punto de referencia en la evolución de la química en nuestro país.

Dr. Benjamín Velasco Bejarano

Presidente Nacional, Sociedad Química de México A.C.

CONTENIDO



NOTICIAS DE LA SQM

“La Química por Mexicanos para México”. Evento conmemorativo del 60° Aniversario de la fundación de la Sociedad Química de México. 4

QUÍMICA Y SOCIEDAD

El desarrollo de la Química en el Sureste de México.
Dr. Víctor Manuel Loyola Vargas 6

Reacciones de Multicomponentes y Radicales Libres desde México.
Dr. Luis Demetrio Miranda 10

Abordando los retos en Energía y Medio Ambiente a través de la Electroquímica.
Dr. Ignacio González Martínez 11

La 4ª Revolución industrial y la Industria Química en México.
Dr. Gerardo Bazán Navarrete 15

ENTREVISTA A

Optimiza la computación la creación de nuevos medicamentos.
Entrevista al Dr. Juvencio Robles García.
Luz Olivia Badillo 20

QUÍMICA Y DESARROLLO

El agua embotellada y los contenedores de plástico ¿Qué tan confiables son?
Delia Montero y Judith Cardoso 22

NOTICIAS DE LA SQM

Factor de Impacto del Journal of the Mexican Chemical Society 27

Firma de memorándum de entendimiento entre ACS y SQM 28

Premios que otorga la Sociedad Química de México A.C. 29

PARA ESTUDIANTES

Seguri-Lab
Dr. Hugo J. Ávila Paredes 30

Últimas Noticias. Plenaristas Invitados al 51° Congreso Mexicano de Química y 35° Congreso Nacional de Educación Química 31

“La Química por Mexicanos para México”.

Evento conmemorativo del 60° Aniversario de la fundación de la Sociedad Química de México. A.C.

La Sociedad Química de México A. C. está cumpliendo su 60° Aniversario y para conmemorarlo desarrollará, a lo largo del año, importantes actividades académicas y de divulgación.

En este contexto el pasado 25 de mayo, se celebró la Jornada Académica “La Química por Mexicanos para México”, teniendo como sede el Auditorio Arturo Rosenbluth del CINVESTAV, en la Ciudad de México.

La jornada fue inaugurada por el Dr. José Mustre, Director General del CINVESTAV quien pronunció un mensaje de reconocimiento y felicitación a la trayectoria de la organización.

A lo largo del día se tuvo la participación de químicos nacionales de primera línea, dedicados tanto a la investigación como al desarrollo de la ciencia y de la industria química en nuestro país. El programa quedó integrado de la siguiente forma:

Dr. Luis Demetrio Miranda Gutiérrez del Instituto de Química, Departamento de Química Orgánica, Universidad Nacional Autónoma de México con la conferencia “Reacciones de multicomponentes y radicales libres desde México”.

Dr. Ignacio González Martínez del Departamento de Química, Área de Electroquímica, Universidad Autónoma Me-

tropolitana, Unidad Iztapalapa, con la conferencia “Abordando los retos en Energía y Medio Ambiente, a través de la Electroquímica”.

Dra. Ma. Yolanda Ríos Gómez, Directora del Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, con la conferencia “Compuestos de origen natural y su impacto en la salud de los mexicanos”.

Ing. Gerardo Bazán, académico de la Universidad Nacional Autónoma de México, con la conferencia “La cuarta revolución industrial y el papel de los químicos para el desarrollo de México”.

Dr. Jorge Ibáñez Cornejo, Director del Departamento de Ingeniería y Ciencias Químicas, Universidad Iberoamericana, Campus Ciudad de México, con la conferencia “La formación de Químicos para el desarrollo de México”.

Dr. Antonio Lazcano de la Facultad de Ciencias, Departamento de Biología Evolutiva, Universidad Nacional Autónoma de México, con la conferencia “Evolución química y el origen de la vida”.

Dr. Dagoberto Cortés Cervantes, Director General de los Laboratorios HORMONA, S.A. de C.V., con la conferencia “La Industria Químico Farmacéutica como Factor de Competitividad en el Desarrollo de México”.

Dr. Víctor Manuel Loyola Vargas de la Unidad Académica



Foto: (de izquierda a derecha) Dr. Benjamín Velasco Bejarano, Dr. Eugenio Cetina Vadillo, Dr. José Mustre de León, y la Dra. María de Jesús Rosales Hoz.



Foto: Dr. Alberto Vela Amieva, CINVESTAV



Foto: Dr. Luis Demetrio Miranda, UNAM



Foto: Almuerzo en los jardines del CINVESTAV, U. Zacatenco.



Foto: Compañeros y amigos en el festejo del 60° aniversario de la Sociedad Química de México A.C.



de Bioquímica y Biología Molecular de Plantas, Centro de Investigación Científica de Yucatán, A.C., con la conferencia “El desarrollo de la Química en el Sureste de México”.

Dr. Alberto Vela Amieva, Jefe del Departamento de Química, Centro de Investigación y Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, con la conferencia “Situación actual y perspectivas de la Química Teórica en México”.

Al evento asistieron alrededor de 280 personas de diferentes instituciones educativas, tanto profesores como estudiantes de pre y posgrado.

A raíz de esta experiencia y apoyados por los comentarios de los participantes en el evento, la Jornada Académica será replicada año con año, ahora con el título Química sin Fronteras. Las jornadas están pensadas como un espacio de discusión amplia en el que se presenten temáticas de frontera de interés tanto para los profesionales de la química como para los jóvenes en formación.

La organización de eventos académicos como el antes descrito, forma parte de los objetivos principales de la SQM. Seguiremos impulsando el diálogo abierto y lo más horizontal posible entre los diferentes actores interesados en la química y impacto en la sociedad.

El desarrollo de la Química en el Sureste de México

DR. VÍCTOR MANUEL LOYOLA VARGAS*



Foto: Dr. Víctor Manuel Loyola Vargas

Introducción

Nuestros ancestros en las tierras que conforman los estados de Chiapas, Tabasco, Campeche, Quintana Roo y Yucatán fueron grandes conocedores de la química. El uso de plantas medicinales, así como el de pigmentos para decorar el vestido y sus construcciones son una pequeña muestra de ello. Sin embargo, el aislamiento que vivieron los habitantes de dichos estados, hasta bien entrado el siglo XX, la forma de vida de los mayas, y la persecución de la que fueron objeto por parte de la iglesia católica, propició que se perdieran muchos de los conocimientos de esta cultura, entre ellos el uso de plantas medicinales.

Por otro lado, en los últimos años la abundancia de petróleo en el Golfo de México frente a las costas de Campeche y Tabasco, propició un desarrollo económico desequilibrado con los otros estados de la región, así como en el desarrollo de sus Instituciones de Educación Superior (IESs). Si bien, hoy en día los cinco estados cuentan con un importante número de entidades dedicadas a la Educación

Superior, también es cierto que existe un importante desequilibrio en las opciones de educación media superior que los egresados pueden escoger.

Un ejemplo de ello es el área de la Química. De acuerdo con los datos publicados por la Asociación Nacional de Universidades e Instituciones de Educación Superior (ANUIES), para el periodo 2014-2015 habían veintitres instituciones de educación superior (IES), once institutos tecnológicos, once universidades y un centro de investigación (Cuadro 1), en los que se imparte alguna carrera del área de la Química. Estas carreras tenían inscritos 9,687 estudiantes (Cuadro 2), siendo importante el hecho de que la proporción entre hombres y mujeres era prácticamente la misma, es decir, 52.5% hombres y 47.5% mujeres..

Desde los años 70 del siglo pasado, se inició la tendencia de que las carreras que ofrecían las escuelas y facultades de Química en el país cambiaron a carreras con nombres más atractivos y aparecieron nuevas carreras para formar estudiantes en los nuevos ámbitos requeridos por la industria en su constante cambio. Por ello, llama la atención el hecho de que las dos carreras más solicitadas por los estudiantes sean dos carreras “tradicionales”. La matrícula en las carreras de Ingeniería Química y Químico Farmacéutico Biólogo conforman el 46.5% de los estudiantes inscritos en las escuelas y facultades de Química (Cuadro 3). Es un hecho que la carrera de Química tiende a desaparecer, no solo en esta zona, sino también en el resto del país, pues tan solo, en estos 5 estados, 300 estudiantes son los que cursan esta carrera.

Cuadro 1. Instituciones que ofrecen programas relacionados con la Química (licenciatura y/o posgrado) en los estados de Campeche, Chiapas, Quintana Roo, Tabasco y Yucatán en el periodo 2014-2015. (Fuente ANUIES, <http://www.anui.es.mx/>)

Consultada el 9 de mayo de 2016)

Institución	ITs	Us	ClS
Campeche	2	2	0
Chiapas	3	2	0
Tabasco	4	5	0
Quintana Roo	0	1	0
Yucatán	2	1	1

* Unidad de Bioquímica y Biología Molecular de Plantas, CICY, Calle 43 No. 130 x 32 y 34, Col. Chuburná de Hidalgo, CP 97205, Mérida, Yucatán.

Cuadro 2. Estudiantes inscritos en programas relacionados con la Química en los estados de Campeche, Chiapas, Quintana Roo, Tabasco y Yucatán en el periodo 2014-2015.

(Fuente ANUIES, <http://www.anuies.mx/>
Consultada el 9 de mayo de 2016)

Estado	Hombres	Mujeres	Total	Porcentaje
Campeche	806	725	1531	16
Chiapas	912	967	1879	19
Quintana Roo	44	45	89	1
Tabasco	2417	2135	4552	47
Yucatán	909	727	1636	17
Total	5088	4599	9687	

En los estados de Tabasco y Campeche existe la posibilidad de cursar carreras cuyo principal sujeto de estudio es el petróleo (Cuadro 3), siendo más de 1,500 estudiantes los que participan en los 3 programas existentes. Sin embargo, hoy en día, en ambos estados se han cerrado más de 12,000 fuentes de trabajo relacionadas con esta industria. Desde luego, estas licenciaturas deberán reestructurarse para dar acomodo a la nueva realidad relacionada con los precios del petróleo y el cambio de paradigma de su uso como materia prima para producir derivados de mayor valor agregado en lugar de ser utilizado como combustible.

En relación con los estudios de posgrado, existen seis programas, cinco maestrías y un doctorado (Cuadro 4). La matrícula en estos programas para el año lectivo 2014 - 2015 fue de 108 estudiantes, nueve de ellos de doctorado. Este es un factor que debe mejorar de manera importante en nuestras IESs.

Investigación

El sureste mexicano es rico en flora endémica. Este hecho ha propiciado el desarrollo de la investigación en productos naturales. Varias instituciones han estado estudiando la flora del sureste, tanto desde el punto de vista biológico –identificación, clasificación, etc.– como desde el punto de vista fitoquímico. Adicionalmente, se formó un grupo en el Centro de Investigación Científica de Yucatán para estudiar la formación de productos naturales en células cultivadas *in vitro* utilizando técnicas de la biotecnología.

La Universidad Autónoma de Yucatán es la institución con más publicaciones, en tanto que las instituciones más jóvenes están en vías de consolidación. En las seis instituciones estudiadas se realiza investigación en química. El porcentaje de las publicaciones en el campo de la Química varía entre 2.74% y 13.16% del total de publicaciones siendo el CICY la IES con mayor número de publicaciones en el campo de la Química.

Los campos de la Química en los que los profesores-investigadores de las IESs estudiadas han publicado abarcan prácticamente todas las áreas de la Química. Los campos con más publicaciones son los de los productos naturales en particular la caracterización fitoquímica de la flora del sureste y la búsqueda de posibles aplicaciones de los productos obtenidos y el uso de técnicas biotecnológicas para la obtención de productos naturales.

En el caso de la extracción de productos naturales se han estudiado prácticamente todas las partes de las plantas y una gran variedad de ellas. Entre las plantas se encuentran las raíces de *Hippocratea excels*, *Chiococca alba* y *Jacquinia flammea*. Compuestos obtenidos de *Serjania yucatanensis* tienen actividad tripanocida y los de *Diospyros anisandra* y de las raíces de *Colubrina greggii* tienen actividad antimicrobiana, en tanto que flavonoides extraídos de *Lonchocarpus spp.* presentan actividad citotóxica y antiprotozoica. Orquídeas como *Laelia speciosa* y *Laelia anceps* también son fuente de productos naturales. Se han obtenido pregnanos de *Sansevieria hyacinthoides*, así como flavonoides de *Lonchocarpus yucatanensis* y *L. xuul*, y diversos compuestos de

Cuadro 3. Estudiantes inscritos en las seis carreras más solicitadas del campo de la Química en los estados de Campeche, Chiapas, Quintana Roo, Tabasco y Yucatán en el periodo 2014-2015.

