



Comenzamos en breve, a las 1 CDT / 2 EDT



El desarrollo de materiales para combatir el creciente cambio climático y mitigar sus efectos adversos es un desafío que enfrenta nuestra sociedad. El aprovechamiento de CO_2 para su conversión a compuestos químicos con valor agregado es una avenida de investigación compleja pero posible con esfuerzos multidisciplinarios. Hoy en día, el desarrollo de materiales que respondan a la creciente dualidad existente entre el incremento en la demanda de energía y las emisiones de carbono, es una necesidad que ha afectado progresivamente las investigaciones en el área de energía.

Regístrate Gratuitamente

Durante el webinar gratuito, el Dr. Jesús M. Velázquez de la Universidad California, Davis hablará sobre su trabajo de investigación para establecer relaciones de estructura-función en materiales dentro de las clases versátiles de calcógenos MX_2 y fases Chevrel (CP) $\text{M}_3\text{Mo}_2\text{X}_8$. Regístrese para descubrir cómo las estructuras de sulfuro de molibdeno de ambas familias exhiben una excepcional promesa como catalizadores de la reducción de CO_2 (CO_2R).

Durante el webinar gratuito, el Dr. Jesús M. Velázquez de la Universidad California, Davis hablará sobre su trabajo de investigación para establecer relaciones de estructura-función en materiales dentro de las clases versátiles de calcógenos MX_2 y fases Chevrel (CP) $\text{M}_3\text{Mo}_2\text{X}_8$. Regístrese para descubrir cómo las estructuras de sulfuro de molibdeno de ambas familias exhiben una excepcional promesa como catalizadores de la reducción de CO_2 (CO_2R).

Lo Que El Público Aprenderá

- Por qué intercalantes metálicos inducen cambios en los estados electrónicos y en el diagrama de bandas del calcógeno anfitrión afectando sus propiedades optoelectrónicas
- Por qué reactividad para reducción de CO_2 está correlacionada con el incremento en la población de los estados electrónicos del calcógeno
- Por qué el mecanismo de hidrogenación de CO_2 transcurre por medio de dos caminos: uno oxofílico, y uno carbófilico

Ponente y Moderadora



Dr. Jesús M. Velázquez
Profesor Asistente, Departamento de Química, Universidad de California, Davis



Dra. Ingrid Montes
Profesora, Universidad de Puerto Rico, Recinto de Río Piedras

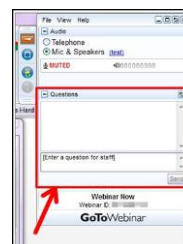
El cuadragésimo séptimo webinar en Español auspiciado por ACS y SQM

<https://www.acs.org/content/acs/en/acs-webinars/library/catalizadores-reduccion-co2.html>

1



¿Tiene preguntas para el ponente?



“¿Por qué he sido “silenciado”?”

No se preocupe. Todo el mundo ha sido silenciado, excepto el ponente y la moderadora. Gracias, y disfruten de la presentación.

Escriba y someta sus preguntas durante la presentación

2



SOCIIDAD QUÍMICA
DE MÉXICO A.C.
"La química nos une"



¿Está en un grupo hoy viendo el webinar en vivo?



Díganos de dónde son ustedes y cuántas personas están en su grupo!

3

3



SOCIIDAD QUÍMICA
DE MÉXICO A.C.
"La química nos une"



Por el amor a la química venimos de todos partes...

- ✓ Alemania
- ✓ Argentina
- ✓ Bolivia
- ✓ Brasil
- ✓ Canadá
- ✓ Chile
- ✓ China
- ✓ Colombia
- ✓ Costa Rica
- ✓ Ecuador
- ✓ Egipto
- ✓ El Salvador
- ✓ España
- ✓ Estados Unidos
- ✓ Francia
- ✓ Guatemala
- ✓ India
- ✓ Italia
- ✓ Japón
- ✓ México
- ✓ Pakistán
- ✓ Paraguay
- ✓ Perú
- ✓ Portugal
- ✓ Puerto Rico
- ✓ República Dominicana
- ✓ Suecia
- ✓ Uruguay
- ✓ Venezuela



Hoy tenemos representantes de **29 países**

4

4



C&EN pone a su disposición traducciones al español de sus artículos más populares.

C&EN EN ESPAÑOL

Spanish translations of C&EN's best weekly chemistry news.



Los intermedios de zeolita ofrecen nuevas posibilidades en catálisis

En medio de una conocida transformación de fase en zeolitas, los investigadores han encontrado especies activas que aceleran las reacciones catalizadas en medio ácido.

MARCH 21, 2022



Los químicos responden a la invasión de Ucrania

La comunidad científica se solidariza contra la invasión mientras los costes para la ciencia rusa aumentan

MARCH 7, 2022



Infografías Periódicas: Estimulantes comunes provenientes de las plantas

El profesor de química y bloguero de Compound Interest Andy Brunning describe algunos estimulantes conocidos que producen las plantas y explica por qué los producen.

FEBRUARY 28, 2022



Bonnie Bassler, Carolyn Bertozzi y Benjamin Cravatt reciben el Premio Wolf de Química 2022

El premio reconoce la innovación en la intersección entre la química y la biología, dicen los investigadores

FEBRUARY 22, 2022

Queremos hacer de la ciencia de vanguardia más accesible a la comunidad química de habla española, y esta es nuestra contribución. Le da a los nacidos en España, América Latina, o los EE.UU., pero cuyo primer idioma es el español la oportunidad de leer este contenido en su lengua materna. Esperamos que les guste y sea de su utilidad.



Dr. Bibiana Campos Seijo
Editora en Jefe, C&EN

<http://bit.ly/CENespanol>

5

5



Beneficios de la Afiliación al ACS

c&en
CHEMICAL & ENGINEERING NEWS

Chemical & Engineering News (C&EN)
The preeminent weekly news source



ACS Webinars Archive of Recordings®

ACS Member only access to over 250 edited chemistry themed webinars. www.acswebinars.org



NEW! ACS Career Navigator

Your source for leadership development, professional education, career services, and much more

<http://bit.ly/ACSnewmember>

6

6



Sociedad Química de México



Desde sus comienzos de la Sociedad Química de México, se buscaba un emblema sencillo, no demostrar partidismo alguno y significar al gremio, debería representar un símbolo no sólo para los químicos, sino también para ingenieros, farmacéuticos, metalurgistas, en fin que englobe e identifique por igual a los científicos en todas sus áreas de la ciencia química.

www.sqm.org.mx

7

7



Mantente actualizado sobre la industria de la química y sus ciencias afines en la región

Suscríbete al Newsletter de CAS Hispanoamérica

Para darte de alta, puedes enviarnos un correo electrónico a acsihispanoamerica@acs-i.org

¡Hasta pronto!
www.cas.org

acsihispanoamerica@acs-i.org

8

8

South Eastern Regional Meeting American Chemical Society



LA CONVOCATORIA PARA SYMPOSIA ESTÁ ABIERTA

para más información
INGRID.MONTES2@UPR.EDU

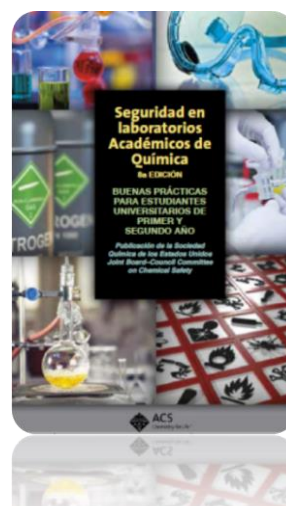
<http://www.sermacs2022.org>

9

Recursos del ACS en Español: Educación sobre Seguridad en el Laboratorio



- Seguridad en los laboratorios Académicos de Química para estudiantes Universitarios de Primer y Segundo año.
- Videos sobre RAMP para estudiantes de escuela secundaria (pero también pueden utilizarse para estudiantes universitarios) con subtítulos en español:
 - **Mentalidad de Seguridad**
 - **Hoja de datos de seguridad (SDS)**
 - **¿Cómo vestirse apropiadamente en un laboratorio? Y equipo de protección personal (EPP)**
 - **Preparándonos para emergencias**
 - **RAMP (Para Estudiantes)**
 - **RAMP (Para Educadores)**



<https://www.acs.org/content/acs/en/chemical-safety/resources/spanish-language-safety-resources.html>

10



La Sociedad Química de México, A.C. los invita al Diplomado de "Historia de la Química Mexicana"

Parte I

Del 23 de abril al 27 de agosto de 2022.

MÓDULO I

La Química en el México Colonial

MÓDULO II

Química y Farmacia en el Siglo XIX

MÓDULO III

La Tradición Herbolaria: Los Productos Naturales



Parte II

Del 10 de septiembre al 10 de diciembre de 2022.

MÓDULO IV

La Profesión Química en México

MÓDULO V

La Industria Química en México

MÓDULO VI

La Institucionalización de la Investigación Química en México

Dirigido a:
Egresados de licenciaturas de áreas científicas y humanísticas, estudiantes de estas licenciaturas, docentes de educación media y superior.

Duración:
120 horas

Sesiones sabatinas de 9:00 a 13:00 hrs. (GMT -6) de forma telemática.

*Avalado por el Instituto de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México.

†Puedes pagar el costo del diplomado completo en 3 cómodas mensualidades.

www.sqm.org.mx | contenidosacademicos@sqm.org.mx



Costos (I.V.A. incluido):

\$6,000.00 M.N.* Público en general. \$50.00 M.N. por hora de conferencia impartida.

