

fracción de rayos X (XRD) y la degradación por espectrofotómetro a UV-vis.

Materia Condensada y Nanotecnología - LXV-005397

11:00-13:00 **Análisis estructural de nanocebollas crecidas por radiación de microondas** Manuel Alberto Saucedo Cañas (al177364@alumnos.uacj.mx), Universidad Autónoma de ciudad Juárez;

Hector Alejandro Trejo Mandujano (htrejo@uacj.mx), Universidad Autónoma de ciudad Juárez;

*Elsa Ordoñez-Casanova (eordonez@uacj.mx), Universidad Autónoma de ciudad Juárez; *Expositor.

Se presenta un estudio estructural y morfológico de varias muestras de nanocebollas, las cuales fueron sintetizadas utilizando un horno de microondas controlando su potencia a diferentes tiempos y como fuente de carbono, se utilizó grafito molido. Las muestras obtenidas muestran una variedad de tamaños y formas de nanocebollas dependiendo del tiempo de exposición. Para verificar las estructuras y formas de las nanocebollas las muestras fueron caracterizadas utilizando SEM, EDS y RAMAN.

Materia Condensada y Nanotecnología - LXV-005526

11:00-13:00 **Neurotransmisores lumínico-cuánticos, los Sherlock Holmes del S. XXI:** Beatriz Elizabeth Fuentes Madariaga (beatriz.fuentes@ciencias.unam.mx), Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ciencias, Departamento de Física;

Sergio Alfonso Pelayo Escalera (sape@ciencias.unam.mx), Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ciencias, Departamento de Física;

*José Alejandro Sánchez Valle (alex8379@ciencias.unam.mx), Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ciencias, Departamento de Física; *Expositor.

Los nanomateriales son aquellos con una dimensión en el orden nanométrico. Los nanomateriales basados en carbono y nitrógeno, elementos fundamentales para la formación de la vida terrestre, tienen un potencial sobresaliente que permite la modulación de sus propiedades ópticas, electrónicas y optoelectrónicas en contraste a su versión de bulto. Entre estos últimos se encuentran: el grafeno, 2-dimensional; nanotubos de carbono, 1-dimensional; y los nanocúmulos y los puntos cuánticos (Quantum Dots, QD, en inglés), ambos 0-dimensionales. Los QD basados en grafeno (GQD) al ser dopados con nitrógeno, denominados N-GQD, obtienen actividades catalíticas, propiedades ópticas y biocompatibilidad de interés en la investigación. En este trabajo se presentarán a los GQD y N-GQD, sus características mediante Mecánica Cuántica y su desempeño en la investigación físico-biomédica orientada a los N.I.D.O.C. (Neurotransmisores Incorporados al Dominio Cuántico).

Materia Condensada y Nanotecnología - LXV-005655

11:00-13:00 **Temozolomide adsorption on doped fullerenes with transition metals. A theoretical study** Alan Joel Miralrio Pineda (miralrio@tec.mx), Instituto Tecnológico de Monterrey;

Francisco Miguel De Jesús Castro Martínez (miguel.castro.m@gmail.com), Universidad Nacional Autónoma de México;

*Bryan Ashley Acosta García (ashleyacosta872@gmail.com), Universidad Nacional Autónoma de México; *Expositor.

Temozolomide (TMZ) is a DNA alkylating-type drug that can cross the blood-brain barrier and is therefore used in the treatment of gliomas. This drug at physiological pH has a very short half-life so a high dose is required for malignant brain tumors, leading to serious side effects.

Nanomaterial-based drug delivery systems have been proposed as smart compounds to target delivery to tumor cells. Nanocarriers can transport a high dose of drug molecules and their ability to modify the surface produces a targeted delivery system. Fullerenes and their derivatives stand out as drug carriers due to their high capacity. Thus, these have shown a protective impact on the heart and liver against chronic intoxication resulting from chemotherapy. It has been found that fullerenes can cross the cell membrane to reach tumor cells, concentrating in the nucleus, lysosomes, and cytoplasm.

In this work, the structural, energetic, electronic and optical properties of temozolomide adsorption on the surface of fullerenes type C₅₉-TM (TM=Ti, Cr, Fe, Ni, Zn) are evaluated at the DFT level of theory. The functional M06-2X, 6-311G(d,p) basis set and the empirical correction term, D3, were used. Fullerene-drug interactions are characterized by calculating chemical reactivity descriptors, adsorption energies, frontier molecular orbitals, charge distributions, electron density topology, electrostatic potential maps, IR and UV spectra. In addition, the aromaticity in fullerenes was evaluated using the NICS_{iso(0)} index.

Materia Condensada y Nanotecnología - LXV-005728

11:00-13:00 **Estudio ab initio de la oxidación de sistemas 2D basados en dicalcogenuros de metales de transición** Jonathan Guerrero Sánchez (guerrero@cnyn.unam.mx), Centro de Nanociencias y Nanotecnología;

José Israel Paez Ornelas (josepaez@cicese.edu.mx), Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada;

José De Jesus Quijano Briones (jose.quijanobrns@uanl.edu.mx), Centro de Investigación en Ciencias Físico Matemáticas;