(Fuente ANUIES, <http://www.anuies.mx/>
Consultada el 9 de mayo de 2016)

Carrera	Hombres	Mujeres	Total
Ingeniería Química	1,775	1,366	3,141
Químico Farmacéutico Biólogo	1,228	1,438	2,666
Carreras relacionadas con el petróleo	969	608	1,577
Ingeniería Bioquímica	660	646	1,306
Carreras relacionadas con los alimentos	170	265	435
Química	138	167	305



Cuadro 4. Programas de posgrado y sus estudiantes en el campo de la Química en los estados de Campeche, Chiapas, Quintana Roo, Tabasco y Yucatán en el periodo 2014-2015.

(Fuente ANUIES, <http://www.anuies.mx/> Consultada el 9 de mayo de 2016)

Estado/Institución/Programa			
CAMPECHE			
Universidad Autónoma del Carmen			
Maestría en Ingeniería Petrolera	23	9	32
CHIAPAS			
Instituto Tecnológico de Tuxtla			
Maestría en Ciencias e Ingeniería Bioquímica	13	16	29
Universidad Autónoma de Chiapas			
Maestría en Bioquímica Clínica	11	16	27
TABASCO			
Universidad Popular de Chontalpa			
Maestría en Química Sustentable	2	3	5
YUCATÁN			
Universidad Autónoma de Yucatán			
Maestría en Ciencias Químicas y Bioquímicas	4	5	9
Doctorado en Ciencias Bioquímicas	3	3	6
	56	52	108

Cuadro 5. Publicaciones realizadas por los profesores-investigadores de las IESs de los estados de Campeche, Chiapas, Quintana Roo, Tabasco y Yucatán en el periodo 2014-2015.

(Fuente Scopus, <http://www.scopus.com/> Consultada el 9 de mayo de 2016)

Institución	Publ.	Química
Universidad Autónoma de Chiapas	401	11
Universidad Autónoma de Yucatán	2359	102
Universidad Autónoma Juárez Tabasco	827	70
Universidad Quintana Roo	232	24
Universidad Autónoma del Carmen	331	15
Centro de Investigación Científica de Yucatán, A.C.	1231	162

las hojas de *Pentalinon andrieuxii*.

Otras especies que han sido estudiadas para determinar la composición de sus compuestos son: *Cnidocolus aconitifolius*, *Ocimum micranthum*, *Parthenium hysterophorus*, *Heliotropium angiospermum*, *Jatropha gaumeri*, *Chiococca alba*, *Capraria biflora*, *Solanum hirtum*, *Cissampelos pareira*, *Thevetia gaumeri*, *Bursera simaruba* y *Urechites andrieuxii*.

Un caso importante es el de los profesores-investigadores de Chiapas. Sus publicaciones en los últimos años se han centrado en la extracción, cuantificación e identificación de los ácidos grasos contenidos en los triacilglicéridos presentes en el aceite de las semillas de *Jatropha curcas*. En el pasado reciente, este estado, junto con el estado de Yucatán, realizaron un importante esfuerzo para cultivar *J. curcas* y extraer el aceite de sus semillas.

En el caso de los estudios que utilizan herramientas biotecnológicas para la obtención de productos naturales, se encuentran diferentes modelos, como son: *Catharanthus roseus*, *Datura stramonium*, *Coffea spp.*, *Bixa Orellana*, *Pentalinon andrieuxii*, *Argemone mexicana* y *Capsicum chinense*. En todos los casos se han producido diferentes tipos de cultivo de tejidos vegetales, siendo los más utilizados las suspensiones celulares y las raíces transformadas obtenidas mediante la transformación de tejidos con *Agrobacterium rhizogenes*; sin embargo, también se han empleado callos, protoplastos y tejidos obtenidos por transformación con *A. tumefaciens*.

El uso de técnicas biotecnológicas permite la manipulación del sistema para modificar el contenido y el tipo de compuestos producidos por el tejido. Entre los inductores más empleados se encuentran la adición de homogenados de hongo, ácido salicílico o ácido jasmónico, o la exposición de los cultivos a extremos ambientales como la presencia de metales pesados, salinidad o choque osmótico. Esta manipulación ha permitido estudiar en detalle la ruta de biosíntesis de varios compuestos de interés, como la bixina en *B. orellana*, los alcaloides monoterpén indólicos en *C. roseus*, y la biosíntesis de *sanguinarina* en *A. mexicana*. El estudio de las rutas mencionadas se está llevando a cabo no solamente midiendo el contenido de los compuestos bajo diferentes condiciones medioambientales, sino estudiando la expresión de los genes que codifican para las enzimas involucradas en dichas rutas, así como midiendo la actividad de las enzimas que producen los compuestos en estudio.

El uso del cultivo de tejidos también ha permitido el escalamiento del proceso. Las suspensiones celulares de *C. roseus*, así como los cultivos de raíces transformadas, tanto de *C. roseus* como *D. stramonium* han sido escalados a reactores de 14 L.

Conclusiones

Los datos y análisis estadísticos de las publicaciones sobre Química realizadas por los profesores-investigadores en el Sureste de México que aquí presentamos, permiten concluir que hay una importante vida “Química”. También se puede destacar que hay una importante oferta de programas de licenciatura en el campo de la Química, en tanto que la oferta de programas de posgrado es muy pobre.

La investigación en el campo de la Química que se realiza en el sureste es modesta, pero muestra una clara tendencia a la alza, tanto en el número de artículos publicados, como en la calidad de las publicaciones que se están realizando. También se puede detectar un cambio en el paradigma de la investigación Química en las IESs del sureste mexicano.

El aspecto más importante en el que se debe trabajar es en la baja oferta de programas de posgrado en el ámbito de la Química, en particular de doctorado. Este programa deberá incluir también un importante esfuerzo de reclutamiento de buenos estudiantes para dichos programas. La incorporación de nuevos profesores-investigadores, sobre todo de la nueva modalidad de Catedráticos Conacyt, deberá contribuir al desarrollo de los programas de posgrado de la zona. Deberá tenerse cuidado que estos jóvenes investigadores no sean saturados con la burocracia de nuestras instituciones, ni tampoco de clases. También se les deberá apoyar para que puedan iniciar su investigación. Si esto no sucede, como parece ser el caso en algunas IESs, estaremos cometiendo un gran error y dejando pasar una importante oportunidad para brindar a nuestros estudiantes mejores cuerpos académicos.

Reacciones de Multicomponentes y Radicales Libres desde México.

DR. LUIS DEMETRIO MIRANDA*

El descubrimiento de pequeñas moléculas capaces de modular el funcionamiento de las macromoléculas biológicas, es de importancia central para el tratamiento de las enfermedades. Así pues, la búsqueda de nuevos medicamentos útiles para combatir los padecimientos de la humanidad, hace necesaria la producción de una amplia distribución de compuestos químicos, incluyendo aquellos que son poco conocidos e incluso aquellos aún no conocidos. La Síntesis Orientada a la Diversidad Estructural (DOS – Diversity Oriented Synthesis) tiene como objetivo, diseñar estrategias sintéticas para construir colecciones de moléculas que tengan complejidad estructural diversa (Una secuencia sintética para producir familias de moléculas con estructuras diferentes). Con estos protocolos se facilita el acceso a una número mayor de moléculas estructuralmente diversas, de manera eficiente en un número menor de pasos. Adicionalmente, la planeación de rutas sintéticas incluyendo conceptos tales como economía atómica y en purificaciones, y la máxima convergencia de sustratos, combinadas con el uso de condiciones de reacción catalíticas y en transformaciones en cascada o consecutivas, sin duda da lugar al desarrollo de protocolos más poderosos y con un impacto menor al medio ambiente.

En los últimos años, nuestro grupo de investigación ha trabajado en el desarrollo de metodologías utilizando una reacción de multicomponentes de Ugi, en donde al variar uno de los componentes (materias primas) y pasando por dos o tres procesos químicos posteriores, se pueden construir familias de moléculas con diferente estructura (Figura 1). Las moléculas preparadas son de tipo-productos naturales o con posible actividad farmacológica. Hemos explorado la combinación de una reacción de Ugi con reacciones vía radicales libres, o en cascada catalizadas por paladio o tipo Pictet-Spengler/metilación reductiva. En un ejemplo de los trabajos realizados, dependiendo de la amina que se utiliza en la

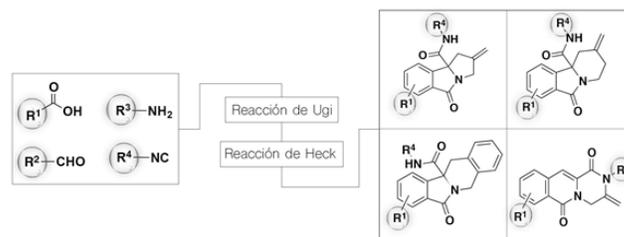


Figura 1. Combinación programada de dos ó tres procesos químicos, con materias primas variables en estructura.

Reacción de Ugi, el intermediario que se genera permite protocolos conceptualmente diferentes de formación de enlaces C-C catalizados por paladio. Cuando se usó alil- o homoalilamina se obtuvieron familias de benzopirrolizidinonas y benzoindolizidinonas, a través de una reacción en cascada de Heck 5-exo/5-exo o 5-exo/6-exo. Cuando se utilizó benzilamina, se obtuvieron diferentes sistemas tetraciclicos fusionados a través de una reacción en cascada 5-exo/inserción oxidativa C-H. Con propargilamina en la reacción de Ugi, se generaron pirazinoisoquinolonas mediante un proceso de Heck 6-endo. En este contexto, la variación de la estructura del ácido carboxílico en la Reacción de Ugi, permite también la modificación estructural de los productos finales.

* Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior S.N., Ciudad Universitaria, Coyoacán, CDMX. 04510, México.
email: lmiranda@unam.mx

Abordando los retos en Energía y Medio Ambiente a través de la Electroquímica

DR. IGNACIO GONZÁLEZ MARTÍNEZ*

Las políticas actuales de apoyo a las investigaciones mundiales y particularmente mexicanas, consideran la asociación de grupos multidisciplinarios para enfrentar problemas relacionados a la salud, energía y medio ambiente, entre otros; problemas que deben ser abordados desde la ciencia básica hasta el desarrollo de un proceso escalable a nivel industrial. En la UAM-Iztapalapa se están formando redes de investigación para incursionar en estos campos. Particularmente, he estado involucrado en la red para abordar problemas en energía y medio ambiente utilizando celdas electroquímicas.

Las celdas electroquímicas son dispositivos que permiten, por una parte, llevar a cabo reacciones químicas utilizando la electricidad. Esta situación las hace una alternativa viable para la degradación de compuestos recalcitrantes tanto en efluentes industriales como en suelos contaminados, ya que no se adicionan reactivos adicionales (la electricidad es el reactivo). En este caso, se han establecido estrategias para el tratamiento de efluentes provenientes de diferentes industrias (ej. textil, galvanoplastia, autolavados, hospitalaria, entre otras), estas estrategias consideran la evolución de la investigación básica para la selección electrocatalizadores (ej. ánodos para formar oxidantes potentes como radicales hidroxilo fisisorbidos o “cloro activo”), hasta la caracterización del transporte de masa y distribución de potencial y corriente de la celda para diseñar y construir celdas compactas y eficientes para tratar volúmenes de efluentes a nivel industrial.

Otra característica de las celdas electroquímicas es la producción de electricidad a través de reacciones químicas, haciendo de esto la ciencia principal para el desarrollo de generadores y acumuladores de energía. El crecimiento acelerado de la población y el florecimiento de los estándares de vida requieren un incremento considerable en la producción de energía, representando un gran reto tecnológico y ambiental, ya que la mayoría de la energía en el mundo se produce a partir de combustibles fósiles no

renovables. Esta producción emite una gran cantidad de subproductos como el CO₂, que representa un impacto ambiental negativo. Para disminuir este impacto se están utilizando fuentes renovables de energía como: el viento, luz solar, geotérmica, entre otras. La producción de energía utilizando estas fuentes generalmente es intermitente y puede ser de gran magnitud, de esta manera es necesario el desarrollo de dispositivos de almacenamiento de energía que sean capaces de poseer una alta densidad de energía a almacenar y una alta velocidad para dispensar la energía cuando sea requerida, por lo que se requieren acumuladores versátiles que permitan almacenar la mayor cantidad de energía; y además que puedan suministrar la energía según el tipo de demanda, sea paulatina (baterías) o bien de manera instantánea (capacitores).