Costo por sesión de dos horas (conferencia): \$500.00 M.N.

Costo por día: \$1,000.00 M.N.

50% de descuento en todas las opciones para miembros de la Asociados o miembros vigentes de la Sociedad Química de México, del Colegio Nacional de Químicos Farmacéuticos Biólogos México, Asociación Farmacéutica Mexicana, Academia Nacional de Ciencias Farmacéuticas, Instituto Mexicano de Ingenieros Químicos y Colegio Nacional de Ingenieros Químicos y de Químicos.

Disposición de becas previa justificación.

Más información en:

<https://sqm.org.mx/diplomado-historia-de-la-quimica-mexicana/>



11



12

73rd Southeastern Regional ACS meeting (SERMACS 2022)



The Puerto Rico Convention Center is the largest and most technologically advanced meeting facility in the region. It's also one of the greenest!

[LinkedIn](#)
[twitter](#)
[facebook](#)
[Instagram](#)
 @SERMACS2022

The Puerto Rico Convention Center

The Puerto Rico Section of the American Chemical Society is hosting the 73rd Southeastern Regional ACS meeting (SERMACS 2022), which will be held on **October 19-22, 2022 in beautiful San Juan, Puerto Rico.**

The theme of the meeting is “**CHEMISTRY TRANSCENDING BOUNDARIES FOR A SUSTAINABLE FUTURE**”. Our Local Section last hosted this meeting in 2009 with a record number of attendees and this year we are hoping to establish a new record. SERMACS 2022 will be an international event that we are promoting heavily both in the United States and all-over Latin America.

We invite you to explore this website for information, news and updates of this historic event.

<https://sermacs2022.org>

13

13



Catalizadores de la Reducción de CO2 con Gran Promesa



Dr. Jesús M. Velázquez
 Profesor Asistente, Departamento de Química, Universidad de California, Davis



Dra. Ingrid Montes
 Profesora, Universidad de Puerto Rico, Recinto de Río Piedras

Las imágenes de la presentación están disponibles para el evento de hoy.
<https://www.acs.org/content/acs/en/acs-webinars/library/catalizadores-reduccion-co2.html>

El Webinar de hoy está auspiciado por la Sociedad Química de México y American Chemical Society

14

14



Estableciendo control sobre la composición en
sulfuros metálicos electrocatalizadores 2D y 3D para
la conversión de CO_2 y CO a alcoholes

Jesús M. Velázquez
Profesor Asistente
Departamento de Química
Universidad de California – Davis

ACS Webinars en Español

 Labvelazquez

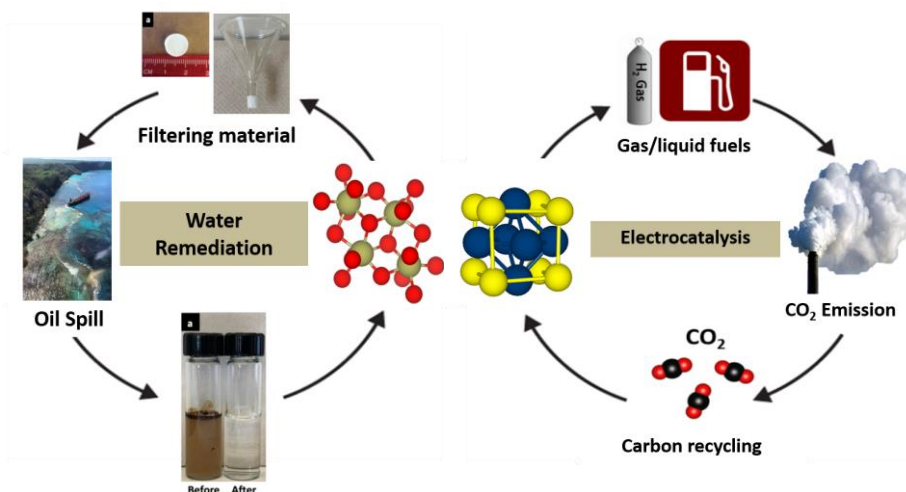
 @Velazquez_Lab

15

 UC DAVIS
UNIVERSITY OF CALIFORNIA

15

Química de Materiales: Energía y Remediación de Aguas Electrocatalisis de CO_2



16

 UC DAVIS
UNIVERSITY OF CALIFORNIA

16

Encuesta Para La Audiencia

RESPONDER A LA PREGUNTA HACIENDO
CLICK EN BREVE EN LA PANTALLA AZUL



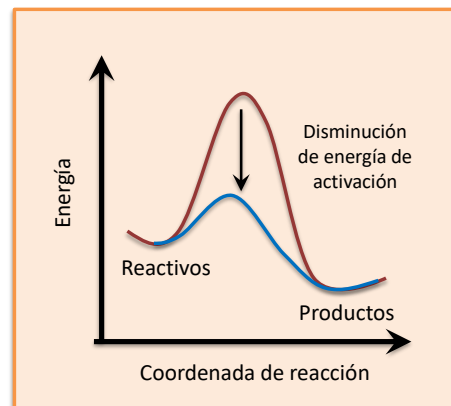
¿Cuán familiarizado/a está con electrocatálisis?

- Nunca realicé experimentos de electrocatálisis
- Estoy familiarizado/a con los fundamentos pero me beneficiaría aprender más
- Trabajo en electrocatálisis diariamente
- Tengo amplia experiencia en el campo de electrocatálisis

17

17

Electrocatalisis



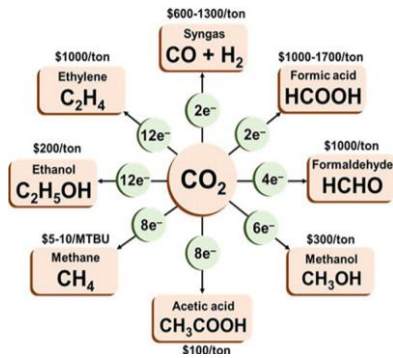
Energía
Eléctrica

Energía
Química

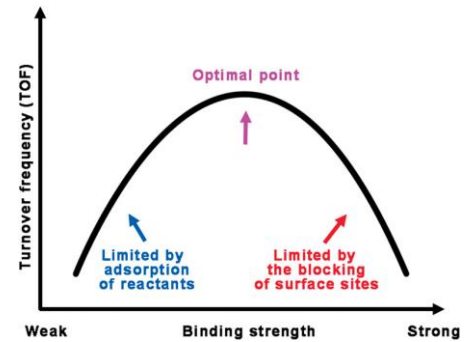
18

18

Oportunidades y Desafíos en Catálisis de CO₂



Requerimientos para un catalizador eficiente



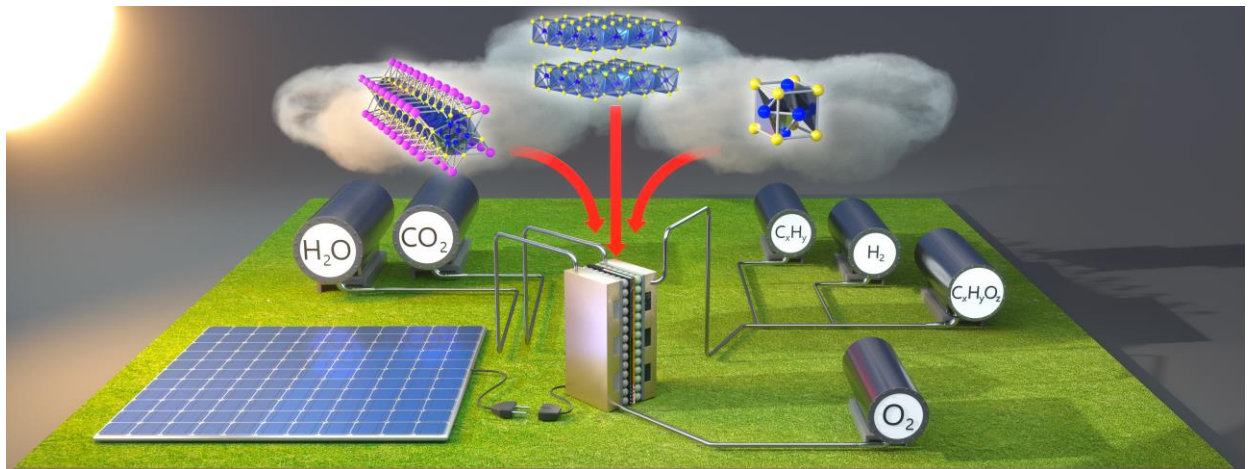
- Múltiples productos de reacción
- Competencia con HER en medio acuoso

19

Ponnunrangam, S., et al., Somasundaran, P., *Adv. Coll.and Interf. Sci.*, **2017**, 244, 184-198
 Mao, Y., et. al., Hu, P. *WIREs Comput. Mol. Sci.*, **2017**, e1321.

