

Premio a la Mejor Tesis de Doctorado en Ciencias Químicas "Rafael Illescas Frisbie", edición 2022 Dr. José Abraham Colin Molina

El Dr. José Abraham Colin Molina estudió la licenciatura en Química en la Universidad Autónoma del Estado de México defendiendo su tesis en síntesis orgánica en 2014 bajo la dirección del Dr. David Corona Becerril. Posteriormente realizó sus estudios de Maestría y Doctorado en Ciencias en el Instituto de Química de la UNAM, trabajando en química del estado sólido bajo la supervisión del Dr. Braulio Rodríguez Molina obteniendo ambos grados con Mención Honorífica en 2016 y 2021 respectivamente. En 2019 fue galardonado con la Medalla Anual al Mérito Universitario "Alfonso Caso" por haber sido el graduado más distinguido en 2016 del programa de Ciencias Químicas de la UNAM. Cuenta con 14 publicaciones en revistas indexadas y un capítulo de libro. Ha participado en congresos nacionales e internacionales presentando diversos aspectos de su investigación. Actualmente se encuentra realizando una estancia postdoctoral en el campo de la electrónica molecular en el Departamento de Ingeniería Química y Ciencia de Materiales de la Universidad de Minnesota, EUA.

La tesis por la que fue acreedora al Premio a las Mejores Tesis de Maestría "Rafael Illescas Frisbie" edición 2022 se titula "Hacia la construcción de máquinas moleculares basadas en derivados de carbazol: relación entre la estructura cristalina y el movimiento rotacional intramolecular" y su resumen se presenta a continuación.

La investigación reciente en el campo de los sólidos funcionales ha indicado que algunas propiedades emergentes de los cristales muestran una relación sinérgica con el movimiento de sus moléculas; por lo cual, resulta imperativo abordar el estudio de este último. El conocimiento generado en el campo de las máquinas moleculares en estado sólido sugiere que existen requerimientos estructurales que se deben cumplir para observar movimiento molecular de alta frecuencia, por lo que también han sido llamados cristales amfidinámicos. La esencia del presente trabajo fue demostrar como el uso de algunos derivados de carbazol puede dar lugar al ensamblaje de máquinas moleculares con movimientos rotacionales altamente eficientes.

Para evidenciar nuestras ideas, se prepararon diferentes rotores moleculares covalentemente unidos con átomos de halógeno en la periferia y otros con fragmentos alifáticos en la estructura de carbazol. El primer grupo de rotores permitió demostrar que la posición del halógeno es relevante para generar diferentes interacciones intermoleculares dentro del cristal, lo cual resultó en un cambio de la dinámica intramolecular. Los resultados obtenidos se publicaron en la revista insignia de la Royal Society of Chemistry, *Chemical Science*, **2019**, *10*, 4422 (F.I. 9.97). La segunda idea demostró que los movimientos vibracionales y conformacionales tienen el alcance de activar y modular el movimiento rotacional en cristales y más aún, se comprobó la coexistencia de movimiento molecular y fluorescencia en el estado sólido, los detalles de estos estudios se reportaron en la revista especializada *CrystEngComm*, **2020**, *22*, 3789 (F.I. 3.84).

Posteriormente, se prepararon una serie de rotores supramoleculares cristalinos ensamblados por enlaces de



Dr. José Abraham Colin Molina, ganador del Premio a la Mejor Tesis de Doctorado "Rafael Illescas Frisbie" Edición 2022.

hidrógeno. El primero se reportó en la prestigiosa revista *Matter*, **2019**, *1*, 1033 (F.I. 19.96), ya que mostró un cambio macroscópico muy notorio alrededor de 40 °C, con una inesperada transducción de energía térmica en energía mecánica (efecto termosaltante o de *cristales saltarines*), siendo uno de los primeros ejemplos donde se reporta movimiento a escala molecular y macroscópica. Es importante notar que este trabajo fue resaltado por el Prof. Sir Fraser Stoddart, Premio Nobel de Química 2016 como el futuro de las máquinas cristalinas. Con la intención de explorar el alcance de nuestro diseño molecular investigado anteriormente, se prepararon análogos con átomos de halógeno en su periferia, resultando en sólidos con frecuencias de rotación récord reportadas en la literatura (1.4 THz y 0.76 THz a temperatura ambiente) e inusuales cambios estructurales. Los hallazgos anteriores fueron reportados en la prestigiosa revista *Chem. Eur. J.*, **2020**, *26*, 11727 (F.I. 5.02), el cual que fue seleccionado como "HOT PAPER".

Finalmente, con todo el conocimiento adquirido a partir de los cristales moleculares reportados, se diseñó un par de rotores multicomponente con los cuales se demostró la viabilidad de preparación de materiales cristalinos con dos componentes móviles ultrarrápidos. Esta última aportación fue publicada en la revista más importante del área *Cryst Growth Des.* **2022**, *22*, 673 (F.I. 4.05). En su conjunto, los resultados de esta tesis demuestran que la ciencia realizada en México puede ser de vanguardia y que es atractiva para grupos de investigación en el extranjero. Se considera que los cristales con movimiento molecular serán clave en el diseño de sólidos con aplicaciones tecnológicas en el futuro, por lo que se espera que esta tesis contribuya en el entendimiento de la relación entre estructura cristalina y movimiento intramolecular.