El desarrollo de procesos innovadores y eficientes para el tratamiento de efluentes y de almacenamiento de energía basados en celdas electroquímicas está directamente asociado a la selección de los materiales que constituyen los ánodos, cátodos y electrolitos. La selección de los materiales para la construcción de estos sistemas, puede efectuarse empleando alguna de las siguientes estrategias: a) la más común y sólo empírica, consiste en probar una serie de materiales de manera aleatoria y con un gran número de pruebas; b) diseño multi-escala de materiales, empleando la colección de las diferentes propiedades y fenómenos pertinentes a una escala en particular (nanoescala, microescala, mesoescala y macroescala), siendo introducidos a la siguiente escala de mayor tamaño para proporcionar una mayor sensibilidad de los primeros principios que rigen cada una de las escalas. Esta metodología se efectúa hasta llegar al nivel macroscópico, siendo este último el que por lo general evalúa el funcionamiento global del dispositivo electroquímico, y donde la mayor parte de los métodos experimentales proveen una respuesta confiable de la eficiencia y rendimiento del sistema.

De esta manera la hipótesis asociada al trabajo multidisciplinario para el desarrollo de celdas electroquímicas para el tratamiento de efluentes y el almacenamiento de energía es que el diseño multi-escala permitirá emplear información de los descriptores intrínsecos evaluados a nivel nano y microescala (átomos y clusters), describiendo las

* Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa.
Departamento de Química. Av. San Rafael Atlixco 186.
Col. Vicentina, 09340 México, CDMX.
Email: igm@xanum.uam.mx

propiedades de los materiales y la velocidad de los procesos limitantes en las celdas de tratamiento de efluentes y almacenadores de energía para sintetizar materiales de forma macroscópica que se empleen para la construcción de dispositivos eficientes y novedosos.

De esta manera el eje principal de la investigación se describe en la Figura 1.

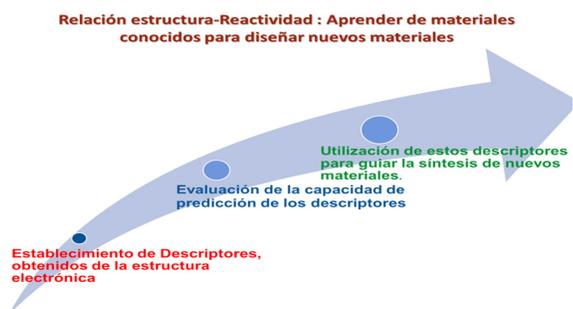


Figura 1. Estrategia para el desarrollo de materiales innovadores para mejorar el desempeño de las celdas electroquímicas.

Esta estrategia ha representado un reto desde el punto de vista fundamental, ya que es necesaria la descripción de la estructura electrónica de los materiales en estado sólido que se utilizan como electrocatalizadores (óxidos metálicos), como cátodos y ánodos (estructuras cristalinas que intercalan iones litio) o conductores iónicos poliméricos. A pesar de estas complicaciones hemos avanzado y, a continuación se describen tanto el principio del fenómeno que involucra el funcionamiento de un material específico y los avances en el desarrollo de los descriptores electrónicos asociados a este funcionamiento.

Tratamiento de efluentes

El factor determinante de la eficiencia de electromineralización (oxidación hasta CO_2), en un reactor electroquímico para el tratamiento de aguas residuales industriales, contaminadas con agentes orgánicos recalcitrante, es la naturaleza del material empleado como ánodo. En décadas pasadas, se han evaluado múltiples electrocatalizadores para lograr este objetivo, sin embargo, únicamente el dióxido de plomo, dióxido de estaño y diamante dopado con boro (BDD) han sido sistemáticamente capaces de degradar la materia orgánica hasta CO_2 , siendo el BDD el que mejor cumple los requisitos de eficiencia para aplicaciones prácticas. En la Figura 2 se muestra el ciclo de oxidación electroquímica de agua y las etapas que determinan la ruta de oxidación y los productos formados.

El dióxido de plomo es susceptible de disolverse en el electrolito, generando la necesidad de acoplar al reactor un procedimiento eficiente de eliminación del Pb^{2+} . El SnO_2 , presenta una alta resistividad y tiempo de vida útil muy corto, mientras que el alto costo de fabricación del BDD ha limitado fuertemente su implementación masiva. Consecuentemente, la comunidad electroquímica ha dirigido sus esfuerzos al desarrollo de nuevos materiales anódicos para la mineralización total de moléculas orgánicas pero a menores costos de fabricación. De esta manera el objetivo del grupo de trabajo es determinar procedimientos teóricos, que permitan reproducir las tendencias en reactividad experimental de estos materiales, hacia la electrodegradación, y relacionarlas con características electrónicas intrínsecas de ellos, aprovechando los grandes avances reportados en la literatura en el estudio de estas superficies y su reactividad electroquímica. El objetivo final es identificar las propiedades comunes asociadas con la electrocatalisis en los materiales conocidos, con el fin de proyectar las propiedades de estructura electrónica necesarias de un material ideal para la combustión electroquímica.

En principio, se realiza el estudio termodinámico de las tres reacciones principales del proceso de electro-oxidación por radicales hidroxilo:



Donde la superficie puede ser BDD, IrO_2 , SnO_2 , PbO_2 , RuO_2 ó TiO_2 . El sufijo ads, indica adsorción, y R, denota una especie orgánica contaminante.

Se utilizó el modelamiento ab-initio de sólidos extendidos generando modelos de superficie representativos de las propiedades conocidas, que tienen más impacto en la degradación orgánica experimental. Posteriormente, se estudió la adsorción de la molécula de agua y del radical hidroxilo en diferentes posiciones iniciales antes de la optimización de geometría, y modelando las interacciones de Van der Waals. Se usaron métodos DFT implementados en el código Vienna Ab-Initio Simulated Package (VASP), empleando el método de Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) para el cálculo de la energía de intercambio y correlación electrónicas y un conjunto base de ondas planas, con el método de ondas planas aumentadas proyectadas (método PAW). PAW-PBE es reconocido como el método más confiable para la descripción de puentes de hidrógeno y propiedades del bulto y de superficie del agua.

Se confirma la viabilidad de la metodología teórica em-

producen en los intersticios existentes en la red del sólido (disolvente), (3) entre la existencia de una estructura liteada (reducida) y otra parcialmente liteada (parcialmente oxidada) se debe de establecer una diferencia de potencial eléctrico, suficiente para realizar trabajo sobre una carga externa, (4) Los cambios de dimensión de la estructura del material de inserción no deben de ser significativos y (5) deben de ser operables en un intervalo de potencial compatible con el intervalo de estabilidad redox asociado al electrolito utilizado.

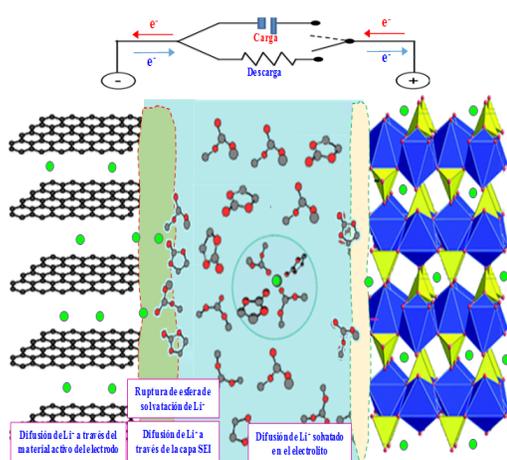
Debido a la complejidad en la descripción electrónica de los materiales de intercalación, todavía se están estructurando estrategias teóricas para evaluar la estabilidad y reactividad de las redes cristalinas durante la imposición de un potencial eléctrico y su relación con la intercalación de iones litio. Se han desarrollado protocolos para evaluar diferentes estrategias de síntesis de este tipo de materiales de intercalación (ej. solvotermal, estado sólido, microondas) y se han sintetizado fases sólidas con diferentes estructura cristalinas (tipo olivina, laminares). Por otra

parte, se han desarrollado los protocolos para ensamblar celdas de ion litio de manera confiable y reproducible, al parecer por primera vez en México; esto ha permitido evaluar la potencia y la estabilidad del ciclado de celdas construidas con materiales novedosos como cuparts, bismutato de litio entre otros.

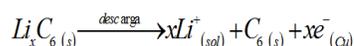
Los artículos siguientes muestran parte de los avances en este tema:

Ramos-Sánchez, G.; Romero-Ibarra, I.; Vazquez-Arenas, J.; Tapia, C.; Aguilar-Eseiza, N; González, I. *Journal of the Electrochemical Society*, sometido.

Nava, D.P.; Guzmán, G.; Vazquez-Arenas, J.; Cardoso, J.; Gomez, B.; González, I. *Solid State Ionics*. 2016, 290, 98-107.



Oxidación del ánodo



Reducción del cátodo

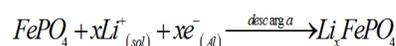


Figura 3. Esquema global de los componentes de una celda de ion Litio (LiB). Cátodo. Grafito Liteado. Electrolito: LiPF₆ en carbonato de propileno y etilpropileno; ánodo: óxidos metálicos de intercalación (ej. FePO₄). Se muestran las reacciones electroquímicas.

La 4ª Revolución industrial y la Industria Química en México

DR. GERARDO BAZÁN NAVARRETE*

Resumen

La dinámica de la Industria Química en México no es ajena a los efectos de la Cuarta Revolución Industrial basada en la aplicación de inteligencia artificial, robótica, nanotecnología, biotecnología, así como de internet para el manejo de la producción y comercialización, localizando servicios a clientes en cualquier parte del mundo.

En términos generales, el sector químico mexicano está superando una larga etapa de decrecimiento, aunque se observa que cerca del 80% de la exportación mexicana depende de los procesos de importación temporal, un debilitamiento de cadenas productivas y una modesta competitividad. Una de las preocupaciones es la corrupción e impunidad que imperan en el país.

Abstract

The dynamics of the chemical industry in Mexico is not immune to the effects of the fourth industrial revolution based on the application of artificial intelligence, robotics, nanotechnology, biotechnology and internet for the management of production and marketing, localizing customer service in any part of the world.

In general, the Mexican chemical sector is overcoming a long decrease period, although. The 80% of the Mexican exports depends on temporary importation process, a weakening of productive chains and a modest competitiveness. One of the concerns is the corruption and impunity prevailing in the country.

Palabras Clave

Industria química; Productivas; Biotecnología; Robótica; Internet.

* Académico,
Universidad Nacional Autónoma de México.- UNAM

Cuatro revoluciones industriales han modificado, en general, los sistemas de producción en el mundo, las estructuras socioeconómicas y los comportamientos de la humanidad.

Un resumen de los motores que han propiciado y caracterizado estos cambios se encuentra en el Cuadro I.

1ª	Introducción de instalaciones de producción impulsadas por agua y vapor	Finales Siglo XVIII
2ª	Producción masiva con base en división del trabajo y el impulso de la electricidad	Finales Siglo XIX
3ª	Introducción de Electrónica, Tecnologías de la Información, orientadas a la Producción Automatizada	Finales Siglo XX
4ª	Con base en Inteligencia artificial, robótica, nanotecnología, biotecnología, creación de plataformas; se caracteriza por la aplicación del internet a la industria en el manejo de la producción y comercialización, localizando servicios a clientes en cualquier parte del mundo.	Siglo XXI

Cuadro I. Revoluciones industriales

En la 4ª Revolución destacan varios puntos:

- Cambios muy rápidos.
- Fuertes impactos en las estructuras industriales, laborales y educativas.
- Enfatizando en la educación de las futuras generaciones.
- Déficit corriente de profesionistas en tecnologías de alta especialidad .
- El valor de las industrias está dominado por la tecnología.

Derivado de este contexto sobresale el concepto de glo-

balización de los mercados donde los países quedan catalogados de acuerdo a su competitividad relativa. Para la industria química mexicana es conveniente conocer el medio ambiente internacional al respecto.

Competitividad Internacional

Los principales pilares de competitividad para el Foro Económico Mundial, así como la posición de México con respecto a 133 países se muestran en el Cuadro 2.

Como se puede apreciar, el índice general de México es el lugar 60 de 133, es decir, el país tiene la necesidad y el reto de mejorar en diversos aspectos dentro de los indicadores enunciados.