UC DAVIS
 UNIVERSITY OF CALIFORNIA

19



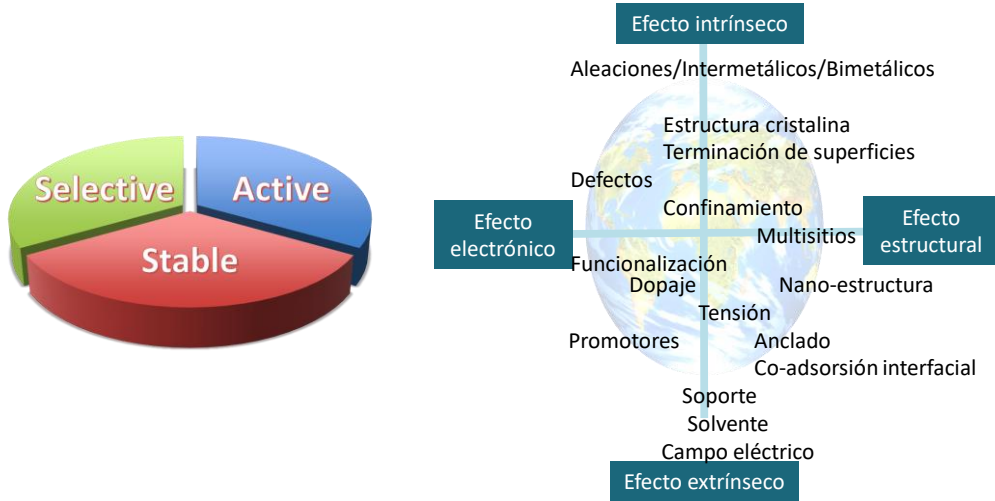
20

Perryman, J.P. and Velázquez, J. M., "Design Principles for Multinary Metal Chalcogenides: Towards Programmable Reactivity in Energy Conversion", *Chemistry of Materials* **2021**, 33 (18), 7133-7147.

UC DAVIS
 UNIVERSITY OF CALIFORNIA

20

Qué Deseamos en un Catalizador y Cómo lo Obtenemos?

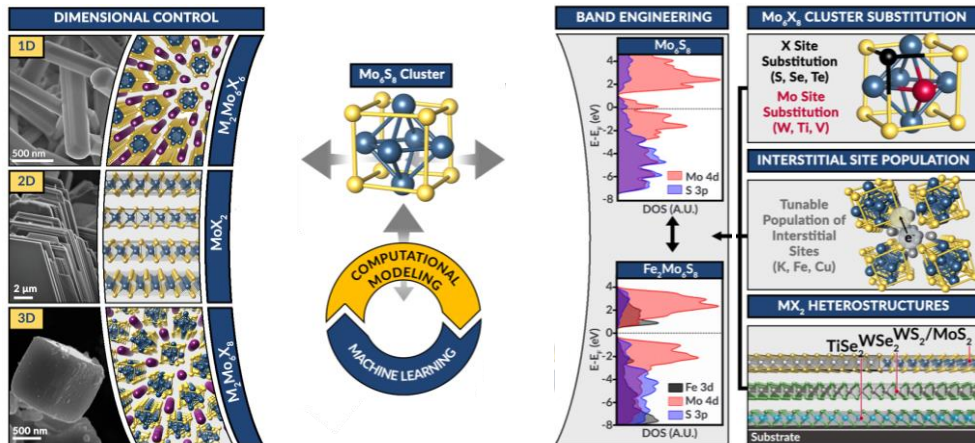


21 Adapted from: Vojvodic, A.; Nørskov, J.K. *National Science Review* 00: 1-4, 2015.

UC DAVIS
UNIVERSITY OF CALIFORNIA

21

Avanzando en el Diseño de Catalizadores: Sólidos Extendidos Pseudo Moleculares



Francis, S.A., Velázquez, J.M., et al., Lewis, N.S., *Chem. Mater.* **2018**, 30 (15) 4902–4908.

Perryman, J.P., et al., Velázquez, J. M., *J. Coord. Chem.* **2019**, 72(8), 1322–1335.

Perryman, J. T., et al., Velázquez, J. M., *Mater. Horiz.* **2020**, 7 (1), 193–202.

Perryman, J. T., Kulkarni, A. R., et al., Velázquez, J. M., *J. Mater. Chem. C*, **2020**, 8, 10742–10748.

Ortiz-Rodríguez, J., Singstock, N., et al., Holder, A.M., Musgrave, C.B., Velázquez, J. M., *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2020**, 12 (32) 35995–36003.

Lilova, K., et al., Musgrave, C.B., Navrotsky, A., Velázquez, J.M. *Chem. Mater.* **2020**, 32, 16, 7044–7051.

Singstock, N.R.; Ortiz-Rodríguez, J.C.; Perryman, J.T.; Sutton, C.; Velázquez, J.M.; Musgrave, C.B., *JACS* **2021**, 143 (24), 9113–9122.

Perryman, J.P., and Velázquez, J. M., *Perspective, Chemistry of Materials* **2021**, 33 (18), 7133–7147.

22

UC DAVIS
UNIVERSITY OF CALIFORNIA

22

Temas a Desarrollar

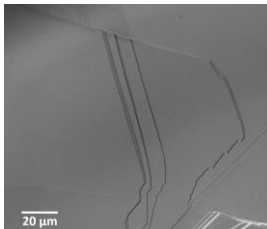
The diagram illustrates the structure of MoS₂ with a legend: K, Rb, Cs (purple); Mo (blue); S (yellow). It shows proton reduction (H⁺ + e⁻) and charge storage (represented by a battery symbol). To the right is a scanning electron micrograph (SEM) of MoS₂ nanowires.

1. El rol de estructura superficial de MoS₂ en CO₂R a alcoholes: monocristales vs películas delgadas (escalones vs terrazas)
2. Clusters M_yMo₆X₈: Estudiando los ‘efectos de ensamblaje’ en la reducción de CO/CO₂ y evolución de hidrógeno por medio de electrocatalisis
3. Diseño de nanocatalizadores monodimensionales M₂Mo₆S₆

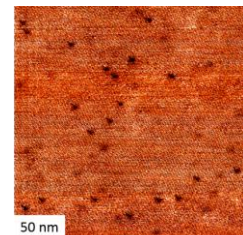
23

23

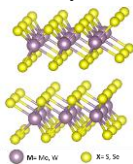
MX₂'s en capas



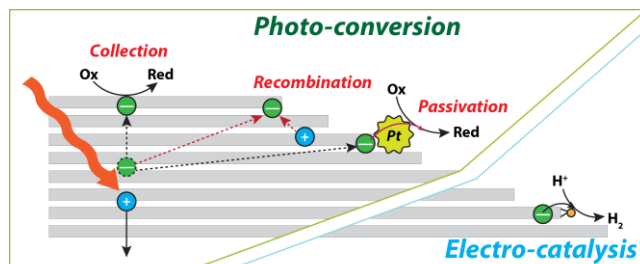
| | Terrazas | Bordes |
|------------------|----------|--------|
| Absorción de luz | ✗ / ✓ | ✗ |
| Cátalisis | ✗ / ✓ | ✓ |



Terrazas y Bordes



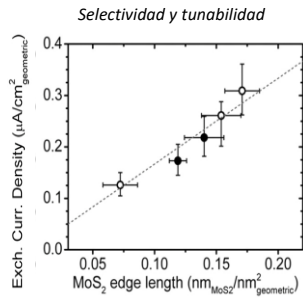
- Químicamente ‘inertes’
- E_g : 1.0-1.4 eV
- Transiciones ópticas de Metal d-d
- Alto α (~ 10⁵ cm⁻¹)



24

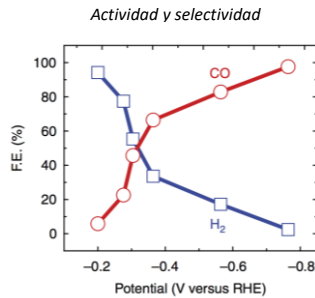
24

Qué sabemos de los bordes de MoS₂?



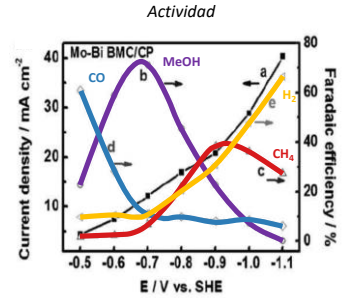
MoS₂ nanoparticulado tiene átomos de azufre sobre los sitios de bordes de Mo que son activos para la reacción de evolución de hidrógeno

Jaramillo *et al.*, *Science* 317 (2007) 100-102.



Átomos de Mo en sitios de borde de nanoflakes de MoS₂ son activos para la reducción de CO₂ a CO en 4 mol% [EMIM]BF₄/H₂O (pH 4)

Asadi *et al.*, *Nature Comm.* (2014) 5:4470



Nano-hojas bimetalicas de MoS₂/Bi₂S₃ son activas hacia la reducción de CO₂ a CH₃OH en 0.5 M [BMIM]BF₄ in MeCN; Bi impulsa la formación de CO; los sitios de Mo interactúan con CO

Sun *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* 55 (2016) 6771-6775.

25

UC DAVIS
UNIVERSITY OF CALIFORNIA

25

Preguntas

- Es MoS₂ activo para CO₂R en condiciones acuosas?
 - Qué tan activo?
 - Cuán selectivo?
 - Qué tan estable?
- Despreciando diferencias en la composición de los bordes, existen diferencias en la actividad sobre los bordes vs. las terrazas?

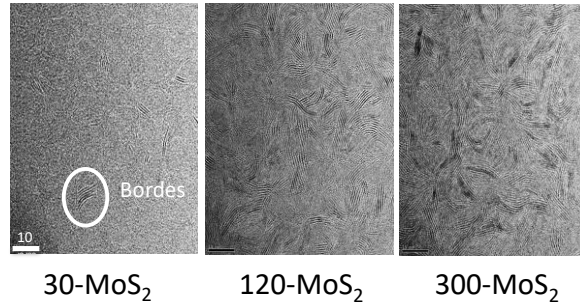
26

UC DAVIS
UNIVERSITY OF CALIFORNIA

26

Controlando la Densidad de Sitios de Borde

Depositar un film de Mo sobre n⁺Si (111) seguido de calentamiento en H₂S
Incrementando el tiempo de deposición de Mo (*t* seconds) la densidad de bordes en la película delgada de *t*-MoS₂ aumentan



Incremento en Densidad de Bordes

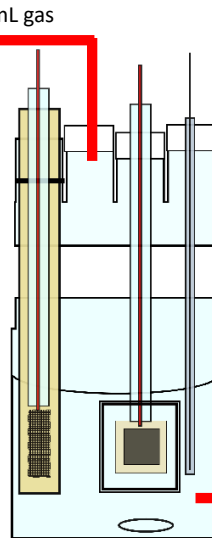
27

Francis, S.A*, Velázquez, J.M. *, et al., Lewis, N.S., *Chem. Mater.* 2018, 30 (15) 4902–4908

UC DAVIS
UNIVERSITY OF CALIFORNIA

27

Análisis de Productos de Electroquímica



- Supresión de agua:
Formato, alcoholes, acetona

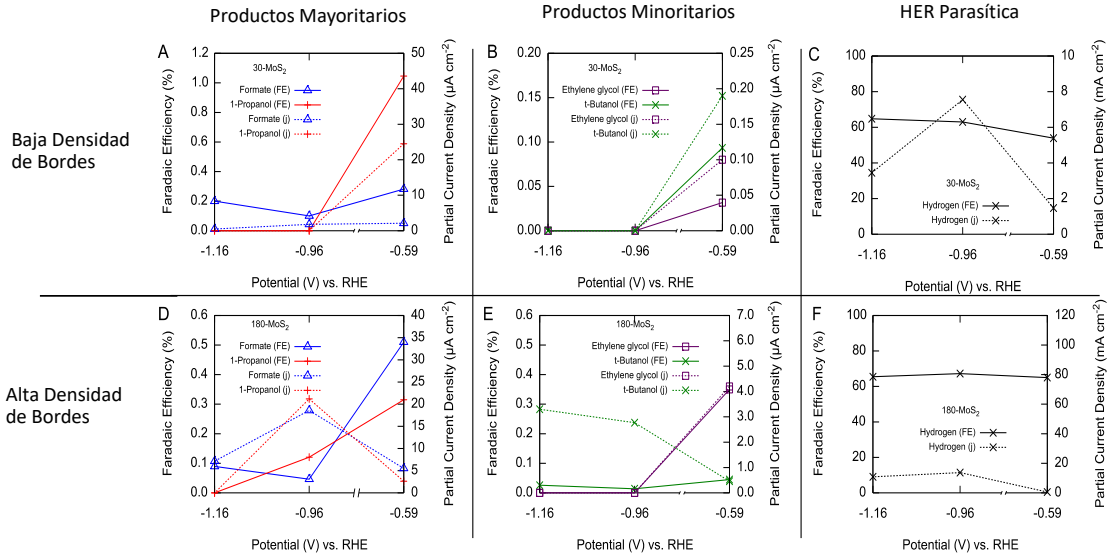
- Hidrógeno (TCD1 – N₂)
- Dióxido de carbono, etileno, etano, acetileno, oxígeno, nitrógeno, metano, monóxido de carbono (TCD2- He)

28

UC DAVIS
UNIVERSITY OF CALIFORNIA

28

Efecto de Densidad de Bordes en Actividad CO₂R

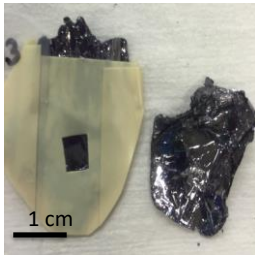


29

29

Investigando CO₂R en Terrazas

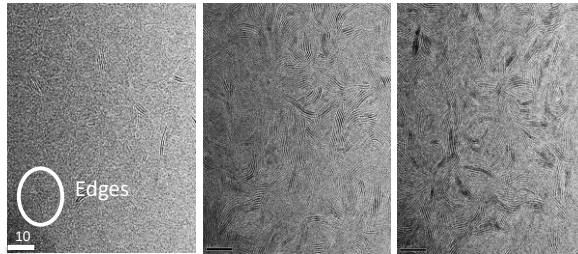
Aislar Terrazas con cinta



Terraza en monocristal

Depositar película de Mo sobre n'Si (111) seguido por calentamiento en H₂S

Tiempo de deposición Mo ↑ ⇒ Densidad de Bordes ↑



30-MoS₂

120-MoS₂

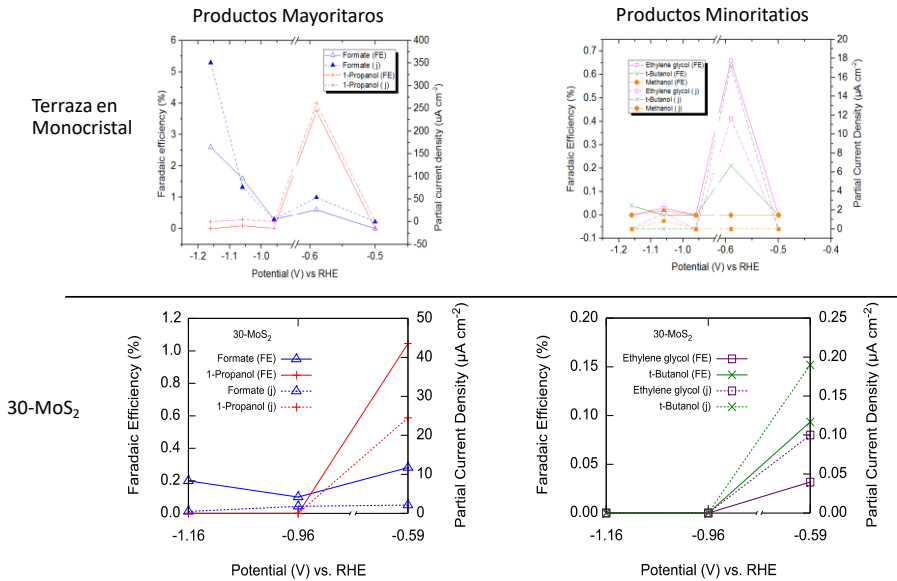
300-MoS₂

Incremento en Densidad de Bordes

30

30

Terrazas en monocristales se comportan como películas delgadas de baja densidad de bordes



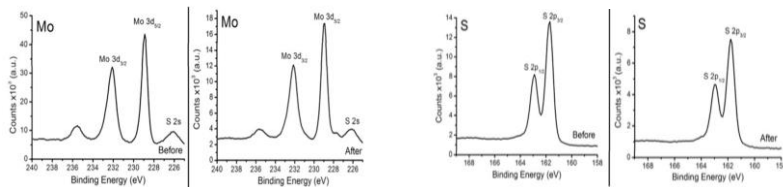
31

31

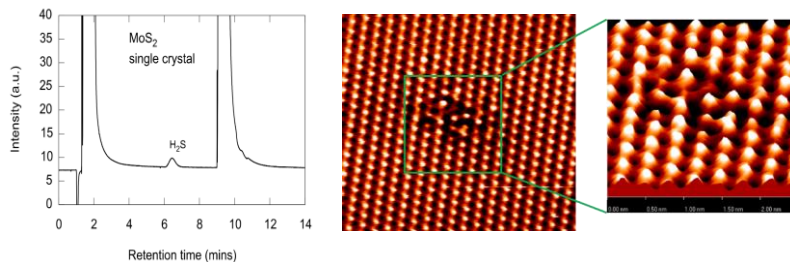
Son Estables las Terrazas en Monocristales?

-0.59 V vs. RHE in 0.10 M Na₂CO₃/CO₂ (pH 6.8)

XPS no indica cambios significativos en la superficie luego de electrólisis



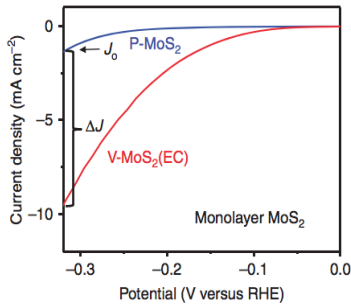
CG en línea y STM sugieren que durante la electrólisis ocurre una desulfuración



32

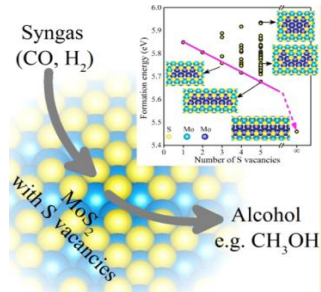
32

Es la Desulfuración Esencial para la Actividad?



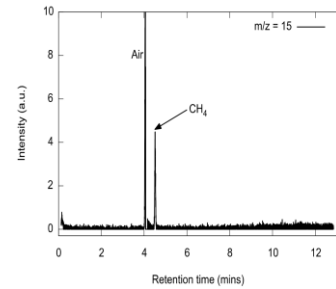
Vacancias de S son sitios activos para la generación de H_2 en 0.5 M H_2SO_4 (aq).

Tsai et al., *Nat. Commun.* 8 (2017) 15113.



Algunas geometrías de vacancias de S en terrazas son predecidas como catalíticamente activas para la hidrogenación de CO a methanol via exposición a átomos de Mo

Le et al. *J. Phys. Chem. C* 118 (2014) 5346 – 5351.