Al incursionar en el aspecto industrial, que es el sector particular que nos ocupa, se puede observar que solo unas cuantas ramas de la actividad industrial han mantenido una actividad creciente. Es el caso de la industria

	PILARES DE LA COMPETITIVIDAD	LUGAR
1	INSTITUCIONES (Marco legal y Administrativo dentro del cual los individuos, empresas y gobierno interactúan para generar ingresos y bienestar a la economía)	98
2	INFRAESTRUCTURA	69
3	ESTABILIDAD MACROECONÓMICA	28
4	SALUD Y EDUCACIÓN BÁSICA	65
5	EDUCACIÓN SUPERIOR Y CAPACITACIÓN	74
6	MERCADOS EFICIENTES (Producir la mezcla adecuada en manufacturas y servicios; y que ambos sean comercializados eficientemente)	90
7	MANO DE OBRA Y TALENTO	115
8	MERCADO FINANCIERO	73
9	TECNOLOGÍA	71
10	INNOVACIÓN	78
	ÍNDICE GENERAL MÉXICO	

Cuadro 2. Pilares de la competitividad.

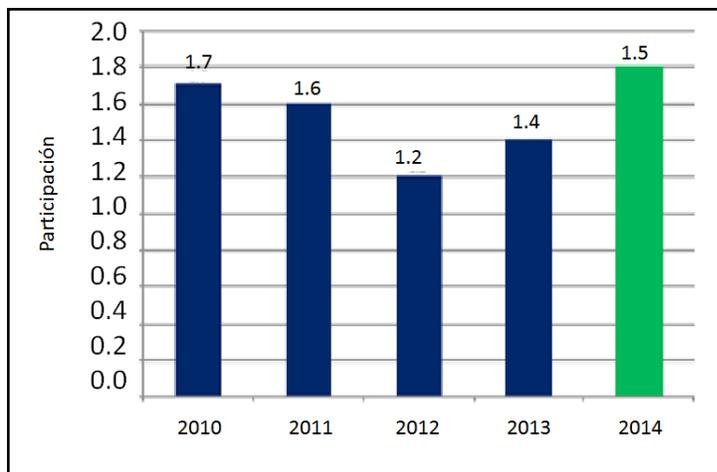


Figura 2. Participación % de la Industria Química al PIB 2010-2014

automotriz y la electrónica. Por otro lado, la Figura 1, también muestra que el sector químico, durante el período de 1997-2008, sufrió una caída en su actividad.

Tratando de ampliar el análisis es conveniente traer a colación el ámbito de participación de la industria química en nuestro país (Figura 1).

Con el propósito de obtener algunas conclusiones que permitan identificar fortalezas, debilidades y retos, se presenta el siguiente DIAGNÓSTICO.

La figura 2, muestra la participación de la Industria Química en su conjunto dentro de la actividad económica nacional.

Como se aprecia, después de una tendencia a la baja, la industria química está experimentando una ligera recuperación entre el 2012 y el 2014.

Por otra parte, aunque el Consumo Nacional Aparente, en términos de volumen, tuvo un incremento con respecto al 2011, en el período 2012-2014, se ha mantenido prácticamente fijo, según se aprecia en la figura 4 y el cuadro 3.

No obstante, se aprecia que el Consumo Aparente ha crecido en términos de valor, en principio derivado de una mayor importación de productos y del deslizamiento del dólar con respecto al peso mexicano (Figura 5).

En este sentido, la figura 2 muestra que el 64% de las Materias Primas y Auxiliares utilizadas en el año 2014 en la industria química, fueron importadas.

Por otro lado, sobresale el alto crecimiento de la inversión durante el período de 2011 al 2014 (Figura 6).

La industria química en México

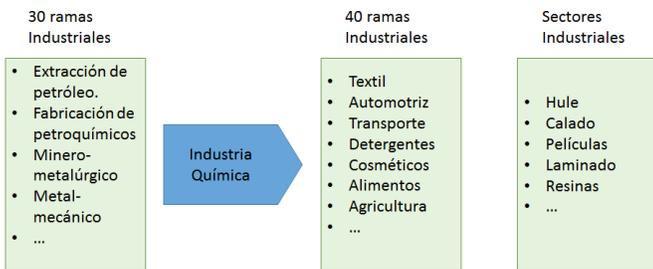


Figura 1. La industria química en México

Comentarios

A continuación se presentan algunos puntos que pueden coadyuvar a la caracterización del estado actual de la industria química en México.

- Debilidades para generar procesos de innovación de mayor valor agregado, ejemplo: Refinación – Petroquímica.
- La petroquímica multiplica el valor de la materia prima (crudo) por 60 y por 96 el número de empleos.
- La caída de la producción de petroquímicos en México hizo perder un elemento básico para el desarrollo de nuestro país y la industria química.

Actualmente Pemex solo abastece el 7% del consumo nacional, las compañías privadas abastecen el 43% y el resto (50%) se importa con las consecuencias de una alta dependencia del exterior y la fractura de las cadenas de producción, con un marco legal indefinido con políticas inadecuadas en lo que respecta a materias primas.

Desarrollo Tecnológico

- No se ha proporcionado el apoyo requerido a las PyMES (Pequeñas y Medianas Empresas).
- Falta de vinculación entre universidades y empresas.
- No se tuvo un crecimiento de incubadoras de negocios.
- Los parques industriales que se instalaron se les dio grandes facilidades a las empresas transnacionales.
- Falta de encadenamiento de las grandes empresas hacia las PYMES.
- Gasto estancado en Ciencia y Tecnología, conviene destacar que el gasto en Ciencia y Tecnología como porcentaje del PIB es muy bajo en comparación al de los países de la OCDE, el cual pertenece México.

México se encuentra en una situación difícil:

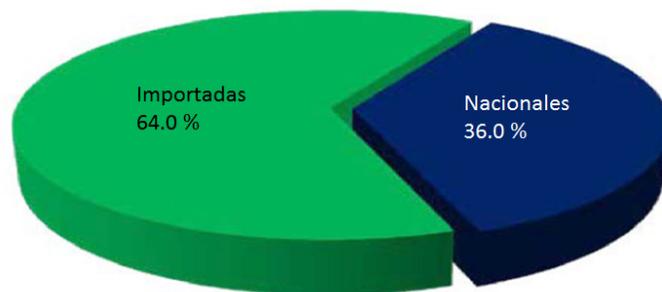
- Políticas macroeconómicas no adecuadas en el aspecto cambiario, gasto, deuda y comercio internacional

- La industria se orienta a las exportaciones e importaciones temporales
- Se destaca que cerca del 80% de la exportación mexicana depende de los procesos de importación temporal
- Debilitamiento de cadenas productivas
- Disminución de competitividad asociado con el principal problema del país: corrupción e impunidad

Al respecto, El Consejo Mundial de Energía (WEC) en su informe correspondiente al año 2015, señala las tres principales incertidumbres para México:

1) RECESIÓN GLOBAL Y LA VOLATILIDAD DE PRECIOS DE MATERIAS PRIMAS

La recesión global es un fenómeno cuyo inicio se puede ubicar alrededor de la década de 1970. Se ha caracterizado



Fuente* Elaboración en base a Información de ANIQ

Figura 2. Porcentaje de Materias Primas y Auxiliares utilizadas en la Industria Química 2014

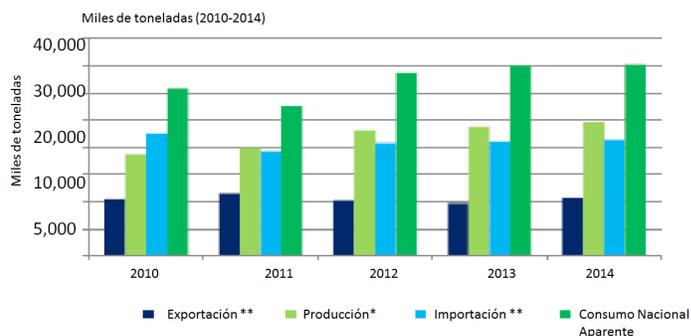


Figura 4. Volúmen de la producción y el comercio exterior de la Industria Química. Miles de toneladas (2010-2014)

do porque la componente industrial ha estado perdiendo peso en la generación de Producto Interno Bruto en las principales economías desarrolladas del mundo. La figura 6, del World Economic Forum, ilustra esta situación.

2) LA POLÍTICA DE LOS ESTADOS UNIDOS.

El proceso electoral en Estados Unidos está generando importantes incertidumbres ligadas a políticas públicas relacionadas con la economía nacional y el sector energético. Hay que recordar que el 80% de las exportaciones de México se dirigen a los Estados Unidos; adicionalmente podemos mencionar, que parte de esas incertidumbres estarían ligadas a la seguridad en el suministro del gas natural, cuya importación desde ese país cada vez es mayor.

En este sentido se debe recordar que es facultad del Gobierno permitir la exportación de gas natural.

Asimismo diversos medios mencionan como políticas públicas la repatriación de capitales a Estados Unidos.

3) CORRUPCIÓN EN MÉXICO

Los factores de la producción han sido analizados por el Instituto Mexicano de la Competitividad, Transparencia Mexicana y las asociaciones Industriales en México, y demuestran claramente que, por ejemplo, en el caso de competitividad basándose en el reporte de competitividad Mundial 2016 del Institute for Management Development (IMD), México perdió seis lugares en su clasificación al pasar del lugar 39 al 45 con retroceso en los cuatro factores económicos que se miden y que son:

- Desempeño económico,
- Eficiencia del Gobierno, eficiencia en los negocios e infraestructura en donde la corrupción jugó un papel relevante en esta disminución.

Si también analizamos el último índice de bienestar de la OCDE para una vida mejor, México ocupa el penúltimo lugar de un universo de 38 países y aquí también, el factor corrupción juega un papel relevante.

La corrupción tiene un efecto negativo en el desempeño de la economía y se refleja en Mayor gasto en las obras, afecta al Modelo de negocios de la empresa.

A mayor corrupción menor inversión bruta por trabajador, menor eficiencia fiscal y, por lo tanto, se promueve la informalidad y el menor gasto en educación, infraestructura y salud, elementos básicos para el desarrollo humano.

Los riesgos crediticios son mayores y afectación a la calificación del país. Reduce las posibilidades del gobierno para corregir las externalidades negativas de las actividades productivas.

Volúmen de la producción y Comercio Exterior de la Industria Química Miles de Toneladas 2010-2014					
Año	2010	2011	2012	2013	2014
Producción*	18,700	19,792	23,094	23,759	24,577
Importación**	22,528	19,316	20,794	21,012	21,400
Explotación**	10,458	11,568	10,249	9,728	10,695
Consumo Nacional Aparente	20,771	27,540	33,640	35,043	35,282

Fuente: *Elaboración con base en la información de ANIQ
**Con base en el Sistema de Información de Comercio Exterior (SICE) de la Secretaría de Economía.

Cuadro 3. Volúmen de la producción y comercio exterior de la industria Química

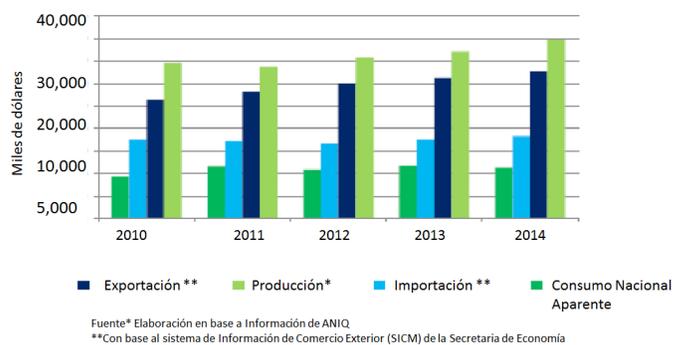


Figura 4. Volumen de la producción y Comercio Exterior de la Industria química. Miles de dólares (2010-2014)

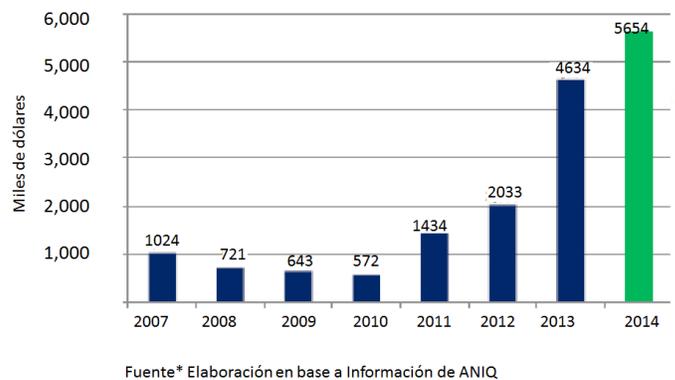


Figura 5. Inversión de la Industria química (Miles de dólares (2007-2014))

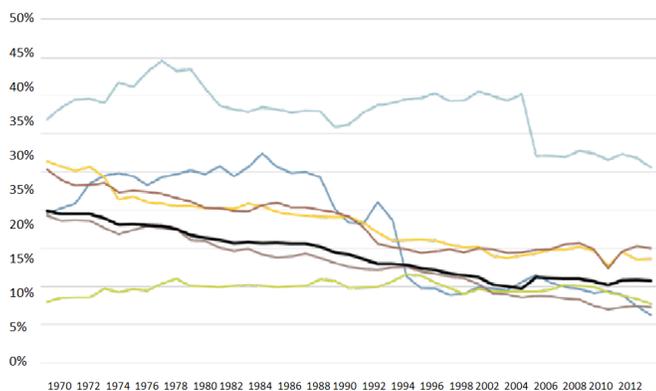


Figura 6. Manufacturing a percentage of GDP, 1970-2011, Select Contries.