Éste trabajo: La reducción de CO produjo metano y ningún alcohol. La reducción de metano llevó a etileno y etano sin formación de alcoholes

33

UC DAVIS
UNIVERSITY OF CALIFORNIA

33

Encuesta Para La Audiencia

RESPONDER A LA PREGUNTA HACIENDO
CLICK EN BREVE EN LA PANTALLA AZUL



¿Cómo afecta la densidad de bordes en los productos mayoritarios de CO_2R en MoS_2 ?

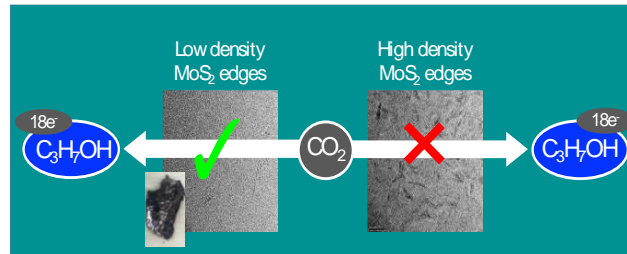
- A) La cantidad de bordes no afectan la distribución de productos de manera significativa
- B) La menor densidad de bordes favorece la formación de Propanol, mientras que la mayor densidad está relacionada con mayoritaria formación de formato
- C) Cuanto más bordes presentes, los productos mayoritarios tienen más átomos de carbono

34

34

Conclusiones... y más preguntas

1. MoS₂ convierte CO₂ a 1-propanol y formato en condiciones acuosas.
2. Terrazas/baja densidad de bordes parecen ser sitios activos para la transformación.



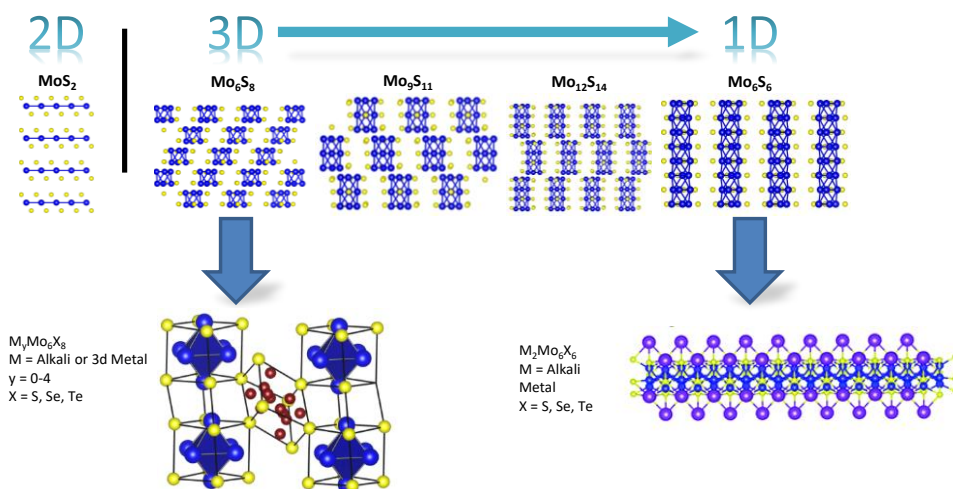
3. Cuál es el mecanismo (intermediarios) en la producción de alcoholes en terrazas?
4. Cumple la desulfuración un rol crítico en la actividad para CO₂R en Terrazas 'inertes'?

35

Francis, S.A*, Velázquez, J.M. *, et al., Lewis, N.S., *Chem. Mater.* 2018, 30 (15) 4902–4908

35

Calcogenuros Ternarios: Espacios composicionales no explorados

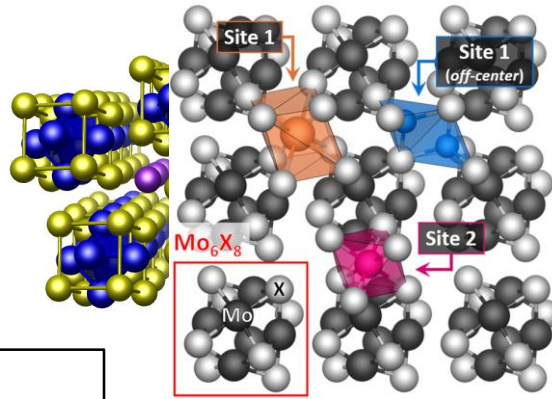
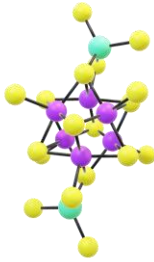


36

36

Chevrel-Phase

$M_yMo_6X_8$ (M=Metal alcalino, alcalino-térreo, de transición y post-transición; $y=0-4$; X=S, Se, Te)



Promesa en el espacio composicional de Chevrel-Phase:

- Producto termodinámico para la mayoría de las fases
- Sintetizable por medio de técnicas de alta y baja temperatura
- Material robusto sin metales nobles con aplicaciones extensivas en conversión de energía, almacenamiento de energía, y en electrónicos

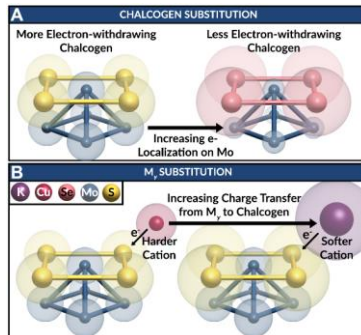
37

Lilova, K., et al., Musgrave, C.B., Navrotsky, A., Velázquez, J.M. *Chem. Mater.* **2020**, 32, 16, 7044–7051
Singstock, N.R.; Ortiz-Rodríguez, J.C.; Perryman, J.T.; Sutton, C.; Velázquez, J.M.*; Musgrave, C.B.*; *JACS* **2021**, 143 (24), 9113–9122.

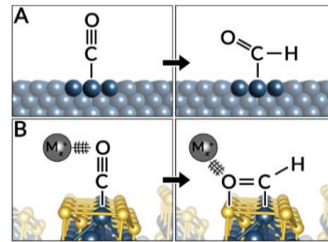
UCDAVIS
UNIVERSITY OF CALIFORNIA

37

Efecto electrónico 'de Ligandos'



Efectos de 'Ensamblaje' de sitio activo



Preguntas a investigar:

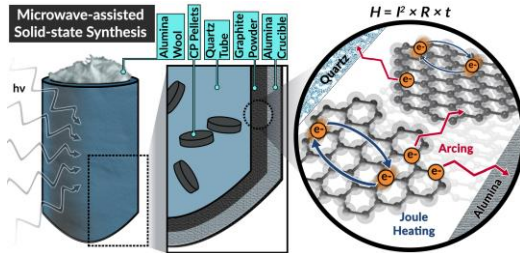
- *Cómo contribuye la coordinación Mo-X local a la selectividad y eficiencia de reacción?*
- *Cuál es el mecanismo por el cual cambios en la composición afectan estados electrónicos de frontera con importancia catalítica?*
- *Qué descriptor físico puede predecir la estabilidad y funcionalidad en composiciones ternarias y cuaternarias nuevas?*

38

UCDAVIS
UNIVERSITY OF CALIFORNIA

38

Método Rápido de Síntesis de Alta Temperatura de CPs Estables Por Medio de Microondas (RMASSS)



Beneficios de RMASSS:

- Generar condiciones de alta temperatura en < 1 minuto
- Prevención de oxidación bulk o superficial
- Material de aislamiento, suceptor y reactor de cuarzo son reutilizables

- Mix and mill high-purity M_y Mo, and MoX_2 precursors
 $yM + 2Mo + 4MoX_2 \rightarrow M_yMo_6X_8$
 $yM + 6Mo + 8X \rightarrow M_yMo_6X_8$
- Hydraulic press under N_2 atmosphere
- Pack under N_2 microfibrus Al_2O_3
- Irradiate graphite susceptor at 500-1200 W

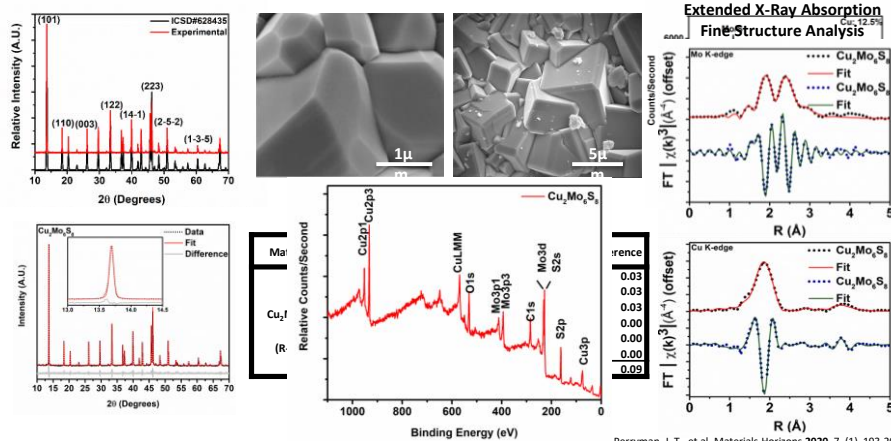


Panasonic Microwave Oven NN-SN686S Stainless Steel Countertop/Built-In with Inverter Technology and Genius Sensor, 1.2 Cubic Foot, 1200W (\$162.54 on Amazon)

39

39

Verificación Estructural y Composicional

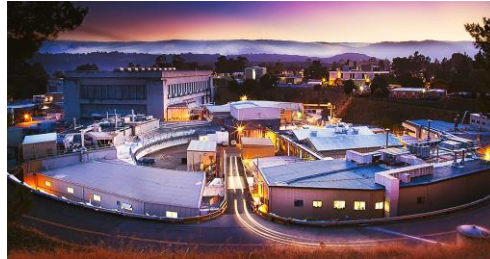


Perryman, J. T., et al. Materials Horizons 2020, 7, (1), 193-202

40

40

Caracterización Local y Electrónica con Técnicas de Síncrotron



Ryan Davis
Hard XAS
BL 4-1



Erik Nelson
Tender XAS
BL 4-3



Hirohito Ogasawara
Ambient Pressure XPS
BL 13-2



Apurva Mehta
Grazing Incidence XRD
BL 2-1

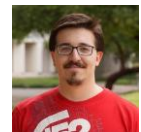
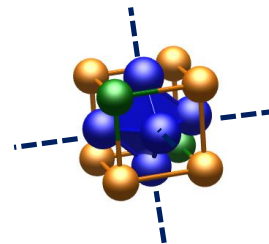
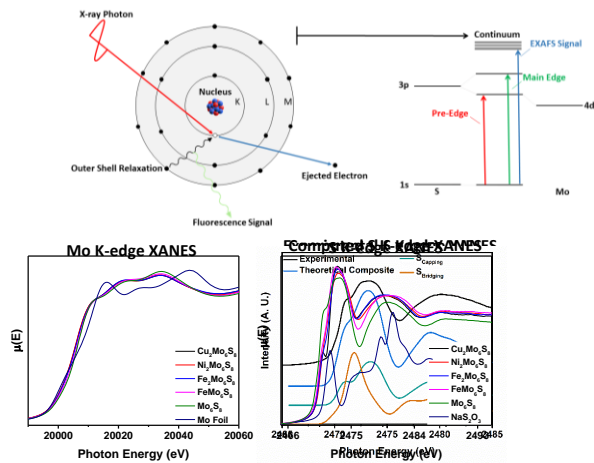


41



41

Control de Propiedades Electrónicas en CPs por Medio de Intercalación de Metales



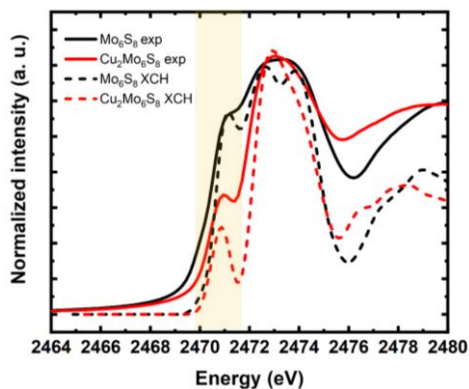
42

Perryman, J.P., et al., Velázquez, J. M., *J Coord Chem*, 2019, 72(8), 1322-1335.



42

Control de Propiedades Electrónicas en CPs por Medio de Intercalación de Metales



Análisis de cargas de Bader en átomos de azufre coordinados por 4 (S_1) y 3 (S_2) átomos de Mo en Mo_6S_8 y $Cu_2Mo_6S_8$

| Type | Mo_6S_8 | $Cu_2Mo_6S_8$ | Diferencia |
|-------|-----------|---------------|---------------|
| S_1 | -0.73 | -0.75 / -0.80 | -0.02 / -0.07 |
| S_2 | -0.63 | -0.79 | -0.16 |
| Mo | 0.94 | 0.86 / 0.87 | -0.08 / -0.09 |

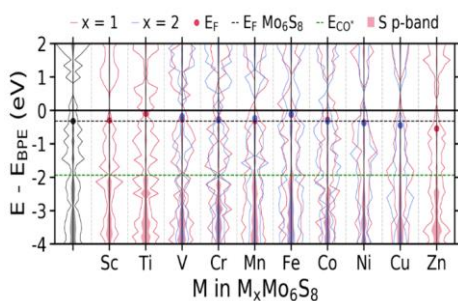


43 Hyler, F. P.,* Wuille Bille, B. A.,* et al., Velázquez, J. M., *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2022 (Under revision)

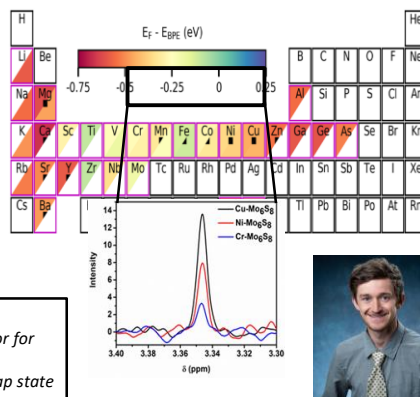
UC DAVIS
UNIVERSITY OF CALIFORNIA

43

Control de Propiedades Electrónicas en CPs por Medio de Intercalación de Metales



- Controlled intercalation modulates Mo binding affinity for CO
- Energy difference between Fermi level and branch point is a good first descriptor for CO_2RR activity
- Increased electron donation to Mo_6S_8 units reduces d-band center and opens gap state

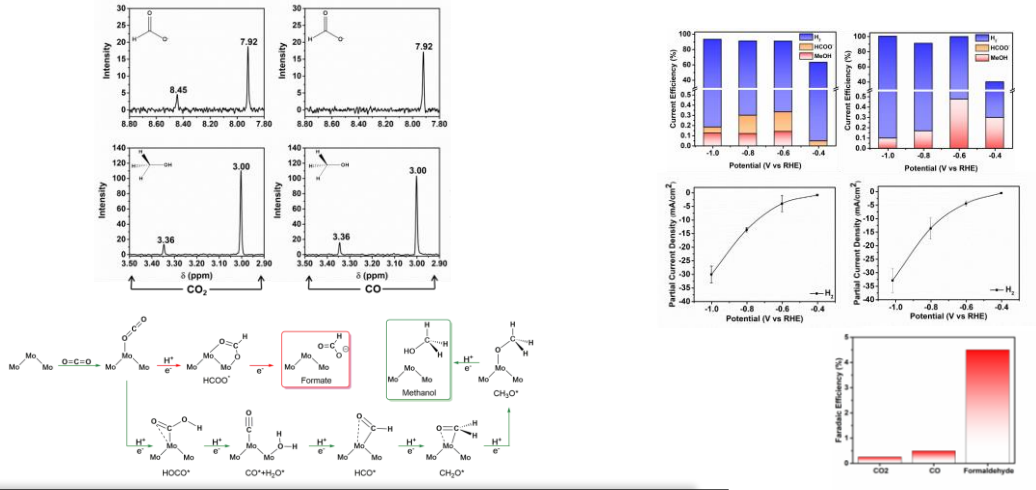


44 Singstock, N. R., Perryman, J. T., et al. *In Preparation*

UC DAVIS
UNIVERSITY OF CALIFORNIA

44

Electroreducción de CO₂/CO Sobre Cu₂Mo₆S₈

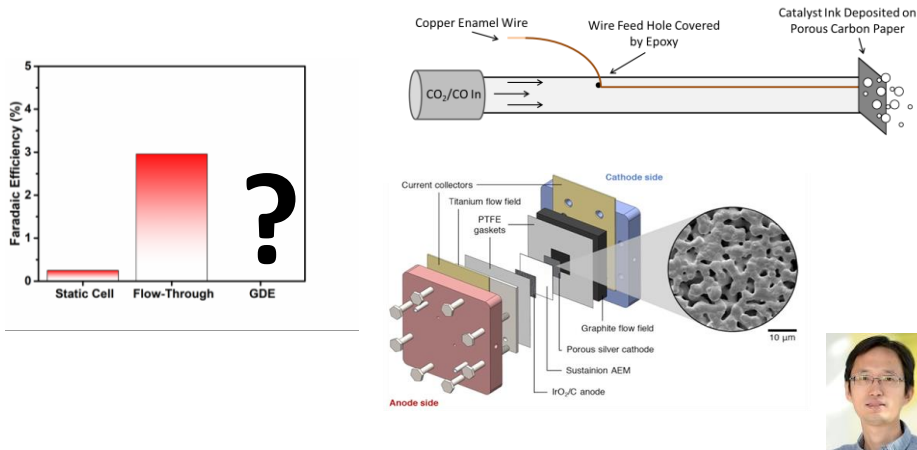


- Selectividad para productos líquidos C1 con competencia entre las vías de formato y metanol
- La vía oxofilica de formato es suprimida durante la reducción de CO
- Bajas densidades parciales de corriente para productos de reducción de CO₂ y CO debido a la competencia con HER y limitaciones de transporte de masa

Perryman, J. T., et al. *Materials Horizons* 2020, 7, (1), 193-202

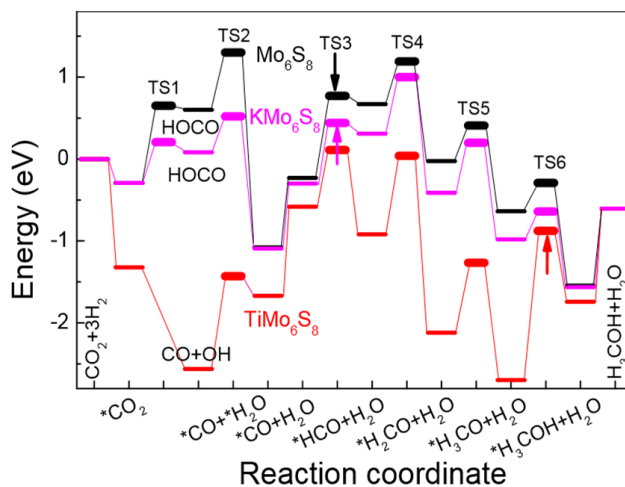
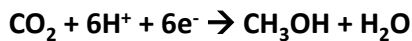
45