Promueve marcos regulatorios ineficientes y excesivos, que dan lugar a sobornos. Por esta razón la correlación es grande entre regulación abundante y el nivel de corrupción.

El no tener aptitudes para el puesto aumenta la corrupción, ya que el puesto, debido a compromisos políticos o de amistad, hacen que se tenga la tentación del soborno.

Como se mencionó anteriormente, otro factor que inhibe el crecimiento y que fomenta la corrupción es el gran número de leyes y reglamentos que se generan, y en el caso de la reforma energética se está opacando por estos factores que facilitan la corrupción. Como referencia vemos lo que está pendiente en COFEMER al día de hoy para comprobar esta aseveración.

Para sustentar que no se está cumpliendo, el Consejo Coordinador Empresarial en sus análisis económicos del 30 de mayo y 6 de junio de 2016, dice textualmente: “las reformas estructurales no han mostrado avances, sino mas bien retrocesos”.

No obstante...

- La industria es la rama económica que puede lograr el mayor desarrollo del país
- La industria puede reactivar el mercado interno
- Se han tenido avances y éxito en el desarrollo de ciertas ramas industriales: automotriz y aeronáutica.
- La industria química es la clave en el desarrollo de las cadenas productivas

Conclusiones

- Se está viviendo un momento de cambio estructural en el mundo.
- México está pasando por una situación económica adversa que se refleja en su sector manufacturero que comprende la industria química.
- La situación de la competitividad también pasa por una situación desventajosa, ya que en el último año disminuyó en dos posiciones en el nivel de competitividad internacional.
- México necesita desarrollar su industria para formar parte activa de esta nueva revolución.
- Están ocurriendo grandes cambios en la enseñanza de la química, por lo que se requiere mayor atención en la educación de las futuras generaciones.
- El desarrollo de un entorno que desarrolle, atraiga y retenga talento, tiene que ser una actividad permanente en las instituciones académicas y de la Sociedad Química de México.
- Participar en el fortalecimiento de la transparencia y disminución de la impunidad y la corrupción.
- Impulsar el crecimiento industrial de México en donde la química juega un papel importante.

Optimiza la computación la creación de nuevos medicamentos

Entrevista al Dr. Juvencio Robles García

Luz OLIVIA BADILLO*

- El diseño de moléculas por computadora es una alternativa cada vez más usada que contribuye a reducir tiempo y costos en la búsqueda de nuevos fármacos.
- El doctor Juvencio Robles, investigador de la UGTO, señala que ha habido farmacéuticas en las que toda la investigación inicial fue por computadora, lo que se traduce en una reducción notable de los precios y contribuye a que lleguen más rápido medicamentos mejor probados y calibrados desde un principio al público.

Sacar al mercado un medicamento nuevo es un proceso largo y costoso. Para acelerar la obtención de un nuevo fármaco y reducir costos en la etapa inicial de investigación se usan las nuevas tecnologías para modelar computacionalmente moléculas con potencial farmacológico. Con la química computacional se conoce a detalle la forma y estructura de la molécula, sus enlaces químicos, composición atómica y, en el caso de fármacos, la manera como la molécula actuaría terapéuticamente, es decir, cómo embonaría o se intercalaría en el sitio activo de la proteína o enzima que se desea inhibir o favorecer.

El modelado computacional es conocido como la etapa *cero* o *in silico* en el proceso para diseñar un nuevo fármaco, en la cual el doctor Juvencio Robles García, investigador de la División de Ciencias Naturales y Exactas de la Universidad de Guanajuato (UGTO), y su grupo de investigación han propuesto antifúngicos diferentes a los que ya existen en el mercado, nuevos antibióticos de la familia de las quinolonas, fármacos anticancerígenos y entender y diseñar nuevas formas de transportar y liberar fármacos con nanotubos.

“El diseño computacional de moléculas reduce tiempo y el ciclo de descubrimiento de una molécula. Ha habido farmacéuticas en las que toda la investigación inicial fue por computadora. Esto se traduce en una reducción



Foto: El doctor Juvencio Robles García, investigador en la División de Ciencias Exactas de la Universidad de Guanajuato, trabaja sobre modelado computacional para diseñar nuevos fármacos, un proceso que disminuye costos y tiempo para que los medicamentos lleguen más rápido a su venta al público. AMC/Elizabeth Ruiz Jaimes.

notable de los precios y contribuye a que lleguen más rápido medicamentos mejor probados y calibrados desde un principio a la gente”, explicó el doctor en fisicoquímica por la Universidad del Norte de Carolina-Chapel Hill en Estados Unidos.

El diseño de moléculas no se realiza a ciegas, “nosotros seguimos a un fármaco líder que se sabe que funciona, se estudia su estructura con énfasis en los lugares clave del sitio biológico donde debe entrar el componente activo y así poder mejorar su comportamiento. Es como si el fármaco fuera una llave y la proteína una cerradura, si la llave embona bien entrará perfectamente en la cerradura y podrá abrirla. En nuestro caso, como ya conocemos la cerradura, podemos diseñar moléculas o fármacos que entren en esa cerradura”, explicó el integrante de la Academia Mexicana de Ciencias.

Una vez que se cuenta con el modelo en tercera dimensión del ADN o de la enzima y de la molécula (fármaco potencial), se pueden realizar modificaciones para mejorarla, por ejemplo, agregarle átomos de

* Texto publicado en:

Academia Mexicana de Ciencias, Boletín AMC/064/16 Ciudad de México, 17 de marzo de 2016

nitrógeno o carbono a un anillo de la molécula, lo cual es importante porque se ha observado que en ciertos fármacos anticancerígenos como los derivados del ácido hidroxámico, la modificación mencionada ayuda al entrar a la enzima a pegarse a su superficie, o agregarle oxígenos o un grupo ácido a una cadena para que se coordine al metal que se encuentra en el sitio activo. El desarrollo es como si se unieran piezas de lego que le agregan cualidades a la molécula.

“Nuestro trabajo consiste en entender por qué y cómo debe ser un fármaco para tener bastante certeza de que va a funcionar y va a embonar en esa cerradura (el ADN o la enzima). Con el modelado entendemos condiciones en las que se puede formar el fármaco de interés, su estabilidad y reactividad. Es la fase cero en la que todo se hace por computadora usando principios de mecánica cuántica, quimioinformática y termodinámica”.

Del laboratorio a la farmacia

Cuando un medicamento se encuentra finalmente a la venta en las farmacias es porque pasó por diversas pruebas que incluyen: diseño in silico, síntesis orgánica, investigación clínica, pruebas preclínicas, toxicológicas y fue aprobada la

patente del producto. El tiempo estimado de todos estos pasos es un promedio de 12 años y hasta 800 millones de dólares invertidos que en ocasiones no se recuperan si la molécula no cumple con todas las normas regulatorias que exigen las autoridades sanitarias. Se estima que de 10 000 moléculas estudiadas inicialmente, solo una pasará todos los filtros, por lo que la etapa cero o in silico se ha vuelto fundamental en la investigación farmacológica.

Juencio Robles y su grupo una vez que han probado in silico la viabilidad del ingrediente activo, la pasan a otros equipos con los que colaboran de la UGTO a través de un proyecto financiado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, para que realicen la síntesis y pruebas toxicológicas de la molécula propuesta.

“El doctor Miguel Ángel Vázquez del área de química orgánica sintetiza los fármacos que nosotros diseñamos o nos da una idea que probamos computacionalmente para ver si es factible. Después de estudiada in silico y sintetizada, la molécula pasa a pruebas biológicas con la doctora Minerva Martínez, quien evalúa la toxicidad que le causa el ingrediente activo a una célula in vitro, luego se prueba in vivo en animales y finalmente en humanos”, señaló.



Visita la **Tabla Periódica Monumental**
28 de septiembre al 1° de octubre
en el Polideportivo Carlos Martínez Balmori
“Ciudad del Conocimiento”, UAEH
Pachuca, Hidalgo

¿Quieres llevar la TPM a tu universidad?

Necesitas un espacio de 40 x 60 m²,
consulta cuotas de recuperación y requisitos en
www.sqm.org.mx



SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.

El agua embotellada y los contenedores de plástico ¿Qué tan confiables son?

DELIA MONTERO* Y JUDITH CARDOSO**

Resumen

El agua embotellada en México se ha convertido en un gran negocio por falta de información de las autoridades hacia el consumidor sobre la calidad del agua potable. Esto ha generado una gran demanda y desembolso económico, principalmente en el sector de menos recursos. La mayoría de los pequeños negocios que purifican agua en la Ciudad de México se encuentran en zonas marginadas debido al menor costo del producto. Muchos de ellos no cumplen con las normas mexicanas de la calidad de agua, debido a que se han encontrado contaminantes, tales como metales pesados, coliformes fecales, compuestos orgánicos derivados de los contenedores que las almacenan y las transportan y del tipo de tratamiento que estas plantas tienen instrumentado. Se discuten las fuentes de contaminación y la información sobre la calidad de esta agua.

Palabras clave: agua embotellada; calidad del agua; contenedores PET; efecto salud consumidores.

Abstract

The bottled water in Mexico has become a big business for lack of information from the authorities towards the consumer on the quality of drinking water. This has generated a great demand and economic outlays, mainly in the sector of low-budget. Most of the small businesses that purify water in Mexico city are in disadvantaged areas due to the lower cost of the product. Many of those business do not comply with the Mexican water quality standards, since it has been found contaminants, such as heavy metals, fecal coliforms, organic compounds derived from the containers that store and transport them and the type of treatment that these plants have instrumented. The sources of pollution and the information about the quality of this water are discussed.

Key words: bottled water; water quality; PET containers; health effect in consumers.

* Depto. Economía, DCSH;

** Depto. Física, DCBI, UAM-I

e-mail: jcam@xanum.uam.mx

El consumo de agua embotellada

El consumo de agua embotellada se ha incrementado en todo el mundo en las últimas décadas, en México el consumo se ha generalizado en todo el país y ocupamos hoy en día el primer lugar a nivel mundial. En el 2011 la Universidad Autónoma Metropolitana aplicó una encuesta sobre consumo y percepción del agua que nos permite conocer con certeza cómo se suministran de agua para beber en la Ciudad de México. En este estudio se consideró una muestra básica de 768 viviendas distribuidas entre las 16 delegaciones de la Ciudad de México, al interior de éstas, se asignó de manera proporcional al tamaño de la población de acuerdo al Censo de Población y Vivienda 2005. Con esto se aseguró cubrir la distribución de la muestra. La muestra responde no sólo a la necesidad de obtener resultados representativos a nivel distrital, sino que permitió delinear con representatividad estadística los distintos matices entre las 16 delegaciones de la Ciudad de México. Las unidades de muestreo de la primera etapa (UPM) fueron las áreas geoestadísticas básicas (AGEB's), y las unidades de muestreo de segunda etapa fueron las Viviendas. El diseño de la muestra fue probabilístico, por lo cual los resultados obtenidos de la encuesta se generalizan a toda la población de la Ciudad de México, considerando el diseño como bietápico, conglomerado y por AGEB's, donde la unidad última de selección es la vivienda y la unidad de observación es el hogar. Una variable de interés fue el consumo doméstico del agua y la percepción de la calidad de la misma, y de ahí se desprendió toda una batería de preguntas. Esta encuesta aplicada en el 2011, el 80% de los hogares encuestados consideran que el agua que se distribuye en sus hogares no es de mala calidad y que puede mejorarse; sin embargo, el 85% no consume agua de la llave y compran agua embotellada.¹⁻² Los encuestados a pesar de que tienen una buena percepción de la calidad del agua de la llave, no tienen la certeza de que es comple-

1 Montero, D., 2011 Consumo y Percepción de la Calidad del Agua en el Distrito Federal, agosto 2011. Proyecto de Investigación financiado por el ICyTDE, México. 2013 Reporte sobre Calidad y disminución de la demanda de agua en la Ciudad de México, proyecto de investigación financiado por el ICyTDE, México.