Electroreducción de CO₂/CO Sobre Cu₂Mo₆S₈



Xiang, C. *ACS Energy Lett.* 2018, 3, 4, 855-860

46



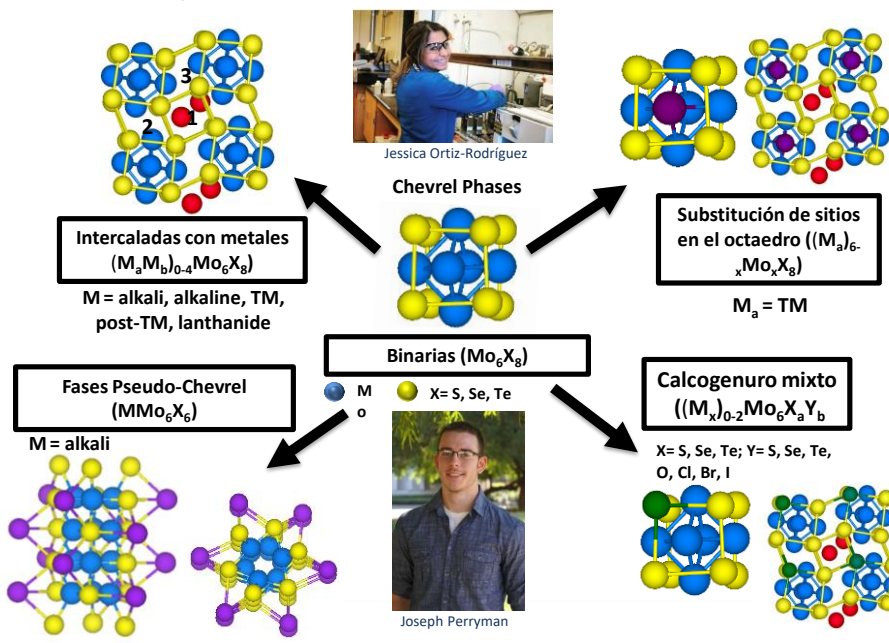
47

Liu et al, ACS Catal., 2015, 5 (2), pp 1004–1012

UC DAVIS
UNIVERSITY OF CALIFORNIA

47

Expanding to New CP Electro-catalysts



48

UC DAVIS
UNIVERSITY OF CALIFORNIA

48

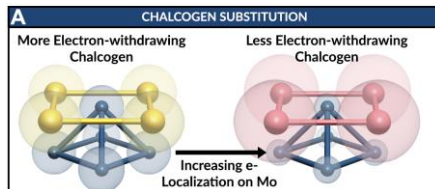
Chevrel Phases como Electrocatalizadores: Evolución de Hidrógeno

- La evolución de hidrógeno (HER) es la principal reacción competitiva con la reducción de CO_2 en medio acuoso
- Entender cómo la composición superficial afecta a la eficiencia para HER es esencial para incrementar la selectividad de una reacción sobre la otra

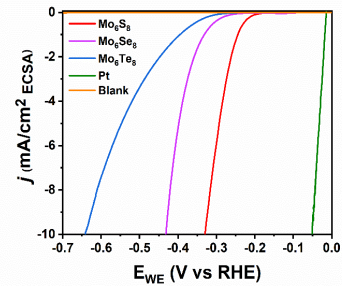


Jessica Ortiz-Rodríguez

Efecto de Ligando



Actividad para HER incrementa a medida que la electronegatividad del calcógeno aumenta

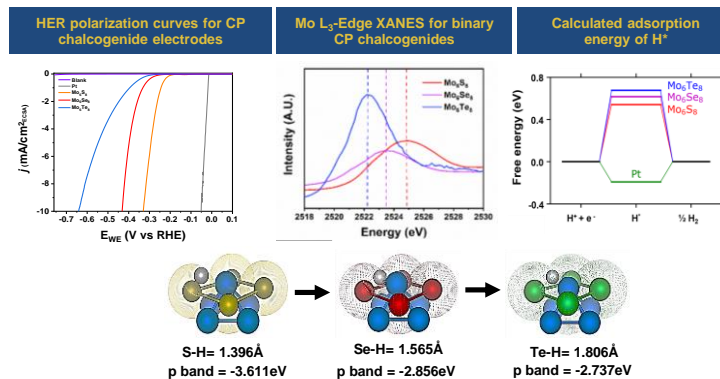
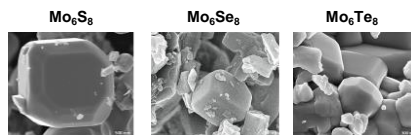


49 Ortiz-Rodríguez, J.*; Singstock, N.*, *ACS Applied Materials and Interfaces*. 2020, 12 (32) 35995-36003

UC DAVIS
UNIVERSITY OF CALIFORNIA

49

Adsorción de Protón en Superficies de Chevrel Phases (Mo_6X_6)



50

Ortiz-Rodríguez, J.*; Singstock, N.*, *ACS Applied Materials and Interfaces*. 2020, 12 (32) 35995-36003

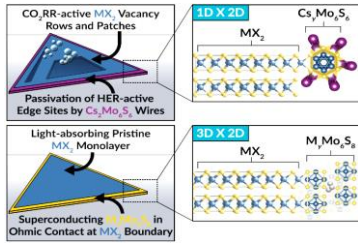
UC DAVIS
UNIVERSITY OF CALIFORNIA

50

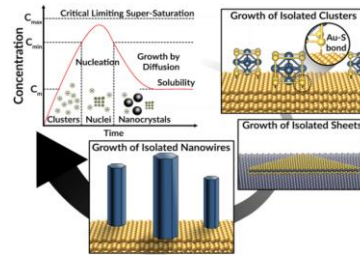
Direcciones Futuras



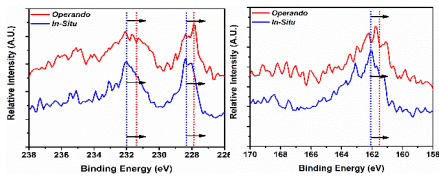
CO₂R mediada por Luz en Calcogenuros Hetero-estructurados



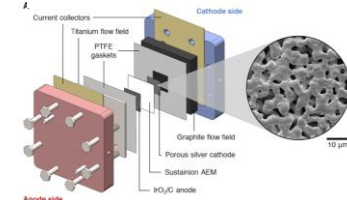
Autoensamblaje de Nanoestructuras Reactivas



Espectroscopía en Operando



Mejorar Eficiencias de Reacción



55

Hill, C.M.†; Mendoza-Cortez, J.L.†; Velázquez, J.M.* and Whitaker-Brooks, L.†. Multi-dimensional designer catalysts for negative emissions science (NES): bridging the gap between synthesis, simulations, and analysis. iScience 2022, doi.org/10.1016/j.isci.2021.103700.

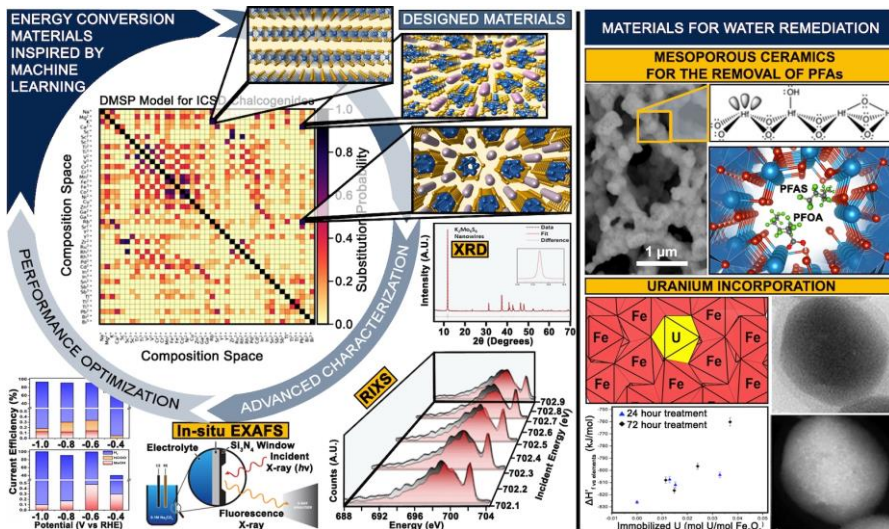


55

Investigación en el Velazquez Lab



Química de Materiales: Aplicaciones en Energía y Medio Ambiente



56



56

Impacto communitario a través de investigación y educación!

ChemEnergy REU



Chemistry Research Experience for Undergraduates in Catalysis, Energy, Materials, and Biotechnology

CHE 98



Teaching and mentoring first generation and low-income students

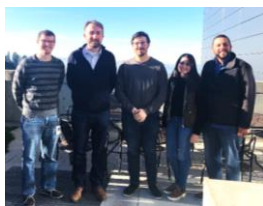


Ortiz-Rodríguez, J., et al., Velázquez, J. M., Promoting Inclusive and Culturally responsive Teaching using Co-classes for General Chemistry, *Journal of Chemical Education*, 2021, 99, 1, 162-170.



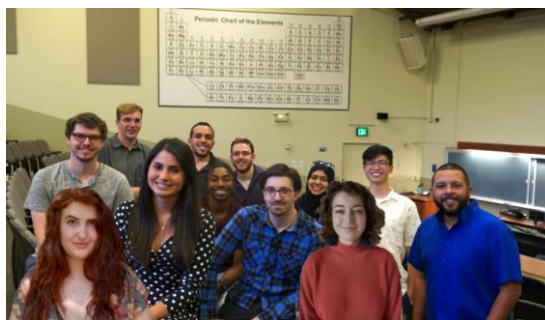
57

Agradecimientos



Collaborators

Dr. Maureen Kinyua (UC-Davis)
 Dr. David Prendergast (Molecular Foundry)
 Dr. Ana Sanz Matias (Molecular Foundry)
 Dr. Subhayan Choudhury (Molecular Foundry)
 Dr. Erik Nelson (SSRL)
 Dr. Matthew Latimer (SSRL)
 Dr. Ryan Davis (SSRL)
 Dr. Apurva Mehta (SSRL)
 Dr. Hirohito Ogasawara (SSRL)
 Prof. Aaron Holder (CU Boulder)
 Prof. Charles Musgrave (CU Boulder)
 Prof. Ambarish Kulkarni (UC Davis – Dept. of Chemical Engineering)
 Prof. Christopher Patridge (D'Youville College)

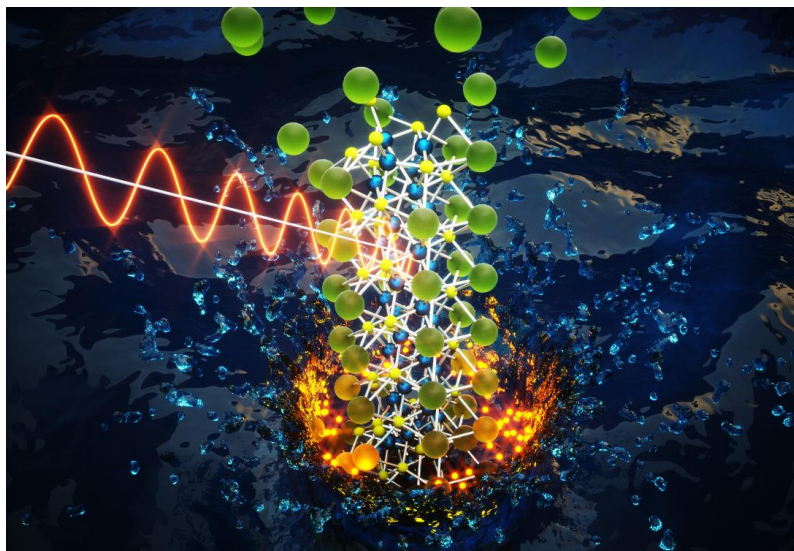


58



58

Preguntas?



59

UC DAVIS
UNIVERSITY OF CALIFORNIA

59

73rd Southeastern Regional ACS meeting (SERMACS 2022)



The Puerto Rico Convention Center is the largest and most technologically advanced meeting facility in the region. It's also one of the greenest!

The Puerto Rico Convention Center

The Puerto Rico Section of the American Chemical Society is hosting the 73rd Southeastern Regional ACS meeting (SERMACS 2022), which will be held on **October 19-22, 2022 in beautiful San Juan, Puerto Rico.**

The theme of the meeting is “**CHEMISTRY TRANSCENDING BOUNDARIES FOR A SUSTAINABLE FUTURE**”. Our Local Section last hosted this meeting in 2009 with a record number of attendees and this year we are hoping to establish a new record. SERMACS 2022 will be an international event that we are promoting heavily both in the United States and all-over Latin America.

We invite you to explore this website for information, news and updates of this historic event.

[LinkedIn](#)
[twitter](#)
[facebook](#)
[Instagram](#)

@SERMACS2022

<https://sermacs2022.org>

60

60



Catalizadores de la Reducción de CO2 con Gran Promesa



Dr. Jesús M. Velázquez
Profesor Asistente, Departamento de
Química, Universidad de California, Davis



Dra. Ingrid Montes
Profesora, Universidad de Puerto Rico,
Recinto de Río Piedras

Las imágenes de la presentación están disponibles para el evento de hoy.
<https://www.acs.org/content/acs/en/acs-webinars/library/catalizadores-reduccion-co2.html>

El Webinar de hoy está auspiciado por la Sociedad Química de México y American Chemical Society

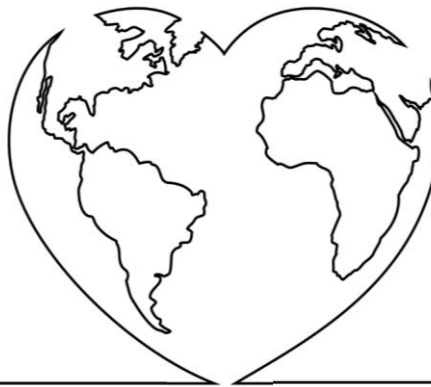
61

61



Por el amor a la química venimos de todos partes...

- ✓ Alemania
- ✓ Argentina
- ✓ Bolivia
- ✓ Brasil
- ✓ Canadá
- ✓ Chile
- ✓ China
- ✓ Colombia
- ✓ Costa Rica
- ✓ Ecuador
- ✓ Egipto
- ✓ El Salvador
- ✓ España
- ✓ Estados Unidos
- ✓ Francia
- ✓ Guatemala
- ✓ India
- ✓ Italia
- ✓ Japón
- ✓ México
- ✓ Pakistán
- ✓ Paraguay
- ✓ Perú
- ✓ Portugal
- ✓ Puerto Rico
- ✓ República Dominicana
- ✓ Suecia
- ✓ Uruguay
- ✓ Venezuela



Hoy tenemos representantes de **29 países**

62

62



C&EN pone a su disposición traducciones al español de sus artículos más populares.

C&EN EN ESPAÑOL

Spanish translations of C&EN's best weekly chemistry news.



Los intermedios de zeolita ofrecen nuevas posibilidades en catálisis

En medio de una conocida transformación de fase en zeolitas, los investigadores han encontrado especies activas que aceleran las reacciones catalizadas en medio ácido.

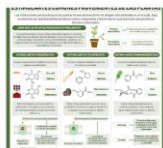
MARCH 21, 2022



Los químicos responden a la invasión de Ucrania

La comunidad científica se solidariza contra la invasión mientras los costes para la ciencia rusa aumentan

MARCH 7, 2022



Infografías Periódicas: Estimulantes comunes provenientes de las plantas

El profesor de química y bloguero de Compound Interest Andy Brunning describe algunos estimulantes conocidos que producen las plantas y explica por qué los producen.

FEBRUARY 28, 2022



Bonnie Bassler, Carolyn Bertozzi y Benjamin Cravatt reciben el Premio Wolf de Química 2022

El premio reconoce la innovación en la intersección entre la química y la biología, dicen los investigadores

FEBRUARY 22, 2022

Queremos hacer de la ciencia de vanguardia más accesible a la comunidad química de habla española, y esta es nuestra contribución. Le da a los nacidos en España, América Latina, o los EE.UU., pero cuyo primer idioma es el español la oportunidad de leer este contenido en su lengua materna. Esperamos que les guste y sea de su utilidad.



Dr. Bibiana Campos Seijo
Editora en Jefe, C&EN

<http://bit.ly/CENespanol>

63

63



Mantente actualizado sobre la industria de la química y sus ciencias afines en la región

Suscríbete al Newsletter de CAS Hispanoamérica

Para darte de alta, puedes enviarnos un correo electrónico a acsihispanoamerica@acs-i.org

¡Hasta pronto!
www.cas.org

acsihispanoamerica@acs-i.org



64

64



SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química nos une"



Sociedad Química de México



Sociedad Química de México, A.C.
"La química nos une"

Desde sus comienzos de la Sociedad Química de México, se buscaba un emblema sencillo, no demostrar partidismo alguno y significar al gremio, debería representar un símbolo no sólo para los químicos, sino también para ingenieros, farmacéuticos, metalurgistas, en fin que englobe e identifique por igual a los científicos en todas sus áreas de la ciencia química.

www.sqm.org.mx

65

65

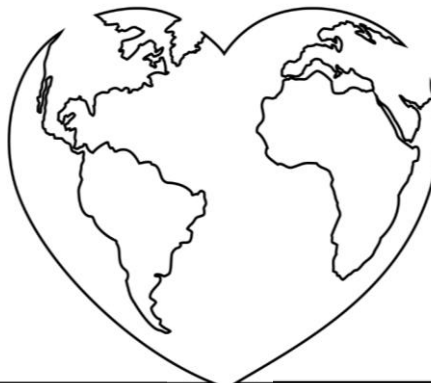


SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.
"La química nos une"



Por el amor a la química venimos de todos partes...

- ✓ Alemania
- ✓ Argentina
- ✓ Bolivia
- ✓ Brasil
- ✓ Canadá
- ✓ Chile
- ✓ China
- ✓ Colombia
- ✓ Costa Rica
- ✓ Ecuador
- ✓ Egipto
- ✓ El Salvador
- ✓ España
- ✓ Estados Unidos
- ✓ Francia
- ✓ Guatemala
- ✓ India
- ✓ Italia
- ✓ Japón
- ✓ México
- ✓ Pakistán
- ✓ Paraguay
- ✓ Perú
- ✓ Portugal
- ✓ Puerto Rico
- ✓ República Dominicana
- ✓ Suecia
- ✓ Uruguay
- ✓ Venezuela



Hoy tenemos representantes de **29 países**

66

66