2 Montero, D. Transnacionales, gobierno corporativo y agua embotellada. El negocio del siglo XXI. UAM. Ediciones del Lirio, México; 20

tamente potable, ya que nadie les informa sobre la calidad del agua de la red pública. Desconocen en su mayoría que el Organismo Operador, en este caso el Sistema de Aguas de la Ciudad de México (SACMEX), es el responsable de la distribución de agua potable y que tiene como mandato distribuir agua potable para consumo humano en la red pública de acuerdo con las normas emitidas por la Secretaría de Salud.

La encuesta nos permitió conocer que el consumo de agua embotellada se da tanto en población de altos, medios y bajos ingresos, y que tampoco hay distinción entre personas con altos o bajos grados de educación, es decir, podemos hablar de un consumo generalizado. El consumo promedio en el Ciudad de México es de 391 litros *per capita* al año, sin embargo, en algunas delegaciones como Iztapalapa, el consumo es de 575 litros por persona al año.

El consumo *per capita* de agua embotellada en la Ciudad de México es de 391 litros al año, por lo que el gasto promedio en la compra de garrafones de 20 litros al mes en los hogares es de 229.00 pesos por familia, considerando 4 miembros en cada familia, lo que equivale aproximadamente a 6.5 garrafones de 20 L, mientras que el pago de la tarifa por suministro de agua de la llave al mes es en promedio de 155.80 pesos, por 30 m³.³ Esto indica que en promedio, los hogares gastan casi el doble en la compra de agua embotellada en relación con la tarifa que se paga al organismo operador que distribuye el agua. Sin embargo, el consumo de agua para beber o cocinar representa únicamente el 2% del consumo total en el hogar, por lo que se está pagando un precio muy alto si se compara lo que se paga por litro entre la tarifa y el agua embotellada. La compra de agua embotellada tiene un impacto en el gasto familiar, que desde luego afecta más a la población de más bajos ingresos. El mercado del agua embotellada está dominado por dos grandes grupos de abastecedores. El primero está constituido por las grandes transnacionales con marcas como Bonafont (Danone), Santa María (Nestlé), Electropura (Pepsi-co) y Ciel y E-Pura (Coca Cola); el segundo es por el gran número de purificadoras de agua que han surgido a partir del 2000 en todo el país.

Las purificadoras son pequeños establecimientos que venden agua purificada en garrafones de 20 litros a un costo más bajo que las transnacionales y a nivel muy local (alrededor del 40 al 60% más barato). Para el 2014 en la Ciudad de México existían 922 purificadoras (INEGI, 2015), de las cuales una buena parte se concentra en la zona oriente, como es caso de Iztapalapa (344 que equivale al 37% del total), en Gustavo A. Madero (98 que equivale al 10.6% del total) y en Venustiano Carranza (56 que

equivale al 6% del total), que son delegaciones donde se encuentran más hogares con bajos ingresos. En las zonas intermedias como Iztacalco y Tláhuac se ubican 50 y 74, respectivamente, que representan el 6 y 8% de las purificadoras. En el otro extremo se encuentran las delegaciones Miguel Hidalgo y Benito Juárez donde se ubica el 20 y 18 purificadoras, respectivamente, que representan a su vez 2.10 y 1.9% del total.

A través de una etiqueta, a veces falsa, las purificadoras y las grandes embotelladoras ofrecen al consumidor la certeza de agua de calidad, aunque no sea cierto. El consumidor ignora que ambas no siempre conservan la misma calidad en el producto que ofrecen, además de otros riesgos a la salud como son la falta de control en la limpieza de los garrafones de plástico, los riesgos de la reutilización de los garrafones de PET y los posibles microorganismos que se desarrollan cuando éstos están expuestos al sol o a cambios de temperatura.

Calidad del agua

Los establecimientos de agua purificada, al igual que las grandes embotelladoras de agua, están regulados por la Comisión Federal para la Protección de Riesgos Sanitarios, vinculada al Departamento de Regulación y Fomento Sanitario de la Secretaría de Salud⁴. Tanto las grandes embotelladoras como las purificadoras deben de cumplir con todas las normas sanitarias en los procesos de purificación. Los muestreos de las embotelladoras por parte de esta institución deben de ser frecuentes ya que la calidad del agua cambia constantemente, de ahí una supervisión periódica. Al parecer no existe esta supervisión, ya que de acuerdo con datos reportados en una encuesta realizada por investigadores del Instituto Politécnico Nacional (IPN)⁵, con 122 muestras de agua envasada de 111 pequeñas purificadoras ubicadas en las 16 delegaciones de la Ciudad de México mostraron que más de la mitad de las muestras (69) contenían coliformes totales, mientras que otras 23 muestras dieron positivo en coliformes fecales y solo 30 pasaron la prueba de forma satisfactoria. Pero lo preocupante es que muchos proveedores que abastecen de agua potable a las purificadoras no cumplen con fre-

4 En su Artículo 12 fracción XII menciona que le corresponde establecer el sistema de vigilancia de la calidad del agua, de conformidad con lo establecido por las normas oficiales mexicanas en materia de tratamiento del agua para uso o consumo humano, así como por las disposiciones y programas que resulten aplicables, sin perjuicio de las atribuciones que tengan conferidas otras autoridades competentes; en el Artículo 14 fracción XI menciona “Establecer y coordinar el sistema de certificación de la calidad del agua a que deberá sujetarse el tratamiento del agua para uso o consumo humano, de conformidad con lo establecido por las normas oficiales mexicanas y demás disposiciones aplicables”.

5 Científicos del IPN detectan bacterias fecales en agua de purificadoras, Revista Proceso 23 de noviembre 2015.

3 Tarifas de proporcionadas por CONAGUA (agosto 2016). <http://www.conagua.gob.mx/Tarifas/Consultas.aspx>

cuencia las normas mexicanas establecidas para este fin.⁶⁻⁷ Por otro lado, ya que no se conoce con certeza el origen del agua que venden, en muchos casos la toman de la red pública, pero en otros las purificadoras son abastecidas por pipas, por lo que la calidad puede variar enormemente. De ahí la necesidad de conocer más a fondo el funcionamiento de este segmento que abastece de agua para beber al 30% de la población.

Recientemente, la Agencia de Protección Sanitaria (APS) del gobierno capitalino suspendió la actividad de 192 plantas de purificación, envase y venta de agua, de las 922 existentes en la ciudad, por incumplir con las medidas sanitarias. En un comunicado, la APS informó que ese resultado se obtuvo de la verificación hecha durante 2014 a noviembre de 2015 en la totalidad de las plantas purificadoras, como parte del programa de vigilancia para el control sanitario del agua y a efecto de identificar que sea apta para uso y consumo humano. Los puntos críticos que tienen que cumplir cabalmente las purificadoras de agua son: que el área de llenado de garrafones esté aislada totalmente y que los tanques de almacenamiento estén bien tapados, de acuerdo con esta nota. Cómo se destaca, los puntos esenciales no cubren la calidad del agua y los contaminantes que afectarían a la salud, como lo indican las normas mexicanas. Aunque se especifica con detalle las normas que se deben de cumplir, así como los parámetros fisicoquímicos y biológicos (41 de ellos especificados en las Normas: NOM 179-SSA1-1998.⁷ Vigilancia y evaluación del control de calidad del agua para uso y consumo humano, distribuida por sistemas de abastecimiento público y la NOM-201-SSA-2015. Productos y Servicios. Agua y hielo para consumo humano, envasados y a granel. Especificaciones Sanitarias), se sabe que muchos de ellos no cumplen con las condiciones mínimas de higiene como fue mencionado arriba. Específicamente para las purificadoras es difícil adecuar sus equipos para calibrarlos con los ajustes o cambios en las normas sanitarias que se han puesto en marcha recientemente. De acuerdo a la última Norma, dependiendo del tipo de desinfección también puede haber contaminación del agua; por ejemplo, si se utiliza cloro u ozono es posible encontrar los siguientes contaminantes: formaldehído, bromodiclorometanoo clorometano.

Adicionalmente, en esta norma se señala a los contaminantes emergentes (como el antimonio y compuestos halo-

genados absorbibles fijos), es más restrictiva con respecto a los metales tóxicos (como son el arsénico, el mercurio y el cadmio) y especifica la frecuencia mínima de análisis del agua y hielo.

Por su parte los consumidores ignoran los cambios en la normatividad y si las grandes empresas embotelladoras y purificadoras se han acatado a estos nuevos cambios en las normas sanitarias; asimismo desconocen los efectos a la salud que puede tener el uso y reuso de PET.

Materiales para los contenedores de agua

Las tuberías, bombas y otros dispositivos que estén en contacto con el agua para consumo humano y que sean utilizados para la captación, manejo y almacenamiento deben ser de material sanitario, generalmente son de vidrio o plástico. Los plásticos más utilizados se clasifican de acuerdo a los códigos que generalmente se encuentran en la parte inferior de las botellas y los envases. De éstos, los más utilizados en la industria alimentaria son (i) tereftalato de polietileno (PET) para botellas de refrescos y botellas de agua; (ii) polietileno baja densidad (LDPE), para envoltura de películas y bolsas de supermercado; (iii) polipropileno (PP) para botellas de jarabe, contenedores de yogurt y cápsulas; (iv) poliestireno (PS) para tazas de café desechables. Las botellas de vidrio parecen ser la opción más segura para el envasado de alimentos y almacenamiento, puesto que no hay transferencia posible de contaminantes químicos. El reciclaje de vidrio también es más amigable con el medio ambiente que el reciclaje del plástico, que pueden liberar sustancias químicas tóxicas; sin embargo, su fragilidad y alta densidad, con respecto a los polímeros, lo hacen poco práctico para su transporte. Por otro lado, las botellas de polietilentereftalato (PET) han demostrado que contaminan el agua con antimonio (Sb), con concentraciones que van incrementándose con el tiempo de almacenamiento tomando en cuenta que el valor máximo permitido es de 6 ppb/día.⁸⁻⁹ También es bien conocido que el acetaldehído y arsénico contaminan las botellas de PET, aunque este proceso no es completamente entendido debido al número de factores que influyen en este proceso (el tiempo de contacto, la temperatura, la exposición al sol, la radiación ultravioleta y el color de la botella).¹⁰ A la luz de estas dificultades, se necesita más investigación para comprender la migración de los productos de la degradación de PET y confirmar si es seguro para su uso

6 NOM-127-SSA1-1994, Salud ambiental. Agua para uso y consumo humano. Límites permisibles de calidad y tratamientos a que debe someterse el agua para su potabilización. Revisada el 8 de junio 2016. http://dof.gob.mx/nota_detalle.php?codigo=5420977&fecha=22/12/2015.

7 NOM-179-SSA1-1998. Calidad del agua para consumo humano en sistemas de abastecimiento público. http://portal.salud.gob.mx/codigos/columnas/evaluacion_programas/pdf/EXT08_COFEPRIS_IF.pdf. Revisada el 6 de agosto 2016.

8 Shotyck, W.; Krachler, M.; Chem, B. J. *Environmental Monitoring*. 2006, 32, 189-207.

9 Shotyck, W.; Krachler, M. *Environmental Science and Technology*. 2007, 41, 1560-1563.

10 Whitt, M.; Brown, W.; Danes, J.; Vorst, K. *Journal of Plastic Film & Sheeting*. 2016, 32, 189-207.

en alimentos y en recipientes para bebidas.¹¹ Las botellas de plástico tienen otros productos químicos que puedan contaminar las bebidas que contienen. Un ejemplo es el Bisfenol-A (BPA) que puede afectar el sistema de endócrino cuando se ingiere.¹² Por otro lado, los derivados del ácido ftálico son utilizados como aditivos para los plásticos, tales como el PET, los policarbonatos, el polipropileno y el PVC, con el fin de mejorar su suavidad, flexibilidad y elongación. Los ftalatos son altamente móviles y migran fácilmente de los productos plásticos al ambiente debido a sus propiedades físicas y químicas, ya que no están unidos químicamente a los polímeros. También los ftalatos se extraen de los garrafones de material plástico en el agua embotellada que bebemos después de un almacenamiento máximo de 10 semanas, o en menos tiempo si las botellas se han dejado expuestas al sol. Un almacenamiento del agua a 40 °C produce una extracción del casi 200-900% de los ésteres de ftalato comparado con un almacenamiento a 25 °C o a menor temperatura.¹³ Aunque la extracción de estos compuestos en el agua embotellada es del orden de 10-7µg/L, debido a que son compuestos lipofílicos, podrían fácilmente bioacumularse en las grasas, si se exponen constantemente a estos contaminantes. La exposición a los plastificantes adicionados al PET puede ser perjudicial para la salud humana ya que son disruptores hormonales. Los ftalatos de mayor peso molecular como son el di(2-etil-hexil)ftalato (DEHP), el di-n-butilftalato (DBP) y el diisonilftalato (DiNP), son sospechosos cancerígenos y son conocidos por ser tóxicos para el hígado, riñones y órganos reproductivos.¹⁴ Las botellas de plástico reutilizadas pueden extraer productos químicos más tóxicos que de las botellas nuevas. Se ilustra también la relevancia de un factor hasta ahora desestimado, es decir, la frecuencia de reutilización de los garrafones en las actividades cotidianas que podrían mejorar sustancialmente la extracción de componentes de plástico del agua embotellada en negocios de plantas purificadoras. La reutilización de los garrafones formulados con PET de 20 L es un escenario cotidiano para estos negocios. En este punto es importante considerar el deterioro de la calidad del agua embotellada debido a la frecuencia de reutilización de los garrafones, que en países en desarrollo como México, puede alcanzar hasta 100 veces¹⁵. Será necesario un análisis del costo- beneficio para hacer frente a la eficacia

del reciclaje de botellas de plástico a la luz de nuestros resultados, considerando un mayor riesgo en la salud pública por el reuso de los garrafones de plástico. Se desconoce actualmente si los indicadores de la sostenibilidad de aspectos energéticos y económicos para un menor reciclaje de los materiales del envase para agua. También se debe considerar una sustitución de los aditivos de los plásticos utilizados en los alimentos y en el agua embotellada.

El material de las botellas de plástico también puede influir en el número y tipo de microorganismos en agua embotellada, debido a que las células se adhieren a la superficie de la botella por mayor rugosidad, hidrofobicidad y cargas electrostáticas generalmente tienen mayor cuenta microbiana comparadas con las botellas de vidrio.¹⁶ Jayasekara y colaboradores informaron una variabilidad considerable entre las botellas de plástico de la misma productora de agua y encontró hasta un 83% de la población microbiana adherida a las superficies interiores de las botellas.¹⁷ En cambio, Jones *et al.*¹⁸ detectó niveles mucho más bajos de adherencia, pero existe constancia de la adhesión de diferente tipo de microorganismos. Los resultados de estudios sobre este punto sugieren que las botellas de plásticos hechas de diferentes materiales, pueden proporcionar microambientes adecuados para microflora específica.¹⁹⁻²⁰ Las fuentes de agua embotellada generalmente contienen una microflora muy variada, que incluye las siguientes especies: *Achromobacter spp.*, *Aeromonas spp.*, *Flavobacterium spp.*, *Alcaligenes spp.*, *Acinetobacter spp.*, *Cytophaga spp.*, *Moraxella spp.*, y *Pseudomonas spp.* Estas bacterias se encuentran en pequeñas cantidades, pero pueden multiplicarse rápidamente durante el envasado y almacenamiento del agua. La mayoría de estos organismos no son patógenos en condiciones normales, pero han sido responsables de infecciones oportunistas en pacientes hospitalizados, siendo los de más alto riesgo aquellos con tratamiento de antibióticos e inmunodeprimidos.²¹⁻²²

Un estudio recientemente reportado sobre la toxicidad de estos derivados del ftalato fueron la cardiotoxicidad,

11 Rowell, C.; Kuiper, N.; Preud'Homme, H. *Food Chemistry*. 2016, 202, 88-93.

12 Bach, C.; Dauchy, X.; Chagnon, M.C.; Etienne, S. *Water Research*. 2012, 46, 571-583.

13 Jeddi, M.Z.; Rastkari, N.; Ahmadvani, R.; Yunesian, M. *Food Research International*. 2015, 69, 256-265.

14 Vandenberg, L.; Hauser, R.; Marcus, M.; Olea, N.; Welshons, W. *Reproductive Toxicology*. 2007, 24, 139-177.

15 Keresztes, S.; Tat'ar, E.; Cz'eg'eny, Z.; Z'aray, G.; Mihucz, V. G. *Science of the Total Environment*. 2013, 458-460, 451-458.

16 Andra, S.; Makris, K. C.; Shine, J. P. *Water Research*. 2011, 45, 6677-6687.

17 Jayasekara, N. Y.; Heard, G. M.; Cox, J. M.; Fleet, G. H. *Food Microbiology*. 1999, 16, 115-128.

18 Jones, C.; Adams, M.; Zhdan, P.; Chamberlain, A. *Journal of Applied Microbiology*. 1999, 86, 917-927.

19 Kregiel, D.; Hindawi Publishing Corporation Bio Med Research International. Article ID 128697, 1-15 pages <http://dx.doi.org/10.1155/2015/128697>, 2015.

20 Leclerc, H.; Moreau, A. *Microbiological safety of natural mineral water*, *FEMS Microbiology Reviews*. 2002, 262, 207-222.

21 Warburton, D.W.M.; McCormick, J.K.; Bowen, B. *Canadian Journal of Microbiology*. 1994, 40, 145-148.

22 Chaidez-Quiroz, C. Agua embotellada y su calidad bacteriológica. Agua Latinoamérica, septiembre-octubre 2002, 38-39.

la hepatotoxicidad y la nefrotoxicidad.²³ Por otro lado, la presencia de 16 tipos de microbacterias no tuberculosas (MNT) identificadas en aguas embotelladas realizado en un estudio hecho en la ciudad de México, han mostrado manifestaciones clínicas y factores de riesgo tales como queratitis, infecciones en piel y tejidos blandos, microbacteriosis gastrointestinal, osteomielitis, diabetes mellitus tipo II, entre otras²⁴. Sin embargo, el efecto en la salud es más importante en grupos vulnerables como son los menores de edad, los adultos mayores y las personas con inmunodeficiencias. No existen estudios específicos sobre la morbilidad en agua embotellada, lo cual indica que es un tema de investigación abierto. Sin embargo, puede verse en la literatura datos sobre el agua contaminada y su ingesta en humanos, sus efectos en la salud y en la economía de México.²⁵⁻²⁶

Finalmente, los materiales de empaque hechos de PET reciclado se han utilizado en envases y películas que están en contacto directo con alimentos y especialmente en agua embotellada.²⁷ La mayoría de los envases reciclados de poli(etileno tereftalato) contienen catalizadores de metales pesados, el más común es el antimonio. El proceso de reciclado tiene la característica de incrementar los productos de degradación, aditivos químicos y productos secundarios de la polimerización. Estudios recientes usando la espectrometría de emisión atómica de plasma acoplado inductivamente (ICP) confirman la presencia de cadmio, cromo, plomo, níquel y antimonio en envases de agua embotellada. Estos metales pesados tienen el potencial de migrar hacia el agua embotellada y la limitada regulación gubernamental de estos contaminantes en los materiales de transporte y envases de tereftalato de polietileno reciclado aumenta los riesgos de salud pública, como fue mencionado anteriormente.²⁸ Es importante mencionar que las botellas de agua producen 1.5 millones de toneladas de desperdicios de plástico al año tan sólo en Estados Unidos. Esa cantidad de plástico requiere de 178 millones de

litros de petróleo al año para poder producirlo. Y si bien el plástico de las botellas es de muy buena calidad, y por ende buscado para reciclar, el 80% se acumula en basurales, en calles, en ríos, en el océano.²⁹

Conclusiones

El consumo de agua embotellada en la Ciudad de México ha crecido alarmantemente por desconocimiento de la calidad del agua potable que surte la red de distribución pública del preciado líquido. De acuerdo a los estudios realizados sobre los materiales utilizados respecto al almacenamiento, transporte y purificación del agua embotellada, éstos pueden ocasionar problemas de salud en los consumidores. Los procesos que se utilizan en el tratamiento del agua purificada son probablemente los adecuados, pero no en sí al que se le da al envase, ya que existen varios factores por los cuales puede llegar a contaminarse el recipiente, ya sea por el manejo inadecuado del personal, una mala desinfección, o bien un almacenamiento prolongado. La calidad del agua, principalmente en purificadoras de agua, ha mostrado no ser en todos los casos adecuada para un consumo seguro, de acuerdo a evaluaciones realizadas por diversos estudios. A lo anterior habría que agregar que poco se conoce en México sobre la presencia de los aditivos provenientes de los plásticos en el agua y el efecto en la salud. En esta revisión se mostró la importancia de hacer un estudio integral sobre el agua embotellada que contemple la calidad del agua, el impacto económico, el efecto en el medio y el efecto en la salud de los consumidores.

23 Singh, S.; Li, S.S. *Genomics*. 2011,97, 148–157.

24 Villegas-Martínez, D. "Aislamiento e identificación de microbacterias a partir de agua purificada envasada en garrafón obtenida de plantas purificadoras en la ciudad de México y análisis de su calidad microbiológica. Tesis de Ingeniería biomédica, IPN, 2015.

25 Collado, J. Interrelación agua salud pública en México. Proyecto de Fortalecimiento del Manejo Integral del agua. Informe OMM/PREMIA no. 064. CONAGUA (2009)

26 Nigenda, G.; Cifuentes, E.; Duperval, P.A. Estimación del valor económico de reducciones en el riesgo de morbilidad y mortalidad por exposiciones ambientales. Instituto Nacional de Ecología. 2002, Capítulo IV. Contaminación del agua, deficiencias sanitarias e impacto en la salud. Pp 6-63.

27 Guart, A.; Bono-Blay, F.; Borrell, A.; Lacort, S. *Food Chemistry*. 2014, 156, 73–80.

28 Sander van der Linden. *Environment and Behavior*. 2015, 47, 526–550.

29 El blogverde.com. <http://elblogverde.com/5-razones-para-no-comprar-agua-en-botellas-de-plastico/> Revisado el 6 de agosto 2016.

NOTICIAS DE LA SQM

Factor de Impacto del Journal of the Mexican Chemical Society

El Journal of the Mexican Chemical Society (J. Mex. Chem. Soc.), es la revista oficial de la Sociedad Química de México A.C., fue creada en 1957 bajo el nombre de Revista de la Sociedad Química de México (Rev. Soc. Quím. Mex.), cambiando en 2005 a Journal of the Mexican Chemical Society, publicándose en inglés y adquiriendo un carácter internacional.

El objetivo de esta publicación es coadyuvar al avance del entendimiento de la química, a través de artículos novedosos y originales; así como artículos de revisión por invitación. La publicación es trimestral y comprende 3 números regulares y un número especial dedicado a un área específica de la química. El J. Mex. Chem. Soc., actualmente, acepta contribuciones de todas las áreas de la química, de diferentes partes del mundo.

A lo largo de los tres últimos años se ha trabajado para incrementar el nivel y calidad de los artículos publicados, a través de un equipo editorial de alto nivel con Editores Asociados especializados y expertos en diferentes ramas de la química.

Recientemente Journal Citation Reports (Thomson Reuters) publicó el listado de las revistas con Factor de Impacto (F.I.) para el 2015, siendo el del J. Mex. Chem. Soc. de 0.722, el índice más alto reportado para esta revista, a lo largo de 6 años.

El J. Mex. Chem. Soc., busca seguir incrementando el nivel y calidad de la publicación, derivando en el incremento continuo de su F.I., siendo la primera meta, rebasar el F.I. de 1.0 y llegar al menos a un valor de 2.0. Actualmente se encuentra posicionada en el cuartil 3 (Q3), de acuerdo a los reportes de CONACYT/SCIMAGO, siendo parte (desde hace más de una década) del catálogo de revistas Indexadas de CONACYT, anteriormente conocido como Índice de Revistas Mexicanas de Investigación Científica y Tecnológica, además de formar parte del catálogo de SciELO México.

Otra de las metas del J. Mex. Chem. Soc., es convertirse en una opción importante para publicar trabajos científicos de calidad a nivel internacional, por lo que se encuentra

en continua mejora y actualmente está atravesando por una transición importante hacia el sistema Open Journal Systems.

El Journal of the Mexican Chemical Society, les invita a enviar sus contribuciones originales a editor:jmcs@gmail.com, donde además podrán solicitar mayor información al respecto.

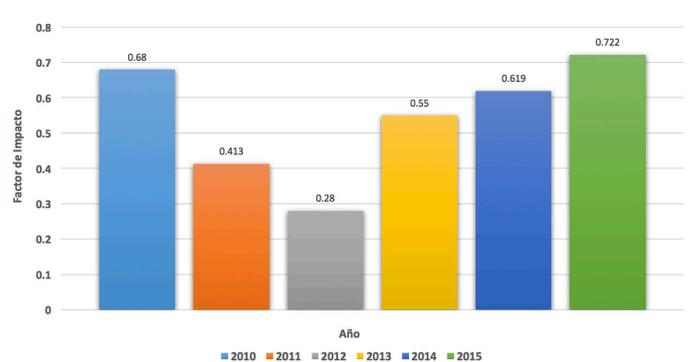


Figura 1. Journal of the Mexican Chemical Society. Journal Citation Reports

Firma de Memorándum de entendimiento entre la ACS y la SQM

El pasado 23 de agosto, en el marco del 252° Congreso y Exposición Nacional de la American Chemical Society, celebrado en la ciudad de Filadelfia, se firmó el Memorándum de entendimiento entre la SQM y la ACS con la propósito de fortalecer y proyectar actividades de colaboración, con el interés mutuo de tener impacto a nivel regional en distintos aspectos relacionados con la química, tanto a nivel académico como en la vida cotidiana de sectores de población no especializados.

Dicho memorándum considera entre otros aspectos:

- El establecimiento y continuación del programa de una serie de webinars en español, promoviendo y mostrando la innovación científica en México y en América Latina;
- La cooperación y el desarrollo en actividades para fomentar la divulgación de la química y el papel que juega en la vida cotidiana, el desarrollo sustentable, la innovación y la atención de desafíos globales.
- El establecimiento y continuidad del Festival de Química, programa enfocado a niños y desarrollado durante los congresos organizados por la SQM.
- La colaboración en el desarrollo y formación profesional de químicos jóvenes y profesores de química de nivel medio, en áreas relacionadas con la innovación y el liderazgo.

El documento fue firmado por la Dra. Donna Nelson, actual Presidente de la ACS y el Dr. Benjamín Velasco Bejarano, Presidente de la SQM. El memorándum tiene una vigencia de 3 años a partir de la fecha de la firma.

Todo esfuerzo colaborativo tiene sin duda un efecto positivo cuando, quien se beneficia del mismo, es la mayoría. En este sentido esperamos la participación de nuestros miembros y de los jóvenes que asisten a los congresos de la SQM o que nos siguen a través de sus redes sociales, en las iniciativas que se propongan como resultado de este acuerdo.



Foto: Dr. Benjamín Velasco, SQM y la Dra. Donna Nelson, ACS..

Premios que otorga la Sociedad Química de México A.C.



El pasado 23 de junio se reunió en las instalaciones de la Sociedad Química de México el Jurado del Premio Nacional de Química "Andrés Manuel del Río" para seleccionar a los ganadores en la edición 2016. Después del cuidadoso análisis de cada uno de los candidatos, el jurado seleccionó como ganadores a:

en el Área Académica

- **Dr. José Guillermo Penieres Carrillo**
Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán.- UNAM en Docencia y,
- **Dra. Rosa Luisa Santillan Baca**
Centro de Investigación y Estudios Avanzados en Investigación.

en el Área Tecnológica

- **Dr. José Manuel Francisco Lara Ochoa**
Instituto de Investigaciones en Química Aplicada S.A. de C.V. en Desarrollo Tecnológico.

La Sociedad Química de México A.C. felicita a los ganadores de este año y les desea que sus esfuerzos sigan rindiendo frutos.

Del mismo modo, después de dos fases de evaluación preliminar, el 11 de agosto el Jurado dictaminador del Premio a las Mejores Tesis de Licenciatura, Maestría y Doctorado en Ciencias Químicas se reunió para definir a los ganadores de este premio:

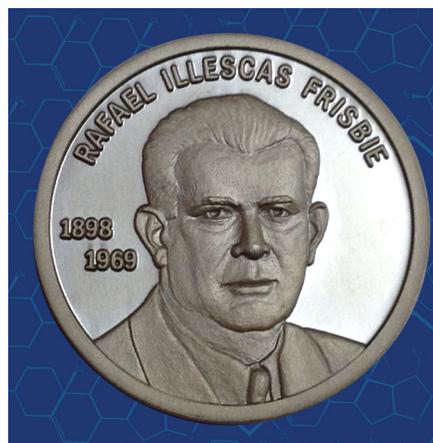
Licenciatura: *Ing. Francisco Javier Suárez Cerda*, Instituto Tecnológico de Tijuana, con la tesis: "Nanopartículas de plata ultra pequeñas empleando ciclodextrinas o extractos naturales como agentes estabilizantes: Síntesis, Caracterización y Estudio Cinético" con la dirección de la Dra. Lucía Z. Flores López.

Maestría: *M. en C. Miguel Reina Tapia*, Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM; con la tesis: "Silibina, sus derivados y su interacción con cúmulos metálicos: un estudio teórico" bajo la dirección de Dra. Ana María Martínez Vázquez.

Doctorado: *Dra. Lilia Fuentes Morales*, Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla; con la tesis: "El uso del clorito de sodio en la síntesis de alcaloides biológicamente activos" bajo la dirección del Dr. Fernando Sartillo Piscil.

Cabe mencionar que este año se recibieron 20 de tesis de nivel licenciatura, 9 de maestría y 13 de doctorado.

Les invitamos permanecer pendientes de las Convocatorias 2017 y participar en ellas.



Seguri-Lab

La bata



E
q
u
i
p
o
d
e
P
r
o
t
e
c
c
i
o
n

✓ El material de confección es 100 % algodón, ya que las fibras naturales no se funden como las sintéticas y son más resistentes al fuego.

✓ El color blanco ayuda a detectar **manchas** de sustancias con color.

✓ El largo de las mangas debe ser adecuado para proteger todo el brazo hasta la muñeca; no las arremangues.

✓ Procura que el largo de la bata sea el mayor posible, sin que la bata quede demasiado holgada.

✓ Usa la bata dentro del laboratorio o lugar de trabajo; evita portarla cuando estés en otros lugares y diseminar residuos de las sustancias o contaminar superficies. Guárdala en una bolsa de plástico para transportarla.

✓ Una bata constituye una capa protectora adicional, pero no se usa como capa de superhéroe, debe portarse abotonada.

✗ Las bolsas de la bata no son para guardar /transportar material de cristalería o recipientes con sustancias.

✗ Una bata sucia implica riesgos de contacto con residuos de sustancias. Lava la bata con frecuencia; es importante lávela por separado de la ropa común.

✗ Una bata demasiado holgada podría implicar el riesgo de atorarse con equipo mecánico en operación.

✓ Cuando realices experimentos, procura que **TODA** tu ropa esté hecha de fibras naturales, ya que también pueden considerarse capas protectoras. Usa pantalones largos.

Hugo Joaquín Ávila Paredes;
Diseño de pictogramas de esta
sección:
Carlos Rivera Vega; Fotografía:
Ilda Olivia Santos Mendoza

* Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa.
Departamento de Ingeniería en Procesos e Hidráulica



Últimas Noticias



51° Congreso Mexicano de Química 35° Congreso Nacional de Educación Química PLENARISTAS INVITADOS

Dr. Omar Yaghi

James and Neeltje Tretter Chair Professor of Chemistry,
University of California, Berkeley, Faculty Scientist



Miércoles 28 de septiembre,

16:30 - 18:30

Polideportivo

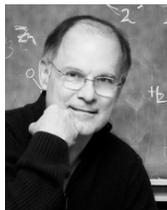
Auditorio "Josefina García Quintanar"

MOFs are porous nano-materials created by linking inorganic and organic materials in repeating units. Because of their extremely high surface areas and porosity, MOFs are renowned for their capacity to capture and contain gases such as hydrogen and carbon dioxide.

Some MOFs can store significantly more gas molecules per unit area than an empty container at the same pressure by allowing the gas molecules to settle into a tighter and more stable configuration.

Professor, Douglas W Stephan

Canada Research Chair, Department of Chemistry,
University of Toronto, Canada
"FRSC FRS FLP Chemistry: New Avenues in SynthesisV
and Catalysis"



Sábado 1 de octubre,

18:30 - 19:30

Polideportivo Auditorio "Josefina García Quintanar"

You plan to apply my skills and experience in nanostructure synthesis and characterization to prepare new catalysts and devices for the electrochemical reduction of carbon dioxide.

Specialties: Fuel cells, nanotechnology, batteries, electrocatalysis, materials characterization, electrode design, electrochemistry, oxygen reduction.

Patent: Three-dimensional supported platinum or platinum alloy nanowire catalysts and electrodes for fuel cell applications.

Dr. Drew Higgins

Stanford University
"Synthesis strategies for surface and nanostructure
engineering of alkaline-based oxygen reduction
electrocatalysts and the implications for metal-air batteries"



Jueves 29 de septiembre,

16:30-17:30

Polideportivo

Auditorio "Josefina García Quintanar"

His research interests span a wide range of inorganic main group and organometallic chemistry. In the more fundamental projects, new reactivity and chemical transformations are targeted with a view to developing new catalysts to either new materials or new processes. In addition, collaborations with industry address the design and development of new catalyst and process technologies for use in commercial applications.

Dra. Lydia R. Galagovsky

Centro de Formación e Investigación en Enseñanza de las
Ciencias, Universidad de Buenos Aires, Argentina



Viernes 30 de septiembre,

10:00 - 11:00

Polideportivo

Auditorio "Josefina García Quintanar"

Investigadora en las áreas de Química Orgánica y de Enseñanza de las Ciencias.

Entre sus libros se encuentran: Hacia un nuevo rol docente; Redes Conceptuales. Aprendizaje, comunicación y memoria, Química Orgánica. Fundamentos teórico-prácticos del laboratorio, Didáctica de las Ciencias Naturales.

Dr. Vicente Talanquer

Universidad de Arizona



Viernes 30 de septiembre,

16:30 - 17:30v

Edificio A, Aula Maga, "Luis Espinoza Farias"

Formador de profesores de ciencias para el nivel medio y medio-superior. Su trabajo de investigación educativa se desarrolla en dos áreas principales: Origen de las ideas intuitivas, marcos conceptuales y los patrones de razonamiento utilizados por de los estudiantes de química y Desarrollo del conocimiento pedagógico del contenido y pensamiento de los docentes de química, Autor o coautor de más de 10 libros de texto para la primaria y secundaria mexicanas y de cerca de 80 artículos arbitrados en fisicoquímica, educación química.

Dr. Miguel Costas Basin

Facultad de Química,
Universidad Nacional Autónoma de México



Jueves 29 de septiembre,

10:00-11:00

Polideportivo Auditorio "Josefina García Quintanar"

Sus áreas de investigación en Físicoquímica son

Estabilidad termodinámica y cinética de proteínas, y propiedades de bulto y superficie de mezclas líquidas. Empleando los métodos experimentales y teóricos de la fisicoquímica para el estudio de sistemas bioquímicos (proteínas), y mezclas líquidas que forman estructuras altamente organizadas tanto en el bulto como en la intercara líquido/aire.

Colabora con colegas del IFC en la búsqueda de fármacos para curar la enfermedad de Chagas.

Dr. Héctor Viadiu

Instituto de Química,
Universidad Nacional Autónoma de México



Sábado 1 de octubre

10:00 - 11:00

Polideportivo

Auditorio "Josefina García Quintanar"

Experto en el campo de la determinación de estructuras de macromoléculas por microscopía electrónica usando análisis de partículas individuales y cristalografía de electrones y por cristalografía de rayos X. Su trabajo se ha especializado principalmente en proteínas que unen ADN y proteínas de membrana.

Se ha enfocado en entender la estructura de proteínas involucradas en procesos cancerosos. Líder mundial en el estudio de la estructura de los factores de transcripción de la familia de p53.

Ciudad del Conocimiento - UAEH, 28 sep - 1 oct, 2016

Sociedad Química de México, A.C.

"La química nos une"

www.sqm.org.mx Teléfono + 52 55 5662 6837



CONACYT
Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología





La Sociedad Química de México A.C., y sus asociados lamentan el sensible fallecimiento de **Don Arnulfo Mauricio Canales Gajá** quien fuera presidente de esta asociación entre 1998 y 2000. Acaecido el 6 de junio del presente año en Garza García, Nuevo León a los 92 años de edad.

Q.E.P.D.

Muestra de la calidad de su trabajo son los numerosos premios que recibió a lo largo de su vida, entre los que podemos mencionar el Premio al Mérito por Contribución Extraordinaria a la Industria Cervecera de la Master Brewers Association of the Americas (1982), el Premio Quetzalcóatl de la SQM sección Nuevo León (1988) y el Premio Nacional de Química Andrés Manuel del Río en el área Tecnología Química por la SQM (1992). Además, en 2002, la Unión Química de México le otorgó el Premio Doctor Mario Molina.

